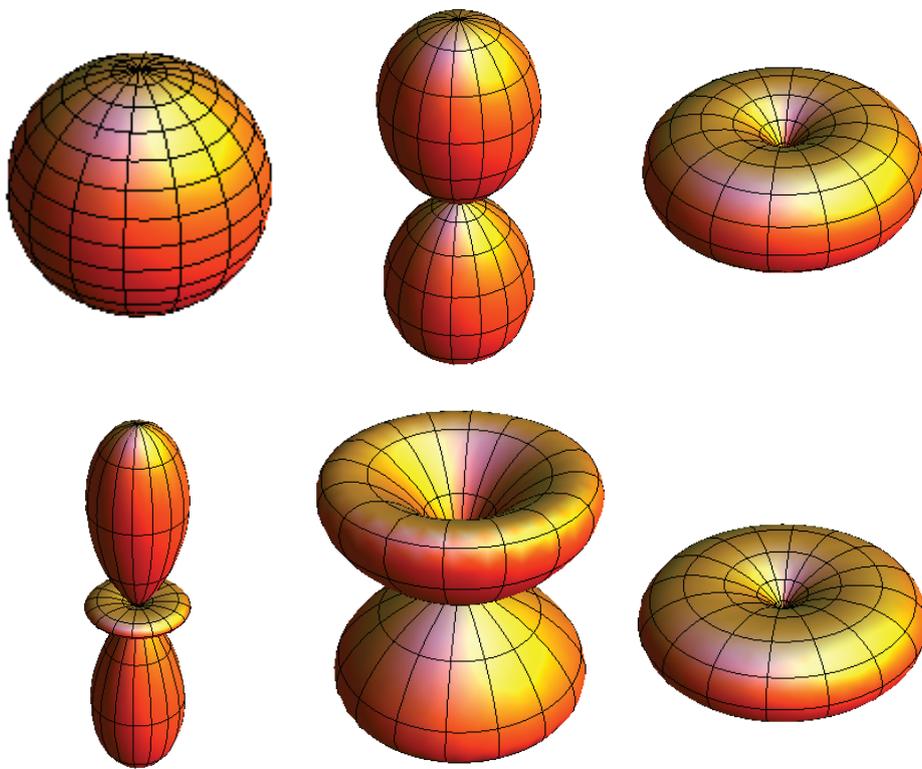


Physik III



Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Optik und optische Instrumente	5
1.1 Geometrische Optik	7
1.1.1 Fermatsches Prinzip	7
1.1.2 Linsen	9
1.1.3 Die Form einer Linse	11
1.1.4 Optische Instrumente	15
1.2 Wellenoptik	19
1.2.1 Kirchhoffsche Beugungstheorie	20
1.2.2 Fraunhofer-Beugung	26
1.2.3 Prinzip von Huygens	33
1.3 Auflösungsvermögen von optischen Instrumenten	34
1.4 Polarisierung	40
1.4.1 Polarisationsarten	40
1.4.2 Doppelbrechende Materialien	41
1.4.3 Fresnel-Gleichungen	42
1.5 Messung von Spektren	48
1.5.1 Das Prisma	49
1.5.2 Das Gitterspektrometer	50
1.5.3 Das Michelson-Interferometer	53
1.5.4 Das Fabry-Pérot-Interferometer	56
1.6 Zusammenfassung	61
2 Der Photoeffekt	65
2.1 Experimentelle Beobachtung des Photoeffekts	65
2.1.1 Messung des Photoeffekts im Vakuum	66
2.2 Erklärung des Photoeffekts	69
2.2.1 Klassische Erwartung	69
2.2.2 Erklärung nach Einstein	70
2.3 Einzelphotonendetektoren	71
2.4 Teilchen- und Wellencharakter	72
2.4.1 Interferenz einzelner Photonen am Doppelspalt	72
2.4.2 Statistische Interpretation	73
2.5 Zusammenfassung	75

3	Inverser Photoeffekt	77
3.1	Klassische Beschreibung der Bremsstrahlung	77
3.2	Röntgen-Strahlung	80
3.2.1	Funktionsweise einer Röntgen-Röhre	80
3.3	Der thermoelektrische Effekt	81
3.4	Beugung von Röntgen-Strahlung	82
3.4.1	Wellenlängenmessungen mit künstlichen Gittern	82
3.4.2	Bragg-Reflexion	83
3.5	Messung des Spektrums einer Röntgen-Röhre	87
3.6	Quantenmechanik des Inversen Photoeffekts	89
3.7	Zusammenfassung	91
4	Der Impuls des Photons	93
4.1	Der Strahlungsdruck	93
4.2	Der Compton-Effekt	96
4.2.1	Das Experiment von Compton	96
4.2.2	Compton-Effekt mit Gammastrahlung	98
4.2.3	Berechnung der Compton-Verschiebung	98
4.2.4	Compton-Streuung und kohärente Streuung	100
4.2.5	Unterschied zwischen Photoeffekt und Compton-Effekt	101
4.3	Zusammenfassung	102
5	Wärmestrahlung	103
5.1	Hohlraumstrahlung - Strahlungsgleichgewicht	103
5.2	Der schwarze Strahler	104
5.3	Der eindimensionale schwarze Strahler	105
5.3.1	Modenstruktur (Eigenschwingungen) eines 1D Körpers	105
5.3.2	Anzahl der möglichen Moden	106
5.3.3	Spektrale Energiedichte	107
5.3.4	Bestimmung der spektralen Energiedichte nach Planck	107
5.3.5	Das Stefan-Boltzmann-Gesetz (1D)	109
5.4	Der dreidimensionale schwarze Strahler	110
5.4.1	Moden des 3D Körpers	110
5.4.2	Anzahl der möglichen Moden	111
5.4.3	Spektrale Energiedichte	112
5.4.4	Das Stefan-Boltzmann-Gesetz (3D)	113
5.4.5	Das Wiensche Verschiebungsgesetz	114
5.4.6	Emittierte Strahlungsleistung eines schwarzen Körpers	115
5.4.7	Die Sonne als Beispiel eines kugelsymmetrischen schwarzen Strahlers	118
5.4.8	Emittierte Strahlungsleistung für reale Strahler	119
5.5	Zusammenfassung	120
6	Materiewellen	123
6.1	Experimenteller Nachweis der Materiewellen	124
6.1.1	Beugung von Elektronenwellen	124
6.1.2	Beugung von Neutronen	127

6.2	Materiewellen und der klassische Grenzfall	128
6.3	Die Wellenfunktion	130
6.4	Wellenpakete	131
6.4.1	Gruppen- und Phasengeschwindigkeit von Materiewellen	132
6.5	Phasengeschwindigkeit und Brechung	133
6.6	Die Dispersion von de Broglie-Wellen	136
6.7	Zusammenfassung	138
7	Das Atom	141
7.1	Die Atommasse	141
7.2	Die Atomgrösse	143
7.2.1	Streuexperimente	143
7.2.2	Weitere Methoden zur Bestimmung der Atomgrösse	145
7.2.3	Abbildungstechniken	146
7.3	Das Periodensystem der Elemente	147
7.4	Massenspektroskopie	149
7.4.1	Parabelmethode nach Joseph John Thomson	149
7.4.2	Verbesserungen der Parabelmethode	151
7.4.3	Anwendungen der Massenspektroskopie	151
7.5	Die Kernstruktur des Atoms	152
7.5.1	Elektronen-Streuung	152
7.5.2	Rutherford-Streuung und das Rutherfordsche Atommodell	153
7.5.3	Rutherfordsche Streuformel	155
7.6	Zusammenfassung	160
8	Bohrsches Atommodell	163
8.1	Atomare Spektren - Diskrete Energiewerte	164
8.1.1	Typische Spektren	165
8.1.2	Klassische Betrachtungen und die Stabilität von Atomen	166
8.1.3	Spektrallinien und das Ritzsche Kombinationsprinzip	167
8.2	Das Wasserstoffatom	168
8.3	Bohrsches Atommodell des Wasserstoffatoms	170
8.3.1	Alternative Formulierung des Bohrschen Atommodells	174
8.3.2	Bemerkungen zum Bohrschen Atommodell	175
8.4	Verallgemeinerung des Bohrschen Atommodells	176
8.4.1	Das Bohrsche Atommodell für Ionen	176
8.4.2	Berücksichtigung der Kernbewegung	177
8.5	Erweiterung des Bohrschen Atommodells	178
8.6	Grenzen des Bohr-Sommerfeld-Modells	179
8.7	Rydberg-Atome	179
8.8	Das Franck-Hertz-Experiment	180
8.8.1	Aufbau und Messung	180
8.8.2	Interpretation	181
8.9	Einstein-Koeffizienten	183
8.10	Zusammenfassung	186

9	Grundlagen der Quantenmechanik	189
9.1	Das erste Postulat: Wellenfunktionen	190
9.1.1	Beispiel: Teilchen im Potentialtopf	191
9.1.2	Darstellung der Wellenfunktion im Impulsraum	193
9.2	Die Heisenbergsche Unschärferelation	194
9.2.1	Beispiel: Beugung einer Materiewelle am Spalt	194
9.2.2	Definition Unschärfe	195
9.2.3	Formulierung nach Heisenberg	197
9.3	Operatoren	198
9.3.1	Erwartungswerte von Ortskoordinate und Impuls	198
9.3.2	Weitere wichtige Operatoren in Ortsraumdarstellung	201
9.3.3	Eigenschaften von Operatoren in der Quantenmechanik	205
9.4	Das zweite Postulat: Die Schrödinger-Gleichung	209
9.4.1	Eigenschaften der Lösungen	212
9.4.2	Beispiele von Lösungen der Schrödinger-Gleichung	213
9.5	Eigenwerte und Eigenfunktionen	228
9.5.1	Scharfe und unscharfe Werte von Observablen	228
9.5.2	Eigenfunktionen und Eigenwerte von ausgewählten Operatoren	232
9.5.3	Das dritte Postulat: Die quantenmechanische Messung	235
9.5.4	Simultane Eigenfunktionen zweier Operatoren	236
9.5.5	Orthogonalität der Eigenfunktionen	238
9.5.6	Linearkombinationen von Eigenfunktionen	242
9.5.7	Entwicklung nach Eigenfunktionen	245
9.6	Systeme mit vielen Freiheitsgraden	246
9.7	Zusammenfassung	246
10	Harmonischer Oszillator	251
10.1	Klassische Bewegungsgleichung	251
10.2	Quantenmechanische Lösung	253
10.2.1	Formulierung der Schrödinger-Gleichung	253
10.2.2	Berechnung des Grundzustands	255
10.2.3	Berechnung der restlichen Eigenzustände	256
10.2.4	Zusammenfassung der Lösung - Hermite-Polynome	259
10.2.5	Die Nullpunktsenergie	260
10.2.6	Kohärente Zustände	261
10.3	Vergleich Klassisch - Quantenmechanik	263
10.4	Zusammenfassung	264
11	Das Wasserstoffatom	267
11.1	Die Schrödinger-Gleichung	268
11.2	Lösung der Schrödinger-Gleichung	270
11.2.1	Lösung für die Polarkomponente	272
11.2.2	Gesamtlösung des winkelabhängigen Anteils der Wellenfunktion	273
11.2.3	Lösung für die radiale Funktion	277
11.2.4	Porträts einiger Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms	283

11.3 Zusammenfassung - Gesamtlösung	285
12 Der Zeeman-Effekt	289
12.1 Historische Bemerkungen	289
12.2 Semiklassisches Modell	290
12.3 Quantenmechanische Betrachtung	292
12.4 Das Spektrum des Wasserstoffatoms	294
12.5 Zusammenfassung	296
13 Der Spin des Elektrons	297
13.1 Experimentelle Beobachtungen	297
13.1.1 Das Stern-Gerlach-Experiment	298
13.2 Einbindung in die Quantenmechanik	299
13.3 Die Pauli-Matrizen	302
13.3.1 Leiteroperatoren	304
13.4 Zusammenfassung	304
14 Die Spin-Bahn-Kopplung	307
14.1 Semiklassisches Modell	307
14.1.1 Größenordnung der Spin-Bahn-Kopplung	309
14.2 Quantenmechanische Beschreibung	310
14.2.1 Der Hamilton-Operator der Spin-Bahn-Kopplung	311
14.2.2 Verknüpfung der Spinvariablen mit der Ortswellenfunktion	312
14.2.3 Der Gesamtdrehimpuls eines Einelektronensystems	315
14.2.4 Semiklassisches Modell der Spin-Bahn-Kopplung	318
14.2.5 Quantenmechanische Betrachtung der Spin-Bahn-Kopplung	319
14.2.6 Die Feinstrukturaufspaltung des Wasserstoffatoms	321
14.3 Der anomale Zeeman-Effekt	324
14.4 Zusammenfassung	326
15 Elektronische (Dipol-) Übergänge	329
15.1 Oszillierende Ladungsverteilungen	330
15.1.1 Der quantenmechanische harmonische Oszillator	330
15.1.2 Das Wasserstoffatom	333
15.2 Absorption und Stimulierte Emission	333
15.2.1 Lösung für schwache, streng monochromatische Strahlung	336
15.2.2 Lösung für schwache, nicht-monochromatische Strahlung .	341
15.3 Auswahlregeln	342
15.3.1 Auswahlregeln für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator	342
15.3.2 Auswahlregeln für Dipolübergänge im Wasserstoffatom . .	344
15.4 Zusammenfassung	349
16 Mehrelektronenatome	351
16.1 Die Wellenfunktion	351
16.1.1 Das vierte Postulat der Quantenmechanik	351
16.1.2 Die Austauschsymmetrie	352

16.2	Das Pauli-Prinzip	355
16.3	Fermionen und Bosonen	356
16.4	Der Aufbau von Mehrelektronenatomen	356
16.4.1	Das Periodensystem der Elemente	357
16.4.2	Gesamtbahndrehimpuls, Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls	360
16.4.3	Hundsche Regeln	362
16.5	Zusammenfassung	365
A	Gauss-Verteilung	369
B	Heisenbergsche Unschärferelation	373
B.1	Schwarzsche Ungleichung	373
B.2	Herleitung	374
B.3	Beispiel	376
C	Beweis Gram-Schmidt	377
D	Entwicklung einer Dreiecksfunktion	379
E	Harm. Oszillator - Potenzreihenansatz	381
F	Laplace-Operator	385
G	Quadrat des Bahndrehimpulsoperators	391
H	Berechnung Kommutatorrelationen	393
I	Mathematische Funktionen	399
I.1	Hermite-Polynome	399
I.2	Legendre-Polynome	400
I.3	Zugeordnete Legendre-Polynome	401
I.4	Laguerre-Polynome	402
I.5	Zugeordnete Laguerre-Polynome	403
I.6	Kugelfunktionen	404
J	Hamilton-Funktion im Magnetfeld	407
K	Pauli-Matrizen	409
L	Notation	413
L.1	Notation	413
L.2	Mathematische Symbole	415
L.3	Abkürzungen	415
L.4	Physikalische Einheiten	415
L.5	Physikalischen Grössen und deren Bezeichnung	415
L.6	Physikalische Konstanten	416
M	Nobelpreisliste	427

Einleitung

Liebe Studierende,

die Vorlesung Physik III behandelt die Themen Optik, Quanten- und Atomphysik, und statistische Physik. Dabei liegt der Fokus der Vorlesung darauf ihnen eine grundlegende Einführung in diese Themen aus der Sicht der Experimentalphysik zu geben. Dabei lassen wir uns häufig bei der Entwicklung der Grundlagen dieser Gebiete von experimentellen Beobachtungen leiten. In der Vorlesung führen wir zu diesem Zweck eine Anzahl von Demonstrationsexperimenten durch und diskutieren diese ausführlich.

Experimentelle Untersuchungen zu den Eigenschaften von elektromagnetischer Strahlung können uns als ein möglicher Leitfaden durch die Themen dieser Vorlesung dienen. Zur Einführung betrachten wir hier eine Reihe von experimentellen Situationen bei denen grundsätzlich verschiedene Eigenschaften von elektromagnetischer Strahlung zu Tage treten.

Wenn zum Beispiel Licht einer gut lokalisierten weit entfernten Quelle auf ein Objekt fällt, so wirft dieses einen scharf umrandeten Schatten auf einen Schirm der zur Beobachtung des vom Objekt gestreuten Lichts aufgestellt wurde. In diesem Fall können wir im Rahmen der geometrischen Optik, in der wir Licht als geometrische Strahlen betrachten, die Eigenschaften der auf dem Schirm beobachteten Abbildung verstehen.

Wenn nun in einem ähnlichen Experiment das selbe Licht auf ein kleines räumlich begrenztes Objekt fällt, dann beobachten wir, dass das Schattenbild auf dem Schirm nicht mehr scharf begrenzt ist, sondern signifikante Modulationen in der Intensität aufweist.

In diesem Fall zeigen beide Experimente in denen jeweils Licht der selben oder einer sehr ähnlichen Quelle auf ein absorbierendes Objekt fällt sehr unterschiedliche Ergebnisse. In der Experimentalphysik ist es grundsätzlich wichtig eine klare Vorstellung von der experimentellen Situation zu entwickeln, unter der ein gewisses physikalisches Phänomen beobachtet wird. Zur Erklärung des jeweiligen Experiments versuchen Physiker dann ein möglichst einfaches und korrektes Modell zu bestimmen, welches die Beobachtung korrekt beschreibt.

Im ersten beschriebenen Experiment reichen die Prinzipien der geometrischen Optik aus, um das beobachtete Phänomen gut zu beschreiben und basierend darauf tragfähige Vorhersagen zu treffen. Beim zweiten Experiment tritt auf relevante Art und Weise hervor, dass Licht sich wie eine elektromagnetische Welle verhält, die an einem Objekt gebeugt wird. Auf Grund des Phänomens der Interferenz führt dies auf dem Schirm zu grossen systematischen Veränderungen der beobachteten Intensität. In diesem Fall tritt also der Wellencharakter des

Lichts in den Vordergrund.

Solche Aspekte des Strahlen- und Wellencharakters des Lichts werden im Optik Teil der Vorlesung diskutiert.

Wenn das Licht nun aber, statt mit einem gewöhnlichen Schirm aufgefangen zu werden, mit einem besonders empfindlichen Detektor gemessen wird, können auch noch weitere wichtige Eigenschaften zu Tage treten. Zum Beispiel führt das Auftreffen von Licht genügend hoher Frequenz auf eine metallische Oberfläche zur Auslösung von einzelnen Elektronen. Solche Experimente zu dem sogenannten Photoeffekt, bewegten Einstein dazu vorherzusagen, dass elektromagnetische Strahlung nicht nur Wellencharakter, wie man ihn in Beugungsexperimenten beobachten kann, zeigt, sondern dass diese Strahlung auch Teilcheneigenschaften besitzt. Diese Teilchen der elektromagnetischen Strahlung werden Photonen genannt. Beobachtungen des Teilchen- und Wellencharakters von elektromagnetischer Strahlung waren enorm wichtig bei der Entwicklung der Quantenmechanik.

Ob nun Teilchen- oder Welleneigenschaften des Lichts zu Tage treten hängt von den Eigenheiten des Experiments ab. Mit Licht kann man Experimente durchführen, die sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften des Lichtes in der selben Apparatur zeigen. Zum Beispiel ist es möglich mit einem sehr schwachen Lichtstrahl die Position des Auftreffens jedes einzelnen Photons auf einem Schirm zu detektieren, nachdem das Licht durch einen Doppelspalt getreten ist an dem Beugung auftritt. Dabei zeigt sich zunächst der Teilchencharakter des Lichts. Trägt man aber nun die Positionen der aufgetroffenen Photonen in einem Histogramm auf, so beobachtet man das von der Beugung aus der Wellenoptik bekannte Interferenzmuster. Die Quantenmechanik wurde Anfang des 20. Jahrhunderts entwickelt, um zum Beispiel solche Phänomene erklären zu können.

Interessanterweise verhält sich nicht nur elektromagnetische Strahlung unter gewissen experimentellen Bedingungen wie ein Strom von Teilchen, sondern auch massebehaftete Teilchen, wie z.B. einzelne Elektronen, einzelne Atome oder gar noch massivere Objekte, zeigen Welleneigenschaften. Dies tun sie nicht nur in Experimenten, wie beim Doppelspalt, sondern in vielen andern physikalischen Situationen. Die Quantenphysik bildet dabei die Grundlage auf derer wir die Welleneigenschaften von Teilchen nutzen, um die Eigenschaften von Atomen zu erklären, zum Beispiel, dass einzelne Atome nur Licht bestimmter Frequenzen aussenden. In diesem Zusammenhang lassen sich mit Hilfe der Quantenphysik die Eigenschaften von Atomen im Rahmen der Atomphysik erklären. Die Einführung in die Grundlagen der Atomphysik nimmt in dieser Vorlesung einen wichtigen Platz ein.

Die Quantenphysik selber konfrontiert uns mit vielen neuen und interessanten Situationen, die wir heute anhand von Experimenten im Labor detailliert untersuchen können. Dabei ist es uns möglich Experimente mit einzelnen mikroskopischen Teilchen durchzuführen, die vor hundert Jahren noch reine Fantasie gewesen wären. Zum Beispiel wird Erwin Schrödinger zitiert gesagt zu haben, dass es ähnlich erfolglos sein würde Experimente mit einzelnen Atomen durchzuführen wie zu versuchen Ichthyosaurier im Zoo zu züchten. Heute werden solche Experimente in vielen Labors weltweit durchgeführt und helfen uns nicht

nur die Quantenphysik besser zu verstehen sondern auch neue auf der Quantenphysik beruhende Technologien, wie zum Beispiel den Quantencomputer, zu entwickeln.

Bei der Erklärung der Interferenz einzelner Teilchen an einem Doppelspalt, stösst man zum Beispiel auf Aspekte, die einem schwer fallen mit den eigenen Erfahrungen aus der klassischen Physik in Einklang zu bringen. Bei diesem Experiment scheinen einzelne Teilchen auf dem Schirm aufzutreffen und dort detektiert zu werden. Auf welche Art und Weise diese Teilchen nacheinander einzeln durch beide Spalte des Doppelspalts treten können, so dass dabei trotzdem Interferenz auftritt, scheint auf den ersten Blick ungewöhnlich. In der Quantenphysik betrachten wir häufig solche ungewöhnlichen Situationen, die unseren klassischen Erfahrungen widersprechen.

Eine besondere Situation ergibt sich auch in dem Gedankenexperiment, welches heute unter der Bezeichnung Schrödinger's Katze bekannt ist. Dabei hat Schrödinger die folgende, aus seiner Sicht absurde Situation beschrieben. Er betrachtete dabei eine Katze, die sich in einem abgeschlossenen Kasten befindet, der für den Beobachter nicht einsehbar ist. In dem Kasten befindet sich ein Mechanismus, der die Katze tötet, wenn ein einzelner radioaktiver Kern nach den Regeln der Quantenphysik zerfällt. Dies führt zu der ungewöhnlichen Situation, dass bevor der Beobachter den Kasten öffnet, um das Schicksal der Katze zu überprüfen sich diese in einem unbestimmten Zustand befindet. Die Katze ist entweder noch lebendig, wenn der Kern noch nicht zerfallen ist oder sie ist nicht mehr lebendig, wenn der Kern bereits zerfallen ist. Dieses Phänomen ist in der Quantenphysik unter der Bezeichnung Verschränkung bekannt. Wir werden eine Reihe solcher und ähnlicher Phänomene im Rahmen dieser Vorlesung erkunden.

Im Rahmen der Vorlesung werden wir des weiteren Aspekte der statistischen Physik erkunden. Diese sind auch im Kontext der Entwicklung der Quantenmechanik von grosser Bedeutung. Bei der Untersuchung der von heissen Körpern ausgesandten elektromagnetischen Strahlung, fiel zum Beispiel auf, dass deren Spektrum eine bestimmte universelle Frequenzabhängigkeit zeigte, die sich nicht klassisch erklären liess. Max Planck und Albert Einstein konnten diese Besonderheit des Spektrums erklären, in dem sie die Strahlung beschrieben als bestehend aus einer Verteilung von Photonen spezifischer Frequenzen, die nur von der Temperatur des strahlenden Objekts abhängt. Dabei ist es relevant, dass die Photonen Teilchen mit quantenmechanischen Eigenschaften sind. Die statistische Verteilung solcher Teilchen auf die verschiedenen möglichen Energien wird in der statistischen Physik unter Beachtung der klassischen und quantenmechanischen Eigenschaften der Teilchen ergründet. Mit Hilfe solcher statistischer Untersuchungen lassen sich die Eigenschaften z.B. von Gasen, von Photonen des Lichts und von Elektronen in Festkörpern erklären.

Kapitel 1

Optik und optische Instrumente

Licht oder allgemein elektromagnetische Wellen sind eines der wichtigsten Hilfsmittel zur Untersuchung der Natur. Daher spielt Licht eine entscheidende Rolle in der Biologie, der Chemie und insbesondere auch in der Physik. Aus diesem Grund befassen wir uns mit der Optik, dem Teilbereich der Physik, der sich mit der Ausbreitung von Licht und mit der Wechselwirkung von Licht mit Materie auseinandersetzt.

In der klassischen Elektrodynamik wird elektromagnetische Strahlung (Licht) erfolgreich als Wellenphänomen beschrieben. Die Maxwell-Gleichungen erlauben es eine grosse Anzahl von Beobachtungen präzise zu erklären. Ein klassisches Beispiel ist die Beugung von Licht an einem Einzelspalt oder die Interferenz von Licht an einem Doppelspalt. Diese Phänomene lassen sich durch die Welleneigenschaften von elektromagnetischer Strahlung vollständig beschreiben.

Unter bestimmten experimentellen Bedingungen zeigt elektromagnetische Strahlung jedoch Eigenschaften, die sich nicht mehr mit klassischem Elektromagnetismus im Wellenbild erklären lassen. Zum Beispiel zeigt sich, dass die Energie, die von einer elektromagnetischen Welle transportiert wird, in Einheiten von einzelnen Photonen quantisiert ist. Des Weiteren kann man beobachten, dass diese Lichtteilchen, obwohl sie masselos sind, ebenfalls einen Impuls tragen.

Welche dieser Eigenschaften des Lichts nun beobachtet werden, hängt sehr spezifisch von den Bedingungen ab, unter welchen Experimente mit Licht durchgeführt werden.

Zur Einführung betrachten wir anhand eines allgemeingültigen experimentellen Aufbaus zur Untersuchung der Eigenschaften von Licht (siehe Abb. 1.1) verschiedene Bedingungen, unter denen Wellen- oder Teilcheneigenschaften von Licht zu beobachten sind. Der Aufbau besteht zunächst aus einer häufig als punktförmig approximierten Lichtquelle, die Licht der Wellenlänge λ (Frequenz ν) mit einer Intensität I (Leistung pro Fläche) isotrop (mit denselben Eigenschaften) in alle Richtungen des Raumes aussendet. Befindet sich die Lichtquelle im Brennpunkt einer Sammellinse der Brennweite f , so lässt sich das Licht hinter der Linse in guter Näherung als ebene elektromagnetische Welle beschreiben. Häufig wird dann die Wechselwirkung des so erzeugten Lichts mit einem Objekt von Interesse untersucht. Dieses Objekt könnte zum Beispiel ein Doppelspalt sein oder auch ein einfaches kugelförmiges Objekt mit Durchmesser d und Mas-

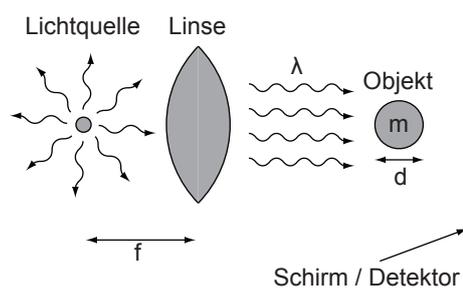


Abb. 1.1: Typischer Aufbau zur Untersuchung der Eigenschaften von Licht: Eine punktförmige, sich im Brennpunkt einer Sammellinse befindende Lichtquelle sendet Licht aus. Nach der Linse trifft dieses auf ein Objekt der Masse m und der Grösse d und wird schlussendlich auf einem Schirm oder einem Detektor registriert.

se m . Nach der Wechselwirkung mit dem Objekt wird das Licht meistens mit einem Schirm, oder einem anders beschaffenen Detektor, aufgefangen und die Intensität I der detektierten Strahlung als Funktion des Ortes dargestellt.

Bei der Durchführung und Interpretation von Experimenten dieser Art sind die experimentellen Bedingungen, die mitunter starken Einfluss auf die beobachtbaren physikalischen Phänomene haben, ausschlaggebend.

- a) In der **geometrischen Optik** beschreiben wir das Licht als geometrische Strahlen, die sich nach einfachen Prinzipien im Raum ausbreiten. Dabei nehmen wir an, dass die Wellenlänge des verwendeten Lichts λ viel kleiner ist als die Objekte mit denen es wechselwirkt. λ ist aber typischerweise gleichzeitig gross gegen atomare Längenskalen der relevanten Objekte. Ebenfalls nehmen wir realistischerweise an, dass die Massen m der im Experiment verwendeten Objekte so gross sind, dass das mit ihnen wechselwirkende Licht keinen nennenswerten Impuls auf die Objekte überträgt. Ausserdem ist die Intensitätsverteilung des Lichts nach passieren der Apparatur nur mit endlich grosser Auflösung messbar. Dies führt dazu, dass Interferenz¹ und Beugungsphänomene² in Abhängigkeit von der Wellenlänge des Lichts, von den geometrischen Eigenschaften des Strahlengangs und von der Ortsauflösung des Detektors meist nicht beobachtet werden können. In einem solch einfachen Fall ergibt sich die Intensitätsverteilung auf dem Schirm schlicht als geometrisches Schattenbild des Objekts.
- b) In der **Wellenoptik** betrachtet man den Fall, dass die Wellenlänge λ des verwendeten Lichts von ähnlicher Grössenordnung sein kann wie die Abmessungen d des Objekts. In diesem Fall treten Interferenz- oder Beugungserscheinungen bei den Experimenten zu Tage, z.B. wenn Doppelspalte oder Gitter als Objekte verwendet werden. Bei ausreichend grosser Ortsauflösung des Detektors, z.B. von der Grössenordnung λ , können Beugungserscheinungen z.B. auch an einem einzelnen kugelförmigen Objekt beobachtet werden. Dabei bemerken wir, dass die Masse m der im

¹Unter Interferenz versteht man die Überlagerung von zwei oder mehr Wellen nach dem Superpositionsprinzip, d.h. die Wellen überlagern sich ohne sich gegenseitig zu beeinflussen. Mathematisch ausgedrückt heisst das: Die elektrische Feldstärke der resultierenden Welle ergibt sich durch Addition der elektrischen Feldstärken der Einzelwellen. Jedoch ergibt sich die Intensität der resultierenden Welle nicht aus den Intensitäten der Einzelwellen.

²Als Beugung bezeichnet man das Eindringen von Wellen in den geometrischen Schattenraum eines Objekts.

Experiment betrachteten Objekte immer noch gross ist, so dass der Impulsübertrag bei der Wechselwirkung mit Photonen vernachlässigt werden kann. Unter diesen Bedingungen zeigt das Licht klar die Eigenschaften elektromagnetischer Wellen.

- c) In der **Quantenoptik** betrachten wir nun die Situation, dass die Objekte, deren Wechselwirkung mit Licht wir beobachten, kleiner sind als die Wellenlänge des Lichts, d.h. $d \ll \lambda$, und die Masse m klein genug ist, so dass das Licht einen merkbaren Impuls auf das Objekt übertragen kann. In diesem Fall werden neue Effekte wie z.B. der Photoeffekt (siehe Kapitel 2) oder der Compton-Effekt (siehe Abschnitt 4.2) beobachtbar. Beim Photoeffekt werden durch die Wechselwirkung mit einzelnen Photonen einzelne Elektronen aus einem Material gelöst. Der Compton-Effekt beschreibt die Wechselwirkung zwischen einem Photon und einem freien Elektron. Es wird sich herausstellen, dass diese Wechselwirkung analog zur Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen, bei der Energie- und Impulserhaltung gilt, betrachtet werden kann. Hier reicht eine klassische Beschreibung der Eigenschaften des Lichts im Wellenbild nicht mehr aus, um die auftretenden physikalischen Phänomene zu beschreiben. Mit solchen Situationen werden wir uns ausführlich in den nächsten Kapiteln befassen.

In diesem Kapitel befassen wir uns zunächst mit dem klassischen Zugang zur Beschreibung von Licht, der geometrischen Optik und der Wellenoptik. Im Bereich der geometrischen Optik steht die Behandlung von Abbildungen durch Linsen oder Linsensysteme wie das Teleskop oder das Mikroskop im Zentrum. In der Wellenoptik diskutieren wir insbesondere die Phänomene Interferenz, Beugung und Polarisation, sowie die Messung von Spektren.

1.1 Geometrische Optik

Wie bereits erwähnt, befasst sich die geometrische Optik mit dem Grenzfall, bei dem die Wellenlänge des Lichts viel kleiner ist als die Objekte mit denen es wechselwirkt und die Objekte eine grosse Masse aufweisen. In diesem Fall kann Licht durch Strahlen beschrieben werden. In diesem Abschnitt befassen wir uns ausführlich mit diesem Grenzfall. Als erstes gehen wir auf das Fermatsche Prinzip ein, welches die Grundlage für die geometrische Optik bildet. Als nächstes behandeln wir Linsen und deren Abbildungseigenschaften und zum Abschluss die Anwendung von Linsen in optischen Instrumenten.

1.1.1 Fermatsches Prinzip

In der Literatur lassen sich verschiedene Formulierungen des Fermatschen Prinzips finden. Die zwei meistverbreiteten sind die folgenden:

- Das Licht wählt von einem Punkt zu einem anderen den Weg, für den die benötigte Zeit minimal ist.

- Das Licht wählt von einem Punkt zu einem anderen den Weg, welcher extremal ist bezüglich Variationen der optischen Weglänge.

Die erste Formulierung ist möglichst einfach gehalten, so dass jeder sich etwas darunter vorstellen kann. Die zweite Formulierung bedarf noch weitere Ausführungen, ist aber besser geeignet für die mathematische Beschreibung des Fermatschen Prinzips. Wir wenden uns deshalb der zweiten Formulierung zu und führen den Begriff der optischen Weglänge ein. Die optische Weglänge ist ein Maß für die Zeit, die das Licht benötigt um von einem Punkt zu einem anderen zu gelangen. Wie es der Name schon sagt, ist es aber eine Längenangabe. Zur Motivation der Definition bestimmen wir die Zeit, die das Licht benötigt um von einem Punkt zu einem anderen zu gelangen. Im Vakuum benötigt das Licht für eine Distanz s die Zeit

$$t = \frac{s}{c}, \quad (1.1)$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Legt das Licht jedoch dieselbe Strecke s in einem Medium mit Brechungsindex n zurück, so breitet es sich mit einer Geschwindigkeit c/n aus und benötigt daher die Zeit

$$t = \frac{ns}{c}. \quad (1.2)$$

Aus diesem Grund legt man die *optische Weglänge OWL* fest als Produkt aus Brechungsindex n des Mediums und zurückgelegtem Weg s des Lichts

$$OWL = ns. \quad (1.3)$$

Das Fermatsche Prinzip besagt nun, dass die optische Weglänge zwischen dem vom Licht gewählten Weg und einem leicht von diesem abweichenden Weg in erster Ordnung nicht ändert.

Die einfachste Folgerung aus dem Fermatschen Prinzip ist, dass sich Licht in einem homogenen Medium entlang einer geraden Linie bewegt. Dies entspricht dem Minimum der entsprechenden optischen Weglänge und folglich einem Extremalwert. In diesem einfachen Fall wäre auch die erste einfachere Formulierung des Fermatschen Prinzips ausreichend und würde zum selben Schluss führen.

Zur besseren Illustration der Anwendung des Fermatschen Prinzips, betrachten wir eine aus der Elektrodynamik bekannte Fragestellung: Welchen Weg wählt das Licht zwischen zwei Punkten $P_1(x_1, z_1)$ und $P_2(x_2, z_2)$, wobei sich der erste im Medium 1 mit Brechungsindex n_1 und der zweite im Medium 2 mit Brechungsindex n_2 befindet (siehe Abb. 1.2)? Bezeichnen wir den Punkt, bei dem das Licht vom Medium 1 ins Medium 2 übergeht mit $P_c(x_c, 0)$, so ergibt sich für die optische Weglänge $OWL(x_c)$ in Abhängigkeit von x_c von P_1 nach P_2

$$OWL(x_c) = n_1 \sqrt{(x_c - x_1)^2 + z_1^2} + n_2 \sqrt{(x_c - x_2)^2 + z_2^2}. \quad (1.4)$$

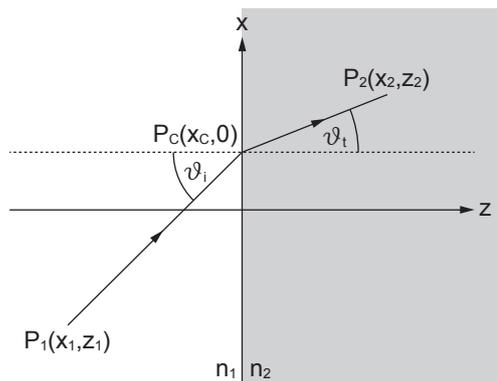


Abb. 1.2: Das Licht breitet sich von einem Medium mit Brechungsindex n_1 in ein zweites Medium mit Brechungsindex n_2 aus. Den Weg, den das Licht von $P_1(x_1, z_1)$ nach $P_2(x_2, z_2)$ wählt, geht durch den Punkt $P_c(x_c, 0)$, welcher durch das Fermatsche Prinzip bestimmt werden kann.

Den Extremalwert (Minimum) erhalten wir, indem wir die Ableitung der optischen Weglänge $OWL(x_c)$ nach x_c gleich null setzen. Es ergibt sich

$$\frac{\partial OWL(x_c)}{\partial x_c} = n_1 \frac{x_c - x_1}{\sqrt{(x_c - x_1)^2 + z_1^2}} + n_2 \frac{x_c - x_2}{\sqrt{(x_c - x_2)^2 + z_2^2}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (1.5)$$

Führen wir den Einfallswinkel ϑ_i und den Ausfallswinkel ϑ_t ein, so ergibt sich daraus das bekannte Brechungsgesetz von Snellius³

$$n_1 \sin \vartheta_i = n_2 \sin \vartheta_t. \quad (1.6)$$

Analog lässt sich mit dem Fermatschen Prinzip das Reflexionsgesetz herleiten.

1.1.2 Linsen

Eines der wichtigsten optischen Elemente sind Linsen. Darunter versteht man speziell geformte transparente Körper, die in optischen Instrumenten (z.B. Mikroskop oder Auge) verwendet werden um Gegenstände abzubilden. Sie werden gemäss ihren Abbildungseigenschaften in Sammellinsen (konvexe Linsen) und Streulinsen (konkave Linsen) unterteilt. Wir beschränken uns hier auf die Diskussion von Sammellinsen (siehe Abb. 1.3).

Als erstes befassen wir uns mit der Frage, wie eine Sammellinse ein Bild eines Gegenstands erzeugt und wie dieses konstruiert werden kann. Die entscheidende Bedingung, damit ein Bildpunkt entsteht ist, dass sich alle Lichtstrahlen eines Gegenstandspunkts, die den Bildschirm hinter der Linse treffen, ihn in einem Punkt treffen. Zur Konstruktion des Bildes beschränken wir uns auf dünne Sammellinsen. Diese haben folgende zwei wichtige Eigenschaften:

- Wie allgemein bei Sammellinsen, wird ein parallel zur optischen Achse einfallender Lichtstrahl (Parallelstrahl) an einer dünnen Sammellinse so gebrochen, dass er anschliessend durch den Brennpunkt der Linse geht.

³Die Bezeichnung der Winkel kommt aus dem Englischen: angle of incidence bzw. transmission angle.

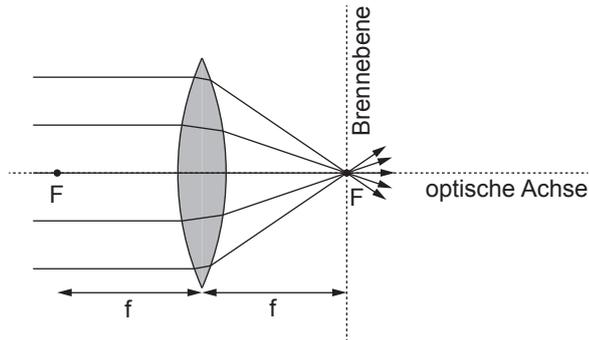


Abb. 1.3: Eine Sammellinse bricht Lichtstrahlen, die parallel zur optischen Achse eintreffen so, dass sie sich im Brennpunkt F der Sammellinse kreuzen. Der Abstand zwischen Linsenmitte und dem Brennpunkt F bezeichnet man als Brennweite f der Linse.

- Ein Lichtstrahl, der durch die Linsenmitte geht (Mittelpunktstrahl) durchläuft die Sammellinse geradlinig.

Das Bild eines Gegenstands lässt sich nun wie folgt konstruieren: Für einige ausgezeichnete Gegenstandspunkte werden die entsprechenden Parallel- und Mittelpunktstrahlen gezeichnet und die Schnittpunkte bestimmt. Bei der Abbildung eines Bleistifts genügt z.B. die Konstruktion der Bildpunkte P' und Q' für die beiden Endpunkte P und Q (siehe Abb. 1.4). Da wir bei dieser Konstruktion den genauen Verlauf der Lichtstrahlen durch die Linse nicht kennen müssen, haben wir die Linse in Abb. 1.4 auf die Hauptebene der Linse reduziert. Zudem haben wir die Gegenstandsgröße G , die Bildgröße B , die Gegenstandsweite g und die Bildweite b eingeführt. Nach dem zweiten Strahlensatz ergeben sich folgende Beziehungen

$$\frac{B}{G} = \frac{b}{g}, \quad (1.7)$$

$$\frac{B}{G} = \frac{b-f}{f}. \quad (1.8)$$

Gleichung (1.7) entspricht dem *Abbildungsgesetz* für dünne Sammellinsen und durch Gleichsetzen der Gleichungen (1.7) und (1.8) und einigen Umformungen erhalten wir zudem die *Linsegleichung* für dünne Sammellinsen

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{g} + \frac{1}{b}. \quad (1.9)$$

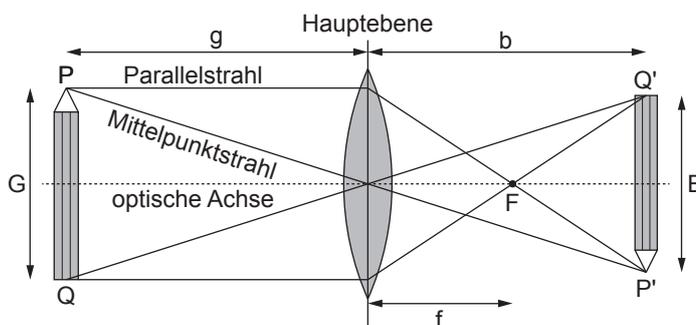


Abb. 1.4: Abbildung eines Bleistifts mit einer sehr dünnen Sammellinse: Die Bildpunkte P' und Q' ergeben sich als Schnittpunkte von Parallel- und Mittelpunktstrahl der Gegenstandspunkte P und Q .

Bevor wir im nächsten Abschnitt auf die Form einer Linse eingehen, diskutieren wir hier noch einige der Abbildungseigenschaften einer Sammellinse. Genauer gesagt, wir fragen uns, welchen Einfluss die Wahl der Gegenstandsweite g auf das Bild hat. Eine Übersicht gibt Tab. 1.1. An dieser Stelle gehen wir nur kurz auf den Spezialfall $g = f$ ein. In diesem Fall breiten sich die Lichtstrahlen, ausgehend von einem Punkt in der Brennebene, nach der Linse parallel unter einem bestimmten Winkel zur optischen Achse aus. Da sich diese parallelen Lichtstrahlen nicht kreuzen, entsteht somit auch kein Bildpunkt. Umgekehrt trifft sich parallel einfallendes Licht sich nach der Linse in einem Punkt der Brennebene. Diese Eigenschaft wird bei der Untersuchung von Beugung verwendet (siehe Abschnitt 1.2.2): Um Beugung zu beobachten, ist es wichtig das Licht aus einer bestimmten Richtung auf einen Punkt des Detektors zu fokussieren. Nach unseren Ausführungen können wir dazu eine Sammellinse verwenden und unseren Detektor in der Brennebene aufstellen.

Gegenstandsweite	Bildgrösse	Orientierung	Bildtyp
$g > 2f$	verkleinert	um 180° gedreht	reell
$g = 2f$	gleich gross	um 180° gedreht	reell
$f < g < 2f$	vergrössert	um 180° gedreht	reell
$g = f$	kein Bild		
$g < f$	vergrössert	aufrecht	virtuell

Tab. 1.1: Abbildungseigenschaften einer Sammellinse in Abhängigkeit der Wahl der Gegenstandsweite g . Zum Bildtyp ist anzumerken, dass bei reellen Bildern Licht auf die Hand fällt, wenn diese dorthin gehalten wird, wo das (reelle) Bild gesehen wird. Im Gegensatz dazu fällt bei virtuellen Bildern kein Licht auf die Hand, wenn diese dorthin gehalten wird, wo das (virtuelle) Bild gesehen wird.

1.1.3 Die Form einer Linse

Hier gehen wir der Frage nach, welche Form eine Linse haben sollte. Genauer gesagt fragen wir uns, welche Form eine Linse nach dem Fermatschen Prinzip aufweisen sollte. Um die Aufgabe zu vereinfachen, gehen wir von der einfachsten Linse aus, einer gekrümmten Grenzfläche zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes $n_1 < n_2$ (siehe Abb. 1.5).

Wir wissen, dass sich parallel zur optischen Achse einfallende Lichtstrahlen im Brennpunkt treffen. Nach dem Fermatschen Prinzip müssen nun alle diese parallelen Lichtstrahlen die selbe optische Weglänge aufweisen. Da die Lichtstrahlen, welche weiter entfernt sind von der optischen Achse, einen längeren Weg zurücklegen als Lichtstrahlen, welche sich näher bei der optischen Achse befinden, müssen die näherliegenden gegenüber den weiter entfernten abgebremst werden. Wir können dies bewerkstelligen, indem wir die näherliegenden Lichtstrahlen sich länger durch das „langsamere“ Material n_2 ausbreiten lassen. Aus diesem Grund ergibt sich eine (für Sammellinsen typische) konvexe Grenzfläche.

Wir beschreiben diese Grenzfläche hier noch genauer. Die gesamte optische

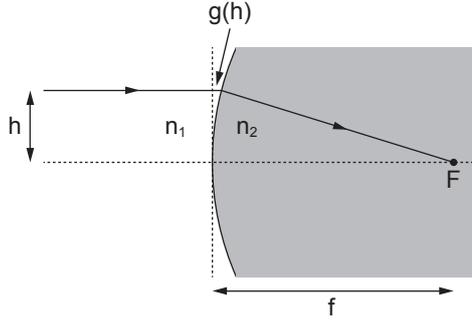


Abb. 1.5: Einfachste Linse: Gekrümmte Grenzfläche zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes $n_1 < n_2$.

Weglänge $OWL(h)$ für einen parallel einfallenden Lichtstrahl in Abhängigkeit des Abstands h gegenüber der optischen Achse ergibt sich zu

$$OWL(h) = n_1 g(h) + n_2 \sqrt{h^2 + (f - g(h))^2}, \quad (1.10)$$

wobei f die Brennweite ist und $g(h)$ der zusätzliche Weg im Material n_1 , welcher ein im Abstand h zur optischen Achse einfallender Lichtstrahl gegenüber einem Lichtstrahl entlang der optischen Achse zurücklegt. Nach dem Fermatschen Prinzip müssen wir nun den Weg bestimmen, welcher extremal ist bezüglich Variationen der optischen Weglänge. In unserem Fall ändert sich der optische Weg in Abhängigkeit des Abstands h des einfallenden Lichtstrahls gegenüber der optischen Achse. Demzufolge haben wir die Ableitung der optischen Weglänge $OWL(h)$ nach h zu bilden und diese gleich null zu setzen. Wir erhalten

$$\frac{\partial OWL(h)}{\partial h} = n_1 g'(h) + \frac{n_2(2h - 2(f - g(h))g'(h))}{2\sqrt{h^2 + (f - g(h))^2}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (1.11)$$

Diese Differentialgleichung zu lösen, ist aufgrund dem mehrfachen Auftreten von $g(h)$ und $g'(h)$ eine komplexe Aufgabe. Daher ist zu vermuten, dass es sich um eine mathematisch schwierig zu beschreibende Linsenform handelt. Dies wird auch deutlich in der Tatsache, dass die Herstellung einer Linse, bei der eine Fehlertoleranz von etwa einer Wellenlänge erlaubt ist, eine grosse Herausforderung darstellt.

Wir betrachten deshalb an dieser Stelle eine Näherungslösung. Wir nehmen an, dass die einfallenden Lichtstrahlen nur kleine Winkel gegenüber der optischen Achse aufweisen und nahe bei der optischen Achse bleiben (paraxiale Näherung), d.h. wir betrachten eine Lösung für kleine h . Als erstes entwickeln wir $g(h)$ für kleine h

$$g(h) \sim a_0 + a_1 h + a_2 h^2. \quad (1.12)$$

Da die Linse symmetrisch ist bezüglich der optischen Achse, kommen nur gerade Potenzen vor. Daher gilt $a_0 = a_1 = 0$ und somit

$$g(h) \sim a_2 h^2. \quad (1.13)$$

Einsetzen in die Gleichung (1.10) für die optische Weglänge $OWL(h)$ ergibt

$$\begin{aligned}
OWL(h) &= n_1 a_2 h^2 + n_2 \sqrt{h^2 + (f - a_2 h^2)^2} \\
&= n_1 a_2 h^2 + n_2 \sqrt{h^2 + f^2 - 2a_2 f h^2 + a_2^2 h^4} \\
&\sim n_1 a_2 h^2 + n_2 \sqrt{h^2 + f^2 - 2a_2 f h^2} \\
&= n_1 a_2 h^2 + n_2 f \sqrt{\frac{1 - 2a_2 f}{f^2} h^2 + 1} \\
&\sim n_1 a_2 h^2 + n_2 f \left(1 + \frac{1 - 2a_2 f}{f^2} \frac{h^2}{2} \right) \\
&= f n_2 + \frac{(n_2 + 2f(n_1 - n_2)a_2)h^2}{2f} \tag{1.14}
\end{aligned}$$

Ableiten nach h und gleich null setzen ergibt

$$\frac{\partial OWL(h)}{\partial h} = \frac{(n_2 + 2f(n_1 - n_2)a_2)h}{f} \stackrel{!}{=} 0. \tag{1.15}$$

Daraus folgt

$$a_2 = -\frac{n_2}{2(n_1 - n_2)f} \tag{1.16}$$

und somit

$$g(h) = -\frac{n_2}{2(n_1 - n_2)f} h^2. \tag{1.17}$$

Das bedeutet, dass die Grenzfläche innerhalb unserer Näherung parabelförmig ist. Es stellt sich jedoch heraus, dass auch parabelförmige Flächen nicht so einfach herzustellen sind, weshalb oftmals kugelförmige Flächen verwendet werden. Für eine kugelförmige Grenzfläche mit Radius $R \gg h$ gilt

$$g(h) = R - \sqrt{R^2 - h^2} \sim \frac{h^2}{2R}. \tag{1.18}$$

Gleichsetzen mit (1.17) ergibt für den Krümmungsradius

$$R = \frac{f(n_2 - n_1)}{n_2}. \tag{1.19}$$

Demzufolge benötigen wir für eine kleine Brennweite f (starke Linse) einen kleinen Krümmungsradius R . Das wiederum bedeutet, dass die Grenzfläche stark gekrümmt ist und im Allgemeinen eine dicke Linse eingesetzt werden muss.

In unserer Berechnung haben wir zwei Näherungen benutzt: Die erste bestand darin, dass wir die vierte und alle höheren Ordnungen in h vernachlässigt haben und die zweite, dass wir die parabelförmige Grenzfläche durch eine kugelförmige ersetzt haben. Es stellt sich nun die Frage, welcher Fehler (in der optischen Weglänge) durch diese Näherungen entsteht. Um den führenden Term des Fehlers zu bestimmen, entwickeln wir die Funktion $g(h)$ für die kugelförmige

Grenzfläche bis zur vierten Ordnung in h und setzen das Resultat in die Gleichung (1.10) für die optische Weglänge $OWL(h)$ ein. Die Entwicklung von $g(h)$ ergibt

$$g(h) = R - \sqrt{R^2 - h^2} \sim \frac{h^2}{2R} + \frac{h^4}{8R^3} = \frac{n_2 h^2}{2f(n_2 - n_1)} + \frac{n_2^3 h^4}{8f^3(n_2 - n_1)^3}, \quad (1.20)$$

wobei wir den Radius R durch (1.19) ersetzt haben. Nun setzen wir diese Formel, wie erwähnt, in die Gleichung (1.10) für die optische Weglänge $OWL(h)$ ein. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} OWL(h) &= n_1 \left(\frac{n_2 h^2}{2f(n_2 - n_1)} + \frac{n_2^3 h^4}{8f^3(n_2 - n_1)^3} \right) \\ &\quad + n_2 \sqrt{h^2 + \left(f - \left(\frac{n_2 h^2}{2f(n_2 - n_1)} + \frac{n_2^3 h^4}{8f^3(n_2 - n_1)^3} \right) \right)^2} \\ &\sim \frac{n_1 n_2 h^2}{2f(n_2 - n_1)} + \frac{n_1 n_2^3 h^4}{8f^3(n_2 - n_1)^3} \\ &\quad + n_2 \sqrt{h^2 + f^2 + \frac{n_2^2 h^4}{4f^2(n_2 - n_1)^2} - \frac{n_2 h^2}{n_2 - n_1} - \frac{n_2^3 h^4}{4f^2(n_2 - n_1)^3}} \\ &= \frac{n_1 n_2 h^2}{2f(n_2 - n_1)} + \frac{n_1 n_2^3 h^4}{8f^3(n_2 - n_1)^3} \\ &\quad + n_2 f \sqrt{1 - \frac{n_1}{f^2(n_2 - n_1)} h^2 - \frac{n_1 n_2^2}{4f^4(n_2 - n_1)^3} h^4} \\ &\sim \frac{n_1 n_2 h^2}{2f(n_2 - n_1)} + \frac{n_1 n_2^3 h^4}{8f^3(n_2 - n_1)^3} + n_2 f \left(1 - \frac{n_1}{f^2(n_2 - n_1)} \frac{h^2}{2} \right. \\ &\quad \left. + \left(-\frac{n_1 n_2^2}{f^4(n_2 - n_1)^3} - \left(\frac{-n_1}{f^2(n_2 - n_1)} \right)^2 \right) \frac{h^4}{8} \right) \\ &= n_2 f - \frac{n_1^2 n_2}{8(n_2 - n_1)^2} \left(\frac{h}{f} \right)^3 h \end{aligned} \quad (1.21)$$

Somit lautet der führende Term des Fehlers in der optischen Weglänge

$$-\frac{n_1^2 n_2}{8(n_2 - n_1)^2} \left(\frac{h}{f} \right)^3 h. \quad (1.22)$$

Wir nennen solche Fehler *Aberrationen*. Im Allgemeinen gibt es verschiedene Arten von Aberrationen. In unserem Fall handelt sich bei der Grenzfläche nicht um diejenige Form, die exakt dem Fermatschen Prinzip entspricht. Man spricht daher von *sphärischen Aberrationen*. *Chromatische Aberrationen* treten auf, da die Brechungsindizes n_1 und n_2 von der Wellenlänge abhängen. An dieser Stelle sei zudem bemerkt, dass wir uns in der Herleitung auf parallel zur optischen Achse einfallende Lichtstrahlen beschränkt haben, die sich im Brennpunkt sammeln. Aufgrund all dieser Punkte ist die Herstellung von Linsen eine ziemlich komplexe Angelegenheit. Je nach Einsatzgebiet kommen aber nicht alle Aber-

rationen zum Tragen, weshalb es wichtig ist, vor der Herstellung den Bereich zu kennen, in dem die Linse eingesetzt werden soll⁴.

Kommen wir nochmals zurück auf den für die optische Weglänge berechneten Fehler (1.22). Einerseits finden wir eine lineare Abhängigkeit von h . Dies entspricht unserer Intuition, dass sich der Fehler proportional zur der Länge eines Systems verhält. Andererseits haben wir eine Abhängigkeit von $(h/f)^3$, d.h. solange $h \ll f$, ist dieser Fehler klein. Wir werden sehen, dass, wenn wir bei einem Mikroskop eine hohe Auflösung erreichen möchten, wir Linsen mit grossem Durchmesser einsetzen müssen (siehe Abschnitt 1.3). Der Grund dafür liegt in der Begrenzung des Auflösungsvermögens durch Beugungseffekte. Wir sollten dabei zudem beachten, dass wenn die Linse zu gross wird, das Auflösungsvermögen auch durch sphärische Aberrationen begrenzt werden könnte, da diese schnell mit h/f anwachsen.

Zum Abschluss dieses Abschnitts sei auch noch darauf hingewiesen, dass wir uns hier mit den einfachsten Linsen beschäftigten. Im Normalfall haben Linsen z.B. zwei Grenzflächen. Dennoch konnten wir einige wesentliche Erkenntnisse über die Form einer Linse gewinnen. Im Weiteren ist es auch möglich auf einem anderen Weg die Form einer Linse zu bestimmen. Eine Alternative wäre z.B. das Brechungsgesetz von Snellius zu verwenden. Schlussendlich sind jedoch alle Möglichkeiten äquivalent, aber je nach Kontext unterschiedlich gut geeignet.

1.1.4 Optische Instrumente

Linsen kommen in verschiedenen optischen Instrumenten zur Anwendung. In diesem Abschnitt besprechen wir einige grundlegende Beispiele.

Das Auge

Das optische Instrument, welches von den Menschen am häufigsten eingesetzt wird, ist das Auge (siehe Abb. 1.6). Es ist ein wunderbares Instrument, hat aber auch seine Einschränkungen. Wir gehen hier kurz auf die einzelnen Bestandteile eines Auges ein und klären die Frage, wie auf der Netzhaut ein Bild entsteht.

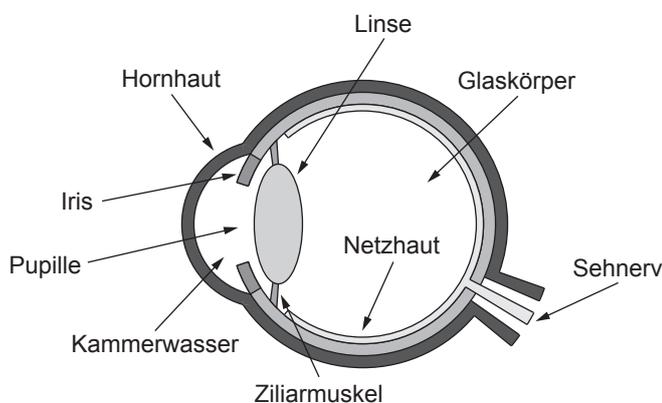


Abb. 1.6: Skizze eines Auges (Querschnitt).

⁴Für weitere Ausführungen sei auf weiterführende Literatur verwiesen[1].

Die *Hornhaut* dient als Schutzschicht für das Auge. Die Aufgabe des *Kammerwassers* ist die Linse und die Hornhaut mit Nährstoffen zu versorgen. Die *Pupille* stellt eine veränderbare Öffnung in der farbigen *Iris* dar und erlaubt es die ins Auge gelangende Lichtmenge zu regulieren. Der ringförmige *Ziliarmuskel* umschliesst die elastische *Linse*. Durch Anspannen oder Entspannen dieses Muskels kann die Form und damit die Brennweite der Linse verändert werden. Die Netzhaut besteht aus lichtempfindlichen Fotorezeptoren, die das Bild registrieren und der Sehnerv leitet schlussendlich die Bildsignale der Netzhaut zum Gehirn weiter.

Verwandte Aufbauten bilden die Grundlage für verschiedene optische Instrumente, wie z.B. die Digitalkamera. Einen wichtigen Unterschied ist jedoch zu erkennen. Bei einer Kamera ist die Brennweite der Linse fest und durch Änderung des Abstands zwischen Linse und „Bildschirm“ kann das Bild scharf gestellt werden. Beim Auge hingegen ist der Abstand zwischen Linse und Netzhaut fest. Dafür erlaubt es der Ziliarmuskel die Brennweite der Linse zu verändern. Dies ist jedoch auch nur begrenzt möglich, was z.B. dazu führt, dass wir ein Bild, das näher als etwa 15 cm vor unseren Augen ist, nicht mehr scharf auflösen können. Weitere Einschränkungen ergeben sich aus der Tatsache, dass die lichtempfindlichen Fotorezeptoren nur eine beschränkte Grösse aufweisen und sich auf einen Teilbereich der Netzhaut beschränken. Diese Einschränkungen können in verschiedenen Situationen zu Problemen führen (z.B. wenn wir Details am Himmel beobachten möchten). Dies führte zur Entwicklung einiger optischer Instrumente, die es erlauben das in unser Auge einfallende Licht so zu manipulieren, dass auch Gegenstände abgebildet werden können, die von unserem Auge nicht scharf abgebildet werden könnten. Zwei davon, das Teleskop und das Mikroskop, betrachten wir im Folgenden etwas genauer.

Das Teleskop

Möchte unser Auge Details am Himmel erkennen, stösst es schnell an seine Grenzen. Treffen z.B. Lichtstrahlen von unterschiedlichen, weit entfernten Objekten (z.B. Sternen) in unser Auge, so entstehen aufgrund des kleinen Winkels zwischen den Lichtstrahlen die Bilder der beiden Objekte in einem einzelnen Fotorezeptor der Netzhaut und wir nehmen sie als ein Bild wahr. Das bedeutet, dass wir diesen Winkel vergrössern müssen, um Details am Himmel zu erkennen. Genau das ist die Funktion eines Teleskops.

Ein Teleskop besteht im Wesentlichen aus zwei Linsen mit den Brennweiten $f_1 > f_2$ (siehe Abb. 1.7). Die Linsen sind hintereinander angeordnet und haben einen gemeinsamen Brennpunkt. Wir betrachten nun zwei Sterne, wobei der erste auf der optischen Achse der Linsen liegt. Die Sterne sind so weit entfernt, dass wir beim Eintreffen der Lichtstrahlen beim Teleskop von parallelen Strahlen ausgehen können. Den Winkel zwischen den Lichtstrahlen des ersten und des zweiten Sterns beim Eintritt in das Teleskop bezeichnen wir mit $\Delta\vartheta$. Aufgrund der ersten Linse entstehen nun in der gemeinsamen Hauptebene der Linsen Zwischenbilder der beiden Sterne mit Abstand

$$h = f_1 \tan(\Delta\vartheta), \quad (1.23)$$

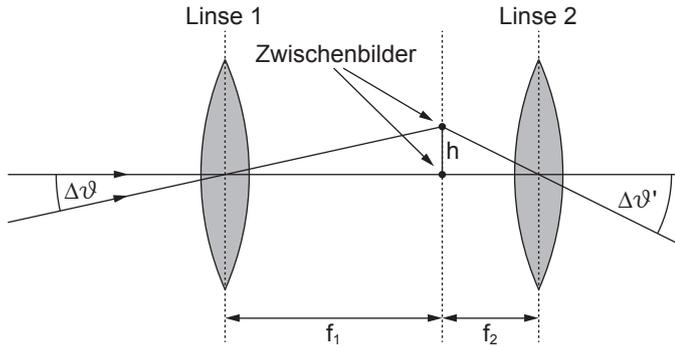


Abb. 1.7: Skizze eines einfachen Teleskops aus zwei Linsen mit den Brennweiten $f_1 > f_2$.

wobei sich das Zwischenbild des ersten Sterns im Brennpunkt befindet. Die zweite Linse richtet die eintreffenden Lichtstrahlen wieder parallel aus. Für den Winkel $\Delta\vartheta'$ zwischen den Lichtstrahlen der beiden Sterne nach dem Teleskop gilt dabei

$$\tan(\Delta\vartheta') = \frac{h}{f_2}. \quad (1.24)$$

Einsetzen von (1.23) ergibt

$$\tan(\Delta\vartheta') = \frac{f_1}{f_2} \tan(\Delta\vartheta). \quad (1.25)$$

Da wir hier kleine Winkel $\Delta\vartheta$ und $\Delta\vartheta'$ vorliegen haben, gilt somit näherungsweise

$$\Delta\vartheta' \sim \frac{f_1}{f_2} \Delta\vartheta. \quad (1.26)$$

Folglich kann ein Teleskop den Winkel $\Delta\vartheta$ um einen Faktor f_1/f_2 vergrößern, was unserem Auge erlaubt auch kleinere Details am Himmel zu erkennen.

Das Mikroskop

Wie erwähnt, ist unser Auge nicht in der Lage Bilder scharf aufzulösen, die näher als etwa 15 cm von unserem Auge entfernt sind. Der Grund dafür ist, dass der Winkelbereich des vom Objekt eintreffenden Lichts zu gross wird und es für die Linse im Auge nicht mehr möglich ist die Lichtstrahlen so zu bündeln, dass ein Bild auf unserer Netzhaut entsteht. Dies führt insbesondere zu Problemen, wenn wir kleine Details von einem Objekt beobachten möchten. Wir betrachten dazu die folgende Situation: Zwei Punkte eines Objekts, welches in einer Distanz d_0 vor der Linse unseres Auges positioniert ist, haben einen Abstand h_0 (siehe Abb. 1.8(a)). Die Netzhaut hat einen festen Abstand d_1 von der Linse, dessen Brennweite wir mit f bezeichnen. Dabei gilt nach dem Abbildungsgesetz (1.7) folgender Zusammenhang

$$h_1 = \frac{h_0 d_1}{d_0}. \quad (1.27)$$

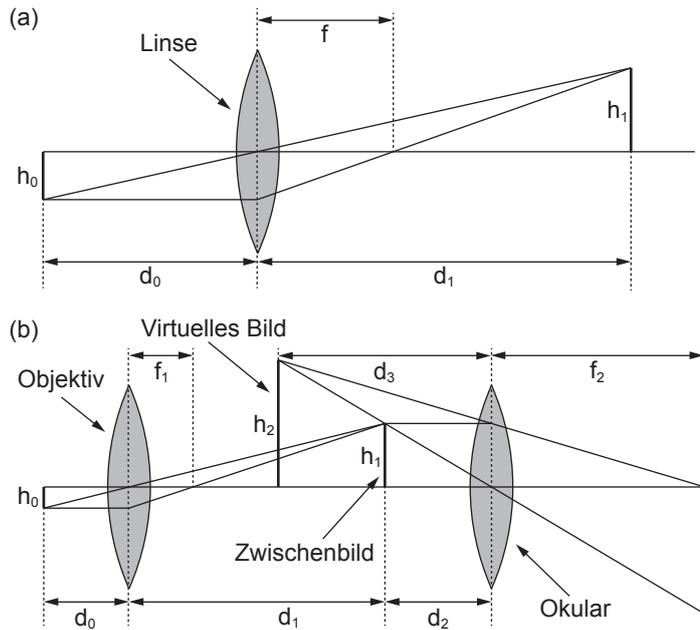


Abb. 1.8: (a) Solange es für die Linse unseres Auges möglich ist ein Bild auf der Netzhaut zu erzeugen, können Details eines Objekts besser erkannt werden, wenn der Abstand zur Linse des Auges verkleinert wird. (b) Skizze eines Mikroskops aus zwei Linsen mit den Brennweiten f_1 und f_2 .

D.h. bringen wir Objekte näher an unser Auge und verkleinern damit d_0 , so vergrößert sich h_1 und wir können Details eines Objekts besser erkennen. Da jedoch der Abstand d_1 fest ist, müsste nach der Linsengleichung (1.9) auch die Brennweite f verkleinert werden, was nur bis zu einem gewissen Grad möglich ist. Das führt, wie zu Beginn erwähnt, dazu, dass nur bis zu einem minimalen Abstand d_0 noch ein Bild auf unserer Netzhaut entstehen kann und wir nicht beliebig kleine Details eines Objekts scharf auflösen können. Um dieses Problem zu lösen, wurden Mikroskope entwickelt.

Ein Mikroskop besteht wie eine Teleskop aus zwei unterschiedlichen Linsen mit Brennweiten f_1 und f_2 (siehe Abb. 1.8(b)). Die Linsen werden dabei als *Objektiv* und *Okular* bezeichnet. Das Objekt wird nun in einem kleinen Abstand d_0 vor dem Objektiv mit Brennweite $f_1 < d_0$ positioniert. Nach der Linsengleichung (1.9) entsteht dann ein Bild im Abstand

$$d_1 = \frac{d_0 f_1}{d_0 - f_1}. \quad (1.28)$$

Für die Bildgröße h_1 gilt nach dem Abbildungsgesetz (1.7)

$$h_1 = \frac{h_0 d_1}{d_0}. \quad (1.29)$$

Diese Vergrößerung kann in manchen Fällen bereits ausreichen, um Details eines Objekts zu erkennen. Ein solches optisches Instrument mit nur einer Linse zur Vergrößerung von Objekten nennt man *Lupe*. Ein Mikroskop hat zusätzlich noch eine zweite Linse (Okular) mit Brennweite f_2 , die in einem Abstand $d_2 < f_2$ vom Zwischenbild platziert ist. Das Bild entsteht nach der Linsengleichung (1.9) in einem Abstand

$$d_3 = \frac{d_2 f_2}{d_2 - f_2}. \quad (1.30)$$

Da $d_2 < f_2$ ist daher d_3 negativ, d.h. das Bild entsteht auf der linken Seite des Okulars. Es stellt sich nun die Frage, wie kann man sich das Zustandekommen dieses Bildes vorstellen. Wie immer, wenn die Gegenstandsweite (d_2) kleiner ist als die Brennweite (f_2), kreuzen sich Parallelstrahl und Mittelpunktstrahl nach der Linse nicht und es sieht aus, als ob kein Bildpunkt entstehen würde. Jedoch hätten wir einen ähnlichen Strahlengang, wenn keine Linse da wäre und dafür der Gegenstand etwas weiter weg und grösser ist. Da das menschliche Auge und Gehirn automatisch von geraden, ungebrochenen Lichtstrahlen ausgeht, nimmt ein Beobachter genau einen solchen scheinbar existierenden Gegenstand wahr. Ein solches Bild nennt man *virtuelles Bild* (siehe Tab. 1.1). Für die Grösse h_2 des virtuellen Bilds gilt nach dem Abbildungsgesetz (1.7)

$$h_2 = \frac{h_1 d_3}{d_2}. \quad (1.31)$$

Somit bewirkt das Okular eine zusätzliche Vergrößerung des Objekts und sorgt zudem dafür, dass das Bild weit vom Auge entfernt ist. Dadurch wird es für das Auge möglich mit Hilfe eines Mikroskops kleine Details eines Objekts zu erkennen.

1.2 Wellenoptik

Innerhalb der geometrischen Optik haben wir uns mit dem Grenzfall beschäftigt, bei dem die Wellenlänge des Lichts viel kleiner ist als die Objekte mit denen es wechselwirkt und die Objekte eine grosse Masse aufweisen. In diesem Fall konnten wir Licht durch Strahlen beschreiben. Nun wechseln wir zu Experimenten, bei denen die Wellenlänge des Lichts von ähnlicher Grössenordnung ist wie die Objekte mit denen es wechselwirkt. Die Masse der Objekte sei weiterhin gross. In diesem Fall treten Interferenz- oder Beugungserscheinungen zu Tage, die wir nur durch die Beschreibung von Licht als Welle verstehen können. In diesem Abschnitt vertiefen wir das Verständnis der Welleneigenschaften des Lichts. Dabei betrachten wir Experimente, bei denen elektromagnetische Strahlung (z.B. sichtbares Licht) ausgehend von einer Quelle Q auf ein Beugungsobjekt (Hindernis) trifft und fragen uns was für eine Intensität wir in einem Beobachtungspunkt P hinter dem Beugungsobjekt messen werden (siehe Abb. 1.9).

Als erstes besprechen wir die Kirchhoffsche Beugungstheorie. Anschliessend werden wir den Spezialfall Fraunhofer-Beugung beleuchten, bei dem sowohl

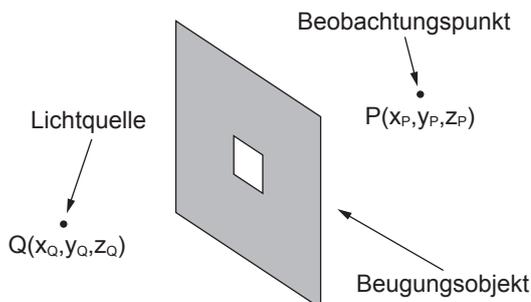


Abb. 1.9: Typischer Aufbau im Rahmen der Wellenoptik: Elektromagnetische Strahlung (z.B. sichtbares Licht) ausgehend von einer Quelle Q trifft auf ein Beugungsobjekt und wir fragen uns was für eine Intensität wir in einem Beobachtungspunkt P hinter dem Beugungsobjekt messen werden.

Lichtquelle und Beobachtungspunkt weit vom Objekt entfernt sind. Weitere Themen sind das Prinzip von Huygens, die Begrenzung des Auflösungsvermögens optischer Instrumente durch Beugung, die Polarisation elektromagnetischer Strahlung und die Messung von Spektren.

1.2.1 Kirchhoffsche Beugungstheorie

Im Rahmen der Physik II Vorlesung wurde das Prinzip von Huygens eingeführt. Dieses besagt:

Jeder Punkt einer bestehenden Wellenfront wird als Quelle einer neuen kugelförmigen Elementarwelle aufgefasst. Die Umhüllende dieser Elementarwellen ergibt dann die Wellenfront zu einem späteren Zeitpunkt.

Mit diesem Prinzip konnte dann unter anderem auf anschauliche Art und Weise das Phänomen Beugung beschrieben werden. Dennoch wurde das fiktive Bild, dass jeder Punkt einer Wellenfront als Quelle einer Elementarwelle aufgefasst werden kann, nur postuliert und nicht aus fundamentalen Prinzipien hergeleitet. Die Besprechung der Beugung nach Kirchhoff wird nun jedoch zeigen, dass die aus dem Prinzip von Huygens hergeleiteten Resultate auch aus der skalaren Wellengleichung folgen, was schlussendlich das Prinzip von Huygens im Nachhinein rechtfertigt.

Bevor wir mit der eigentlichen Beugungstheorie starten können, brauchen wir jedoch das nach dem Mathematiker Green benannte Greensche Theorem für Vektorfelder. Dieses folgt aus dem Satz von Gauss

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{G}(\vec{r}, t) dV = \oint_S \vec{G}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{S}, \quad (1.32)$$

wobei $\vec{G}(\vec{r}, t)$ ein Vektorfeld ist, $\vec{\nabla}$ der Gradient, dV das Volumenelement und $d\vec{S} = \vec{n}dS$ das Flächenelement der Oberfläche S des Volumens V (\vec{n} entspricht dem Normalenvektor der Oberfläche S des Volumens V). Da $\vec{G}(\vec{r}, t)$ beliebig ist, setzen wir $\vec{G}(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)$ und erhalten

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot (\phi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)) dV = \oint_S (\phi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)) \cdot d\vec{S}, \quad (1.33)$$

wobei $\phi(\vec{r}, t)$ und $\psi(\vec{r}, t)$ zwei beliebige skalare Funktionen sind. Ausmultiplizieren ergibt

$$\int_V (\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) + \phi(\vec{r}, t)\Delta\psi(\vec{r}, t)) dV = \oint_S (\phi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)) \cdot d\vec{S}, \quad (1.34)$$

wobei wir den Laplace-Operator $\Delta = \vec{\nabla}^2$ eingeführt haben. Wiederholen wir dieselbe Rechnung für $\vec{G}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t)$ so erhalten wir

$$\int_V (\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t)\Delta\phi(\vec{r}, t)) dV = \oint_S (\psi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t)) \cdot d\vec{S}. \quad (1.35)$$

Bilden wir die Differenz von (1.34) und (1.35) so folgt das Greensche Theorem

$$\begin{aligned} \int_V (\phi(\vec{r}, t)\Delta\psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t)\Delta\phi(\vec{r}, t))dV \\ = \oint_S ((\phi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t)) \cdot \vec{n} - (\psi(\vec{r}, t)\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t)) \cdot \vec{n})dS. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass für jedes Funktionenpaar $\phi(\vec{r}, t)$ und $\psi(\vec{r}, t)$, das die Laplace-Gleichung $\Delta\phi(\vec{r}, t) = 0$ bzw. $\Delta\psi(\vec{r}, t) = 0$ erfüllt, die linke Seite der Gleichung (1.36) verschwindet. Dies ist vor allem in der Elektrostatik von Interesse, da die Laplace-Gleichung der homogenen Poisson-Gleichung entspricht. Wie in der Einleitung erwähnt, interessieren uns hier jedoch Funktionen, die die skalare Wellengleichung erfüllen, d.h. Wellenfunktionen $V(\vec{r}, t)$, die folgende Gleichung lösen⁵

$$\Delta V(\vec{r}, t) - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 V(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (1.37)$$

wobei n dem Brechungsindex und c der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum entspricht. Wir wählen nun für die Wellenfunktion $V(\vec{r}, t)$ den harmonischen Ansatz

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})e^{i\omega t}. \quad (1.38)$$

Einsetzen in die Wellengleichung (1.37) ergibt

$$\Delta V(\vec{r})e^{i\omega t} - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 V(\vec{r})e^{i\omega t}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.39)$$

Daraus folgt die sogenannte skalare *Helmholtz-Gleichung*

$$(\Delta + k^2)V(\vec{r}) = 0 \text{ mit } k = \frac{\omega n}{c}. \quad (1.40)$$

Wir betrachten nun zwei skalare Funktionen $U(\vec{r})$ und $V(\vec{r})$. Nach dem Kommutativgesetz gilt

$$\int_V (U(\vec{r})k^2V(\vec{r}) - V(\vec{r})k^2U(\vec{r}))dV = 0. \quad (1.41)$$

Weiter nehmen wir an, dass $U(\vec{r})$ und $V(\vec{r})$ dem räumlichen Anteil von Wellenfunktionen entsprechen und demzufolge die skalare Helmholtz-Gleichung (1.40) erfüllen. Damit folgt

$$\int_V (U(\vec{r})\Delta V(\vec{r}) - V(\vec{r})\Delta U(\vec{r}))dV = 0. \quad (1.42)$$

⁵Allgemein werden elektromagnetische Wellen im dreidimensionalen Raum durch vektorielle Funktionen beschrieben. Diese vektoriellen Funktionen geben den Betrag und die Richtung der Auslenkung der Welle an einem bestimmten Ort zu einer bestimmten Zeit an. Da die mathematische Beschreibung mit vektoriellen Funktionen sehr kompliziert ist, beschränken wir uns hier auf die Beschreibung von elektromagnetischen Wellen durch skalare Funktionen $V(\vec{r}, t)$, welche nur noch den Betrag der Auslenkung der elektromagnetischen Welle an einem bestimmten Ort zu einer bestimmten Zeit angeben. Das Betragsquadrat $|V(\vec{r}, t)|^2$ ist dabei wie bei der Beschreibung von elektromagnetischen Wellen durch vektorielle Funktionen proportional zur Intensität $I(\vec{r}, t)$ der Welle an einem bestimmten Ort zu einer bestimmten Zeit.

Mit dem Greenschen Theorem (1.36) erhalten wir somit das Greensche Theorem für Lösungen der skalaren Helmholtz-Gleichung

$$\oint_S ((U(\vec{r})\vec{\nabla}V(\vec{r})) \cdot \vec{n} - (V(\vec{r})\vec{\nabla}U(\vec{r})) \cdot \vec{n})dS = 0. \quad (1.43)$$

Wir wenden nun dieses Resultat auf kugelsymmetrischen Lösungen der skalaren Wellengleichung, d.h. auf Kugelwellen, an. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die Herleitung der Gleichung (1.43) auf dem Satz von Gauss beruht, welcher für stetige Funktionen ohne Polstellen gültig ist. Das bedeutet, wenn wir hier das Integral über eine geschlossene Fläche bestimmen, wir uns zuvor versichern müssen, dass das von der Fläche eingeschlossene Volumen keine Polstellen der Wellenfunktionen enthält. Im Fall der Kugelwellen heisst das, dass sich die Zentren der Kugelwellen (Polstellen der Wellenfunktionen) nicht innerhalb des Integrationsvolumens befinden dürfen.

Wir betrachten nun eine in einem Punkt $P(x_P, y_P, z_P)$ einlaufenden Kugelwelle

$$V(\vec{r}, t) = V_0 \frac{e^{i(kr + \omega t)}}{r} \text{ mit } r = \sqrt{(x - x_P)^2 + (y - y_P)^2 + (z - z_P)^2}. \quad (1.44)$$

Der räumliche Anteil $V(r)$, welcher die Helmholtz-Gleichung (1.40) erfüllt, lautet daher

$$V(r) = V_0 \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.45)$$

Wie bereits erwähnt, besitzt diese Wellenfunktion einen Pol im Punkt P , bei dem $V(r) \rightarrow \infty$ für $r \rightarrow 0$. Damit wir diese Wellenfunktionen in die Gleichung (1.43) einsetzen können, schliessen wir daher eine kleine kugelförmige Region mit Radius R um den Punkt P aus dem Integrationsvolumen aus (siehe Abb. 1.10). Die gesamte Oberfläche unseres Integrationsvolumens setzt sich demzufolge aus einer äusseren Fläche S mit beliebiger Form und einer inneren kugelförmigen Fläche S' zusammen. D.h. setzen wir nun die Wellenfunktion (1.45) in die Gleichung (1.43) ein, ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_S \left(\left(U(\vec{r})\vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \right) \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS \\ &\quad + \oint_{S'} \left(\left(U(\vec{r})\vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \right) \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Mit

$$\vec{\nabla} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \vec{\nabla} r = \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \quad (1.47)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_S \left(U(\vec{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS \\ &\quad + \oint_{S'} \left(U(\vec{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS. \end{aligned} \quad (1.48)$$

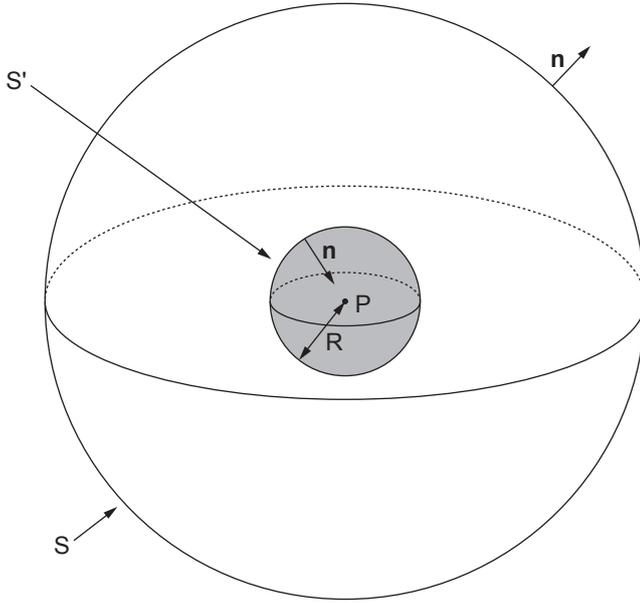


Abb. 1.10: Integrationsvolumen: Aufgrund der Polstelle der Wellenfunktion $V(r)$ im Punkt P schließen wir eine kleine Kugel mit Radius R um den Punkt P aus dem Integrationsvolumen aus. Die äussere Fläche hat im Allgemeinen eine beliebige Form.

Für die Fläche S' ist $r = R$, $dS = R^2 d\Omega$ und der Vektor \vec{r} jeweils entgegengesetzt zum Normalenvektor \vec{n} gerichtet. Daher ergibt sich für das Integral über S' der Ausdruck

$$\begin{aligned} \oint_{S'} & - \left(U(\vec{r}) \left(ik - \frac{1}{R} \right) \frac{e^{ikR}}{R} - \left(\frac{e^{ikR}}{R} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) R^2 d\Omega \\ & = \oint_{S'} \left(U(\vec{r}) - ikU(\vec{r})R - R \vec{\nabla} U(\vec{r}) \cdot \vec{n} \right) e^{ikR} d\Omega. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Uns interessiert jetzt die Situation, bei der die Kugel mit Radius R nur den einzelnen Punkt P umschließt. D.h. wir betrachten den Grenzwert $R \rightarrow 0$. In diesem Fall vereinfacht sich die Integration über S' zu

$$\oint_{S'} U_P d\Omega = 4\pi U_P. \quad (1.50)$$

Einsetzen in (1.48) ergibt

$$0 = \oint_S \left(U(\vec{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS + 4\pi U_P. \quad (1.51)$$

Auflösen nach U_P liefert schlussendlich das sogenannte *Kirchhoffsche Integraltheorem*

$$U_P = -\frac{1}{4\pi} \oint_S \left(U(\vec{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS. \quad (1.52)$$

Es liefert einen Zusammenhang zwischen der Auslenkung der Welle im Punkt P und der Auslenkung der Welle auf einer beliebigen geschlossenen Fläche S um P .

Wir wenden nun das Kirchhoffsche Integraltheorem auf die Beugung an. D.h. wir betrachten das zu Beginn erwähnte Experiment, bei dem elektromagnetische Strahlung (z.B. sichtbares Licht) ausgehend von einer Quelle Q auf ein Beugungsobjekt trifft und fragen uns welche Auslenkung und Intensität wir in einem Beobachtungspunkt P hinter dem Beugungsobjekt feststellen werden (siehe Abb. 1.9). Als Beugungsobjekt betrachten wir im Folgenden einen ebenen lichtundurchlässiger Absorber mit einer kleinen lichtdurchlässigen Öffnung (*Blende*). Um das Kirchhoffsche Integraltheorem anwenden zu können, müssen wir zuerst eine Fläche S wählen, über die wir integrieren. Bei der Wahl der Fläche sind wir frei und können diejenige wählen, die am besten zu unserem Problem passt. Daher betrachten wir die in Abb. 1.11 im Schnitt dargestellte Fläche, welche sich aus drei unterschiedlichen Teilen zusammensetzt. Die Flächen S_A und S_B liegen in der Ebene $z = 0$, wobei die Fläche S_A die Öffnung der Blende darstellt und daher lichtdurchlässig ist und die Fläche S_B dem lichtundurchlässigen Teil der Blende entspricht. Das bedeutet, dass wir keinen Beitrag erhalten durch die Integration über die Fläche S_B . Die Fläche S_C , die unendlich weit entfernt vom Punkt P angenommen ist, schliesst die Integrationsfläche. Den Anteil der sich durch die Integration über die Fläche S_C ergibt, können wir vernachlässigen, da die Fläche S_C sehr weit vom Punkt P entfernt ist und daher das von links eintreffende Licht die Fläche S_C nicht vor dem Punkt P erreicht. Mit dieser Festlegung der Fläche S können wir uns auf die Integration über die Fläche S_A beschränken, d.h. für die Auslenkung U_P im Beobachtungspunkt P gilt nach dem Kirchhoffschen Integraltheorem (1.52)

$$U_P = -\frac{1}{4\pi} \oint_{S_A} \left(U(\vec{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \left(\frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) \right) \cdot \vec{n} \right) dS. \quad (1.53)$$

Wir nehmen nun an, dass die Quelle Q punktförmig ist und daher Kugelwellen

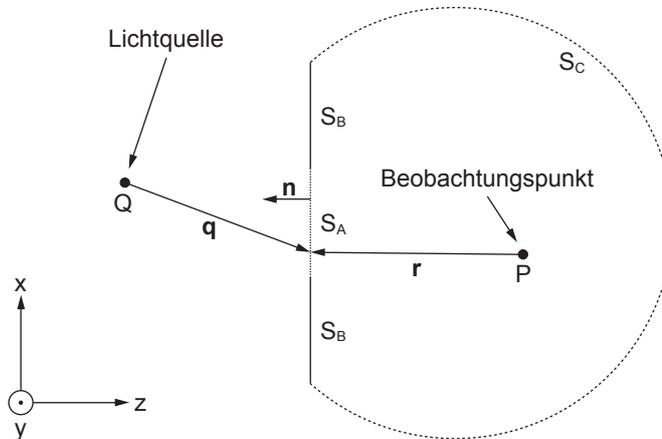


Abb. 1.11: Aufteilung der Integrationsfläche S für die Beugung an einer Blende. Die Flächen S_A und S_B liegen in der Ebene $z = 0$, wobei die Fläche S_A die Blende darstellt und daher lichtdurchlässig ist und die Fläche S_B dem lichtundurchlässigen Teil des Beugungsobjekts entspricht. Die Fläche S_C , die unendlich weit entfernt vom Punkt P angenommen ist, schliesst die Integrationsfläche.

aussendet, d.h. es gilt

$$U(q)e^{-i\omega t} = U_0 \frac{e^{i(kq-\omega t)}}{q} \quad \text{mit } q = \sqrt{(x-x_Q)^2 + (y-y_Q)^2 + (z-z_Q)^2}. \quad (1.54)$$

Setzen wir den entsprechenden Ausdruck für $U(q)$ in (1.53) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} U_P &= -\frac{1}{4\pi} \oint_{S_A} \left(U_0 \frac{e^{ikq}}{q} \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \frac{e^{ikr}}{r} \vec{\nabla} \left(U_0 \frac{e^{ikq}}{q} \right) \cdot \vec{n} \right) dS \\ &= -\frac{1}{4\pi} \oint_{S_A} \left(U_0 \frac{e^{ikq}}{q} \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \frac{e^{ikr}}{r} \left(ik - \frac{1}{q} \right) U_0 \frac{e^{ikq}}{q} \frac{\vec{q}}{q} \cdot \vec{n} \right) dS \\ &= -\frac{U_0}{4\pi} \oint_{S_A} \frac{e^{ik(q+r)}}{qr} \left(\left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \left(ik - \frac{1}{q} \right) \frac{\vec{q}}{q} \cdot \vec{n} \right) dS. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Wir führen an dieser Stelle eine erste Näherung ein, indem wir annehmen, dass die Abstände q und r der Punkte Q und P von der Öffnung viel grösser sind als die Wellenlänge λ des Lichts. Man spricht in diesem Fall von der *Fernfeldnäherung*. Damit gilt

$$ik = \frac{2\pi n}{\lambda} \gg \frac{1}{r}, \frac{1}{q} \quad (1.56)$$

und daher

$$\begin{aligned} U_P &\sim -\frac{U_0}{4\pi} \oint_{S_A} \frac{e^{ik(q+r)}}{qr} \left(ik \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - ik \frac{\vec{q}}{q} \cdot \vec{n} \right) dS \\ &= -\frac{ikU_0}{4\pi} \oint_{S_A} \frac{e^{ik(q+r)}}{qr} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{n} - \frac{\vec{q}}{q} \cdot \vec{n} \right) dS \end{aligned} \quad (1.57)$$

Wir führen nun die Winkel ϑ_0 und ϑ_1 ein (siehe Abb. 1.12) und erhalten somit unter der Annahme $q, r \gg \lambda$ für die Auslenkung U_P im Punkt P den Ausdruck

$$U_P = \frac{U_0 k}{4\pi i} \oint_{S_A} \frac{e^{ik(q+r)}}{qr} (\cos \vartheta_1 + \cos \vartheta_0) dS. \quad (1.58)$$

Dies ist die sogenannte *Kirchhoff-Fresnel-Formel für die Beugung*.

Bevor wir zur Fraunhofer-Beugung kommen, führen wir noch eine weitere Näherung ein: Die uns interessierenden Beobachtungspunkte P liegen in mehr oder weniger direkter Verbindung zur Quelle Q (sonst ist P im Schatten und $U_P = 0$) und daher gilt $\cos \vartheta_1 \sim \cos \vartheta_0$. Es handelt sich in diesem Fall um eine Art paraxiale Näherung (siehe Abschnitt 1.1.3). Damit ergibt sich

$$U_P \sim \frac{U_0 k}{2\pi i} \oint_{S_A} \frac{e^{ik(q+r)}}{qr} \cos \vartheta_1 dS. \quad (1.59)$$

Diese Formel entspricht genau dem Prinzip von Huygens: Die auf die Öffnung S_A auftreffende Wellenfront pflanzt sich durch Aussendung von Kugelwellen

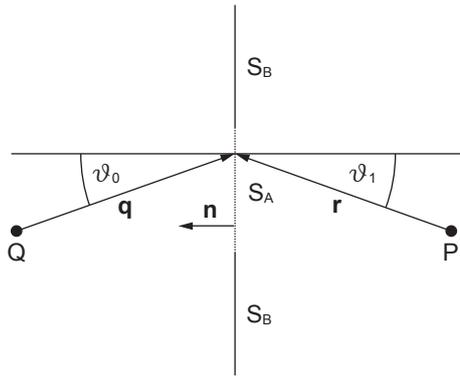


Abb. 1.12: Festlegung der Winkel ϑ_0 und ϑ_1 .

fort, welche im Beobachtungspunkt P interferieren und dort die Auslenkung U_P erzeugen. Damit haben wir, wie zu Beginn formuliert, das Prinzip von Huygens aus fundamentalen Prinzipien hergeleitet, was seine Gültigkeit im Nachhinein rechtfertigt.

Im folgenden Abschnitt gehen wir nun ausgehend von der Gleichung (1.59) etwas genauer auf den Grenzfall der Fraunhofer-Beugung ein.

1.2.2 Fraunhofer-Beugung

Wir wählen zur Besprechung der Fraunhofer-Beugung ein Beugungsobjekt mit rechteckiger Blende mit den Seitenlängen a und b (siehe Abb. 1.13) an dem die elektromagnetische Strahlung gebeugt wird. Zudem legen wir den Ursprung des Koordinatensystems in den Mittelpunkt der Fläche S_A . In der Wellenoptik betrachten wir meist Situationen in denen die Wellenlänge λ des Lichts von ähnlicher Grössenordnung ist wie die Beugungsobjekte mit denen es wechselwirkt, d.h. es gilt $\lambda \sim a, b$. Da wir für die Herleitung der Gleichung (1.59) die Fernfeldnäherung ($q, r \gg \lambda$) angenommen haben, gilt somit auch $q, r \gg a, b$. Daher können wir die Faktoren $1/(qr)$ und $\cos \vartheta_1$ durch $1/(q_0 r_0)$ bzw. $\cos \vartheta$ ersetzen, wobei q_0 und r_0 die Abstände der Punkte Q und P vom Mittelpunkt der Fläche S_A bezeichnen und ϑ den Winkel zwischen der Verbindungslinie von Punkt P zum Mittelpunkt der Fläche S_A und der Flächennormalen \vec{n} . Damit vereinfacht

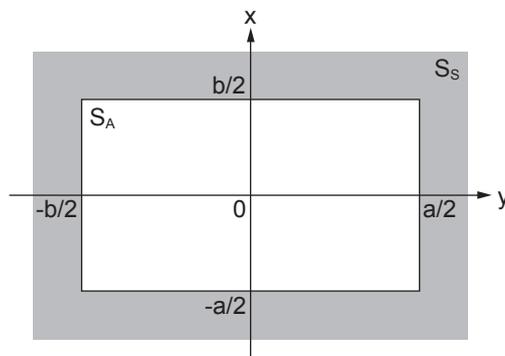


Abb. 1.13: Fraunhofer-Beugung an einer rechteckigen Blende mit den Seitenlängen a und b . Den Ursprung des Koordinatensystems legen wir dabei in den Mittelpunkt der Fläche S_A .

sich Gleichung (1.59) zu

$$U_P \sim \frac{U_0 k \cos \vartheta}{2\pi i q_0 r_0} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} e^{ik(q+r)} dx dy. \quad (1.60)$$

Für die Summe $q+r$ im Exponenten ist dieselbe Näherung jedoch nicht zulässig, da der Faktor $e^{ik(q+r)}$ bereits bei einer Änderung von $q+r$ um eine Wellenlänge λ den Einheitskreis in der komplexen Ebene einmal überstreicht. Wir können aber die beiden Abstände q und r im Exponenten um die Werte q_0 bzw r_0 entwickeln. Aufgrund unserer Wahl des Koordinatensystems ergibt sich⁶

$$\begin{aligned} q &= \sqrt{(x - x_Q)^2 + (y - y_Q)^2 + z_Q^2} \\ &\sim q_0 - \left(\frac{xx_Q}{q_0} + \frac{yy_Q}{q_0} \right) + \frac{1}{2q_0} \left(x^2 + y^2 - \left(\frac{xx_Q + yy_Q}{q_0} \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (1.62)$$

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{(x - x_P)^2 + (y - y_P)^2 + z_P^2} \\ &\sim r_0 - \left(\frac{xx_P}{r_0} + \frac{yy_P}{r_0} \right) + \frac{1}{2r_0} \left(x^2 + y^2 - \left(\frac{xx_P + yy_P}{r_0} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (1.63)$$

Wir gehen nun sogar noch einen Schritt weiter und vernachlässigen auch die quadratischen Terme. Einsetzen in die Gleichung (1.60) ergibt

$$U_P \sim \frac{U_0 k e^{ik(q_0+r_0)}}{2\pi i q_0 r_0} \cos \vartheta \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} e^{-ik(Xx+Yy)} dx dy, \quad (1.64)$$

wobei

$$X = \frac{x_Q}{q_0} + \frac{x_P}{r_0}, \quad (1.65)$$

$$Y = \frac{y_Q}{q_0} + \frac{y_P}{r_0}. \quad (1.66)$$

Diese Näherung, bei der wir nur noch lineare Terme im Exponenten berücksichtigen, entspricht der sogenannten *Fraunhofer-Näherung*. Aber was genau bedeutet nun diese Näherung? Betrachten wir die Gleichung (1.64) so erkennen wir, dass sowohl die von der Quelle Q ausgehenden Kugelwellen als auch die von der Fläche S_A ausgehenden Kugelwellen durch ebene Wellen ersetzt werden. D.h. die Terme, welche aufgrund der Krümmung der Wellenfronten entstehen, werden vernachlässigt. Diese Näherung ist gerechtfertigt, wenn der Abstand zwischen Quelle und Beugungsobjekt, sowie zwischen Beugungsobjekt und Beobachtungspunkt sehr viel grösser ist als die Dimensionen der Blende. Als Alternative kann jedoch auch die Punktquelle im Brennpunkt einer Sammellinse

⁶Für diese Näherung verwenden wir die Taylor-Formel im Zweidimensionalen bis zur zweiten Ordnung

$$f(x, y) \sim f(0, 0) + J(0, 0) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} H(0, 0) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (1.61)$$

wobei $J(0, 0)$ die Jacobi-Matrix und $H(0, 0)$ die Hesse-Matrix bezeichnen.

positioniert werden und der Beobachtungspunkt im Brennpunkt einer zweiten Sammellinse (siehe Abb. 1.14). Dann haben wir sowohl bei der Quelle als auch beim Beobachtungspunkt Kugelwellen und beim Beugungsobjekt ebene Wellen vorliegen und die Fraunhofer-Näherung entspricht der exakten Lösung.

Wir kommen zurück zu unserer Berechnung der Auslenkung U_P im Punkt P hinter einer rechteckigen Blende. Als nächstes führen wir das Integral über y in Gleichung (1.64) separat aus

$$\begin{aligned} \int_{-b/2}^{b/2} e^{-ikYy} dy &= \frac{-e^{-ikYb/2} + e^{ikYb/2}}{ikY} = \frac{2 \sin(kYb/2)}{kY} \\ &= b \frac{\sin \beta_y}{\beta_y} \text{ mit } \beta_y = kYb/2. \end{aligned} \quad (1.67)$$

Analog ergibt sich für das Integral über x in Gleichung (1.64)

$$\int_{-a/2}^{a/2} e^{-ikXx} dx = a \frac{\sin \beta_x}{\beta_x} \text{ mit } \beta_x = kXa/2. \quad (1.68)$$

Damit ergibt sich für die Auslenkung U_P im Punkt P in grossem Abstand hinter einer rechteckigen Blende

$$U_P = \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta ab \frac{\sin \beta_x}{\beta_x} \frac{\sin \beta_y}{\beta_y}. \quad (1.69)$$

Für die Intensität $I_P \propto |U_P|^2$ im Punkt P ergibt sich demzufolge

$$I_P = I_0 \frac{\sin^2 \beta_x}{\beta_x^2} \frac{\sin^2 \beta_y}{\beta_y^2}, \quad (1.70)$$

wobei I_0 die maximale Intensität ist (siehe Abb. 1.15(a)).

Die Intensitätsverteilung I_P/I_0 für die Beugung am Einzelspalt erhalten wir, indem wir $\beta_y = 0$ setzen

$$I_P = I_0 \frac{\sin^2 \beta}{\beta^2} \text{ mit } \beta \equiv \beta_x. \quad (1.71)$$

Wir gehen nun kurz auf einige charakteristische Eigenschaften dieser Intensitätsverteilung für den Einzelspalt ein (siehe Abb. 1.15(b)):

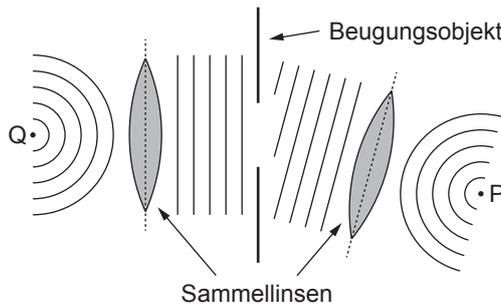


Abb. 1.14: Wird die Punktquelle im Brennpunkt einer Sammellinse positioniert und der Beobachtungspunkt im Brennpunkt einer zweiten Sammellinse, dann entspricht die Fraunhofer-Näherung der exakten Lösung.

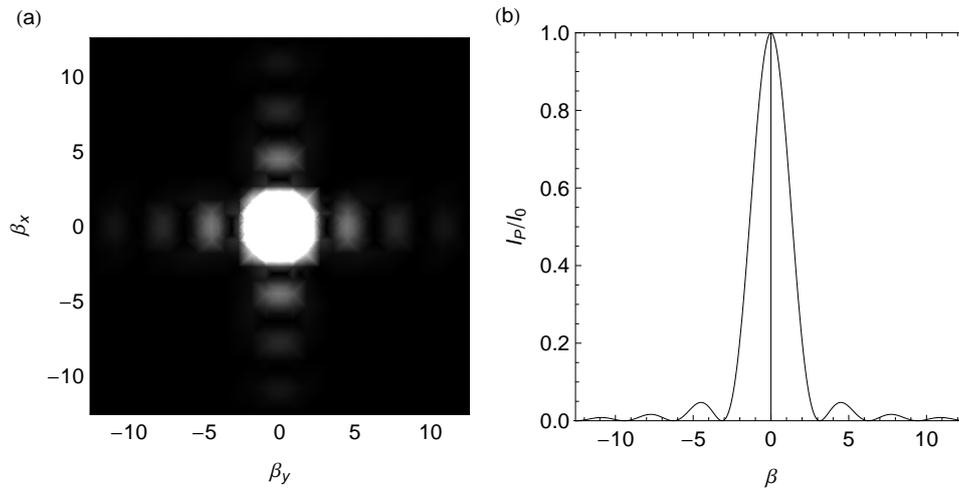


Abb. 1.15: (a) Intensitätsverteilung für die Beugung an einer rechteckigen Blende als Funktion von β_x und β_y . (b) Normierte Intensität I_P/I_0 für die Beugung am Einzelspalt als Funktion von β .

- a) Das **Hauptmaximum** tritt für $\beta = 0$ auf. Die Intensität I_P nimmt dort den Wert I_0 an.
- b) Die **Minima** treten bei den Nullstellen von $\sin \beta$ auf, d.h. wenn β ein ganzzahliges Vielfaches von π ist.
- c) Die **Nebenmaxima** folgen aus der Bedingung

$$\frac{d}{d\beta} \left(\frac{\sin^2 \beta}{\beta^2} \right) = \frac{2 \cos \beta \sin \beta}{\beta^2} - \frac{2 \sin^2 \beta}{\beta^3} = 0. \quad (1.72)$$

Daraus ergibt sich folgende transzendente Gleichung, die z.B. graphisch gelöst werden kann

$$\beta = \tan \beta. \quad (1.73)$$

- d) Für die **relativen Positionen der Minima und Maxima** gilt: Das Hauptmaximum befindet sich genau in der Mitte von zwei Minima gleicher Ordnung. Hingegen beobachtet man, dass die Nebenmaxima nicht genau in der Mitte zwischen den benachbarten Minima zu liegen kommen. Die numerische Lösung der transzendenten Gleichung (1.73) ergibt jedoch, dass mit zunehmendem β die Nebenmaxima immer näher in die Mitte rücken: Für das erste Nebenmaximum erhält man $\beta = 1.43\pi$ statt 1.5π für die Mitte, beim zweiten 2.46π statt 2.5π , beim dritten 3.47π statt 3.5π , usw..

Bisher haben wir von Fraunhofer-Beugung gesprochen, wenn wir im Bereich des Beugungsobjekts von ebenen Wellen ausgehen können oder mathematisch ausgedrückt wenn wir nur lineare Terme im Exponenten berücksichtigen müssen.

Eine allgemeinere Formulierung der Bedingung für Fraunhofer-Beugung ist die folgende:

Fraunhofer-Beugung wird in der Bildebene eines Objekts beobachtet (siehe Abschnitt 1.1.2). In diesem Fall wird die Beugung durch Beugungsobjekte verursacht, die sich zwischen dem Objekt und der Bildebene befinden.

Diese Definition macht klar, dass die Fraunhofer-Beugung vor allem im Zusammenhang mit Abbildungsinstrumenten von Bedeutung ist. Oder anders formuliert, überall wo wir etwas abbilden, sollten wir beachten, dass jedes Beugungsobjekt zwischen Objekt und Bild, das den Weg des Lichts einschränkt, Fraunhofer-Beugung hervorruft. Dies ist eine der Hauptursachen für das begrenzte Auflösungsvermögen von optischen Instrumenten.

Betrachten wir unsere allgemeinere Definition noch ein wenig genauer. Irgendwie scheint sie nicht ganz im Einklang zu stehen mit der bisherigen Beschreibung der Fraunhofer-Beugung. Was ist z.B. wenn sich das Beugungsobjekt zwischen Objekt und Bild an einem Ort befindet, bei dem die Wellenfronten stark gekrümmt sind, würde das nicht unsere Näherungen verletzen? Die Antwort ist nein, wie folgendes Gedankenexperiment zeigt (siehe Abb. 1.16): Eine Punktquelle wird durch eine Sammellinse abgebildet. Dazwischen befindet sich ein Beugungsobjekt. Vor dem Beugungsobjekt ist eine Streulinse mit Brennweite $-f$ platziert und nach dem Beugungsobjekt eine Sammellinse mit Brennweite $+f$. Die erste Linse macht die einfallenden Wellenfronten eben und die zweite Linse bringt sie zurück in die ursprüngliche Form. Nähern sich nun diese Linsen, dann bewirken diese in der paraxialen Näherung (siehe Abschnitt 1.1.3) ausschliesslich, dass beim Beugungsobjekt ebene Wellen vorliegen, ansonsten haben sie keinen Effekt. Somit wird insbesondere klar, dass die Voraussetzung, dass ebene Wellen beim Beugungsobjekt vorliegen, nicht zwingend ist für die Fraunhofer-Beugung.

Bisher haben wir die Beugung an einer rechteckigen Blende betrachtet und dabei für die Auslenkung U_P im Beobachtungspunkt P die Gleichung (1.64) erhalten

$$U_P = \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} e^{-ik(Xx+Yy)} dx dy. \quad (1.74)$$

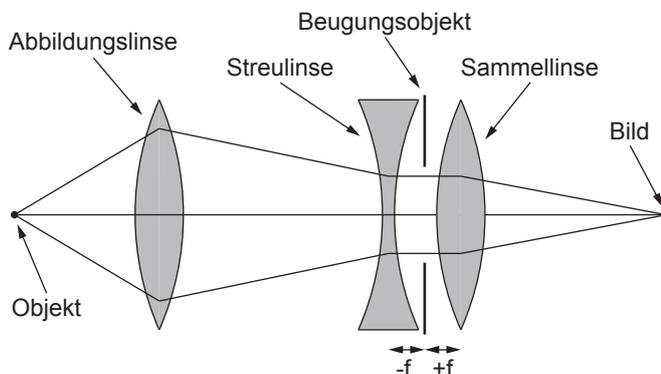


Abb. 1.16: Illustration des Gedankenexperiments zur allgemeinen Definition der Fraunhofer-Beugung.

Wir verallgemeinern nun zum Abschluss der Fraunhofer-Beugung diese Gleichung auf beliebig geformte Blenden. Dies kann durch das Hinzufügen der sogenannten *Transmissionsfunktion* $f(x, y)$ erreicht werden

$$U_P = \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-ik(Xx+Yy)} dx dy. \quad (1.75)$$

$f(x, y)$ nimmt den Wert 1 an, wenn der Punkt (x/y) transparent ist und 0 wenn der Punkt (x/y) lichtundurchlässig ist. Im Fall unserer rechteckigen Blende gilt z.B.

$$f(x, y) = \begin{cases} 1, & |x| \leq a/2 \text{ und } |y| \leq b/2, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1.76)$$

Durch hinzufügen dieser Funktion $f(x, y)$ ist es sogar möglich Blenden zu berücksichtigen, die nur einen Teil des Lichts durchlassen, indem $f(x, y) = p$ mit $0 < p < 1$ gesetzt wird. Zudem können auch Blenden erfasst werden, die eine Phasenverschiebung bewirken. In diesem Fall ist $f(x, y)$ eine komplexe Zahl. Die Gleichung (1.75) ist die Fourier-Transformierte der Transmissionsfunktion $f(x, y)$, d.h. die Intensitätsverteilung bei der Fraunhofer-Beugung ergibt sich aus der Fourier-Transformierten der Transmissionsfunktion $f(x, y)$. Als weiteres Beispiel dazu sei der Doppelspalt erwähnt (siehe Abb. 1.17). Dabei haben zwei Einzelspalte der Breite b einen Abstand a und es gilt für die Transmissionsfunktion

$$f(y) = s(y - a/2) + s(y + a/2), \quad (1.77)$$

wobei

$$s(x) = \begin{cases} 1, & |x| \leq b/2, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1.78)$$

Einsetzen in die Gleichung (1.75) ergibt für die Auslenkung U_P der elektroma-

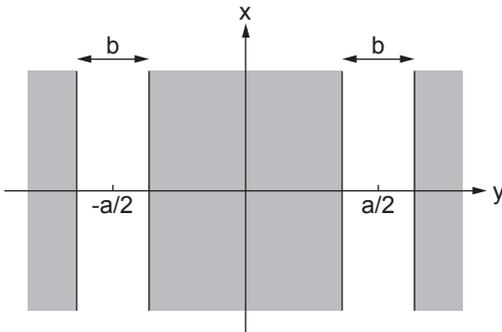


Abb. 1.17: Fraunhofer-Beugung am Doppelspalt: Die Breite eines Einzelspalts wird mit b und der Abstand zwischen den Einzelspalten mit a bezeichnet.

gnetischen Welle im Beobachtungspunkt P

$$\begin{aligned}
U_P &= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_{-\infty}^{\infty} (s(y-a/2) + s(y+a/2)) e^{-ikYy} dy \\
&= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \left(\int_{-\frac{a}{2}-\frac{b}{2}}^{-\frac{a}{2}+\frac{b}{2}} e^{-ikYy} dy + \int_{\frac{a}{2}-\frac{b}{2}}^{\frac{a}{2}+\frac{b}{2}} e^{-ikYy} dy \right) \\
&= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \left(e^{ikYa/2} + e^{-ikYa/2} \right) \frac{e^{ikYb/2} - e^{-ikYb/2}}{ikY} \\
&= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta 2 \cos(kYa/2) \frac{2 \sin(kYb/2)}{kY} \\
&= \frac{U_0 k}{\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta b \cos \varphi \frac{\sin \beta}{\beta}, \tag{1.79}
\end{aligned}$$

wobei

$$\varphi = kYa/2, \tag{1.80}$$

$$\beta = kYb/2. \tag{1.81}$$

Für die Intensität $I_P \propto |U_P|^2$ im Punkt P ergibt sich demzufolge

$$I_P = I_0 \cos^2 \varphi \frac{\sin^2 \beta}{\beta^2}. \tag{1.82}$$

wobei I_0 die maximale Intensität ist. Wir gehen nun kurz auf einige charakteristische Eigenschaften dieser Intensitätsverteilung für den Doppelspalt ein (siehe Abb. 1.18):

- a) Wir führen als erstes die beiden Begriffe **Spalt- und Strukturfaktor** ein. Dazu schreiben wir die Intensität I_P in der Form

$$I_P = I_0 \cdot F^2 \cdot G^2, \tag{1.83}$$

wobei $F = \sin \beta / \beta$ als *Spaltfaktor* und $G = \cos \varphi$ als *Strukturfaktor* bezeichnet werden. Die Quadrate der beiden Größen heissen *Spaltfunktion* bzw. *Strukturfunktion*. Die Strukturfunktion G^2 hängt nur vom Abstand a der Einzelspalte und nicht von ihrer Breite b ab. Betrachtet man nur die Grösse $I_0 \cdot G^2$ ohne die Spaltfunktion F^2 dann entspricht dieser Ausdruck der Intensitätsverteilung, falls von den beiden Einzelspalten nur jeweils eine Elementarwelle ausgehen würde. Dies ist der Fall beim sogenannten *Youngschen Doppelspaltversuch*. Bei einem Doppelspalt mit endlichen Breiten b treten auch Interferenzen zwischen den Elementarwellen eines Einzelspalts auf. Diese werden durch die Spaltfunktion F^2 berücksichtigt.

- b) **Doppelspaltmaxima** treten unter der Bedingung $\varphi = m\pi$ ($m \in \mathbb{Z}$) auf. Fallen jedoch ein Doppelspaltmaxima und ein Einzelspaltminima zusammen, dann wird das entsprechende Maximum unterdrückt. Für die Einzelspaltminima gilt nach den Ausführungen zum Einzelspalt $\beta = n\pi$ ($n \in \mathbb{Z}$).

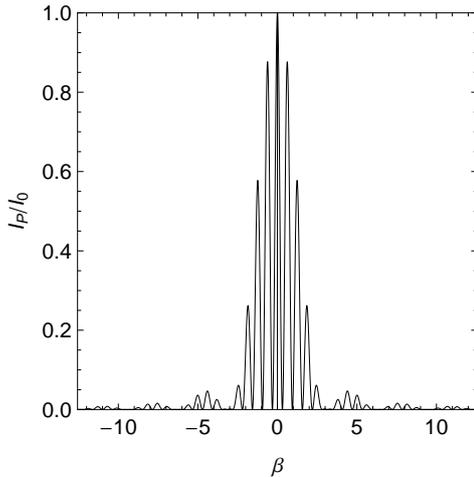


Abb. 1.18: Fraunhofer-Beugung am Doppelspalt: Die normierte Intensität I_P/I_0 als Funktion von β gezeichnet für $a = 5b$, d.h. $\varphi = 5\beta$.

Mit (1.80) und (1.81) ergibt sich daher als Bedingung für fehlende Beugungsmaxima

$$\frac{m}{n} = \frac{a}{b}. \quad (1.84)$$

Da m und n ganzzahlig sind, kommt es somit zur Auslöschung von Doppelspaltmaxima für rationale Verhältnisse von Einzelspaltbreite b und Einzelspaltabstand a . In unserem Beispiel in Abb. 1.18 ($a = 5b$) werden somit die Ordnungen $m = \pm 5, \pm 10, \pm 15, \dots$ unterdrückt.

Falls nun $b = a$ ist gilt nach (1.84) $m = n$ und es werden somit bis auf $m = 0$ alle Doppelspaltmaxima unterdrückt. Dies ist so zu verstehen, dass für $b = a$ die beiden Einzelspalte der Breite b zu einem Einzelspalt der Breite $2b$ vereinigt werden und nur das Beugungsbild eines Einzelspalts beobachtbar ist.

- c) **Doppelspaltminima** treten unter der Bedingung $\varphi = \frac{(2m+1)\pi}{2}$ ($m \in \mathbb{Z}$) auf.

1.2.3 Prinzip von Huygens

In Abschnitt 1.1.1 haben wir das Brechungsgesetz von Snellius mit Hilfe des Fermatschen Prinzip hergeleitet. Alternativ ist auch eine Herleitung des Brechungsgesetzes mittels dem Prinzip von Huygens möglich (siehe Physik II Vorlesung). Wie wir im Abschnitt 1.2.1 gesehen haben, entspricht die angenäherte Kirchhoff-Fresnel-Formel (1.59) für die Beugung dem Prinzip von Huygens: Der q -Term entspricht den einfallenden Wellen und bestimmt die Phasen der Huygens-Punktquellen. Die r -Terme sind die Beiträge zur Welle im Punkt P von all diesen Quellen und wenn wir über alle diese Quellen integrieren, so führen wir genau das aus, was Huygens in seinem Prinzip formuliert hat.

Um dies noch besser zu illustrieren, leiten wir anhand unserem Integral-Formalismus das Brechungsgesetz von Snellius her. Dazu betrachten wir den

Fall, bei dem die Fläche S_A zwei Gebiete trennt, die unterschiedliche Brechungsindizes n_1 und n_2 aufweisen. Die entsprechenden Wellenzahlen lauten dann $k_1 = \omega n_1/c$ und $k_2 = \omega n_2/c$. Wir verwenden nun die Fraunhofer-Näherung. Damit ergibt sich für die Auslenkung U_P im Punkt P die Gleichung (1.64) mit dem einzigen Unterschied, dass wir anstelle der Wellenzahl k die Wellenzahlen k_1 bzw. k_2 einzusetzen haben

$$U_P = \frac{U_0(k_1 + k_2)}{4\pi i} \frac{e^{i(k_1 q_0 + k_2 r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} e^{-i(X'x + Y'y)} dx dy, \quad (1.85)$$

wobei

$$X' = k_1 \frac{x_Q}{q_0} + k_2 \frac{x_P}{r_0}, \quad (1.86)$$

$$Y' = k_1 \frac{y_Q}{q_0} + k_2 \frac{y_P}{r_0}. \quad (1.87)$$

Analog zu den Ausführungen im Abschnitt 1.2.2 erhalten wir

$$U_P = \frac{U_0(k_1 + k_2)}{4\pi i} \frac{e^{i(k_0 q_0 + k_1 r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta ab \frac{\sin \beta_x}{\beta_x} \frac{\sin \beta_y}{\beta_y}, \quad (1.88)$$

wobei

$$\beta_x = X' a/2, \quad (1.89)$$

$$\beta_y = Y' b/2. \quad (1.90)$$

Das Brechungsgesetz von Snellius ist ein Gesetz der geometrischen Optik. Wir gehen daher zum Grenzfall $a, b \gg \lambda$ über. Der Wellencharakter des Lichts tritt dann in den Hintergrund und es interessiert uns in diesem Fall die Bedingung für die Position des Hauptmaximums. Diese lautet $\beta_x = \beta_y = 0$ und daher $X' = Y' = 0$. Daraus folgt

$$k_0 \frac{x_Q}{q_0} = -k_1 \frac{x_P}{r_0}, \quad (1.91)$$

$$k_0 \frac{y_Q}{q_0} = -k_1 \frac{y_P}{r_0}. \quad (1.92)$$

Führen wir den Einfallswinkel ϑ_i und den Ausfallswinkel ϑ_t ein (siehe Abb. 1.19), so ergibt sich mit $k_1 = \omega n_1/c$ und $k_2 = \omega n_2/c$ in Übereinstimmung mit (1.6) das Brechungsgesetz von Snellius

$$n_1 \sin \vartheta_i = n_2 \sin \vartheta_t. \quad (1.93)$$

1.3 Auflösungsvermögen von optischen Instrumenten

Unter dem Auflösungsvermögen eines optischen Instruments versteht man den kleinsten Abstand zweier Objekte, so dass diese noch als zwei Objekte wahrgenommen werden können. Die Hauptursache für das begrenzte Auflösungsvermögen von optischen Instrumenten sind Beugungseffekte (siehe Abschnitt 1.2.2).

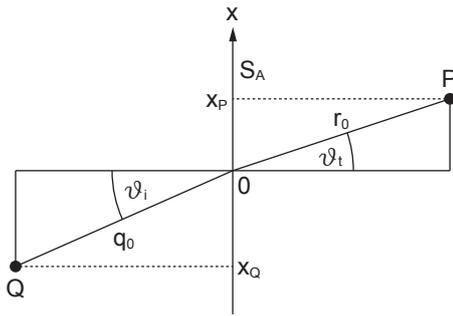


Abb. 1.19: Definition des Einfallswinkels ϑ_i und des Ausfallswinkels ϑ_t für das Brechungsgesetz von Snellius.

In einem ersten Teil dieses Abschnitts befassen wir uns nun mit der Frage, wie Beugungseffekte das Auflösungsvermögen eines Teleskops begrenzen.

Wir betrachten zwei Lichtquellen, z.B. zwei Sterne, deren Licht auf eine Öffnung trifft, z.B. auf diejenige eines Teleskops. Das Licht beider Quellen wird dann gebeugt und verursacht je eine Intensitätsverteilung ähnlich zu derjenigen beschrieben durch die Gleichung (1.70). Diese Intensitätsverteilung wird durch eine CCD-Kamera oder direkt durch unser Auge aufgenommen. Sind diese beiden Lichtquellen sehr nahe beieinander, dann werden sich die beiden Intensitätsverteilungen überschneiden und wir können die beiden Objekte nicht mehr als getrennt wahrnehmen. Bis zu welchem Abstand wir die Objekte einzeln auflösen können hängt davon ab, wie empfindlich unsere Kamera oder unser Auge auf Änderungen in der Intensität reagiert. Das bekannte Kriterium für das Auflösungsvermögen eines optischen Instruments stammt von Rayleigh und lautet:

Zwei Objekte können gerade noch als getrennt wahrgenommen werden, wenn das Hauptmaximum der Intensitätsverteilung, die vom ersten Objekt stammt, mit dem ersten Minimum der Intensitätsverteilung, die vom zweiten Objekt stammt, zusammenfällt.

Um dieses Kriterium in Form einer Gleichung anzugeben, gehen wir genauer auf das Beispiel der Beobachtung von zwei Sternen mit einem Teleskop ein. Wir nehmen dabei an, dass das Auflösungsvermögen alleine durch die Beugung am Rand der ersten Linse (Frontlinse) des Teleskops begrenzt ist. Den Radius dieser kreisförmigen Blende bezeichnen wir mit R . Bevor wir auf das Auflösungsvermögen eingehen, betrachten wir daher zunächst die Beugung an einer kreisförmigen Blende (siehe Abb. 1.20). Die entsprechende Transmissionfunktion $f(r, \varphi)$ lautet

$$f(r, \varphi) = \begin{cases} 1, & r \leq R, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1.94)$$

Einsetzen in die Gleichung (1.75) ergibt für die Auslenkung U_P der elektromagnetischen Welle im Beobachtungspunkt P

$$U_P = \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_0^R \int_0^{2\pi} e^{-ik(X\rho \cos \varphi + Y\rho \sin \varphi)} \rho d\rho d\varphi, \quad (1.95)$$

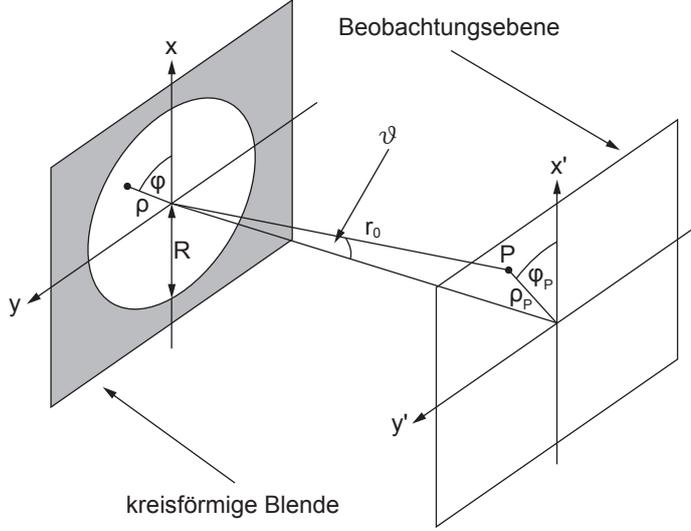


Abb. 1.20: Beugung an einer kreisförmigen Blende. Zur Berechnung der Intensität I_P im Beobachtungspunkt P wird von den kartesischen Koordinaten x (x') und y (y') zu den Polarkoordinaten ρ (ρ_P) und φ (φ_P) gewechselt. Die Einführung des Winkels ϑ dient zur Angabe des Rayleigh-Kriteriums in Form einer Gleichung.

wobei wir von den kartesischen Koordinaten x und y zu Polarkoordinaten ρ und φ gewechselt haben. Da die im Beispiel betrachteten Lichtquellen (Sterne) sehr weit von der kreisförmigen Blende (Teleskop) entfernt sind, gilt $q_0 \gg r_0$ und damit

$$X = \frac{x_Q}{q_0} + \frac{x_P}{r_0} \sim \frac{x_P}{r_0} = \frac{\rho_P \cos \varphi_P}{r_0}, \quad (1.96)$$

$$Y = \frac{y_Q}{q_0} + \frac{y_P}{r_0} \sim \frac{y_P}{r_0} = \frac{\rho_P \sin \varphi_P}{r_0}, \quad (1.97)$$

wobei wir wiederum von kartesischen Koordinaten x_P und y_P zu Polarkoordinaten ρ_P und φ_P gewechselt haben. Somit ergibt sich

$$\begin{aligned} U_P &= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_0^R \int_0^{2\pi} e^{-ik\rho\rho_P(\cos\varphi\cos\varphi_P+\sin\varphi\sin\varphi_P)/r_0} \rho d\rho d\varphi \\ &= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_0^R \int_0^{2\pi} e^{-ik\rho\rho_P \cos(\varphi-\varphi_P)/r_0} \rho d\rho d\varphi. \end{aligned} \quad (1.98)$$

Da unsere Anordnung achsensymmetrisch ist, muss die Lösung schlussendlich unabhängig von φ_P sein. Wir dürfen daher $\varphi_P \equiv -\pi$ setzen und erhalten⁷

$$U_P = \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta \int_0^R \int_0^{2\pi} e^{ik\rho\rho_P \cos\varphi/r_0} \rho d\rho d\varphi. \quad (1.99)$$

Um dieses Integral zu lösen, führen wir die sogenannten *Besselfunktionen erster Art* $J_n(x)$ ein

$$J_n(x) = \frac{i^{-n}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(nt+x\cos t)} dt. \quad (1.100)$$

⁷Grundsätzlich könnten wir jeden beliebigen Wert für φ_P einsetzen. Wir wählen $\varphi_P = -\pi$, da in diesem Fall das Minus im Exponenten verschwindet.

Insbesondere gilt

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix \cos t} dt \quad (1.101)$$

und damit

$$U_P = \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta 2\pi \int_0^R J_0(k\rho\rho_P/r_0) \rho d\rho. \quad (1.102)$$

Für Besselfunktionen gilt zudem die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} (x^n J_n(x)) = x^n J_{n-1}(x). \quad (1.103)$$

Daraus ergibt sich für $n = 1$

$$\int_0^x y J_0(y) dy = x J_1(x). \quad (1.104)$$

Mit Hilfe der Substitution $w = k\rho\rho_P/r_0$ und Gleichung (1.104) ergibt sich für die Auslenkung U_P im Beobachtungspunkt P

$$\begin{aligned} U_P &= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta 2\pi \left(\frac{r_0}{k\rho_P} \right)^2 \int_0^{kR\rho_P/r_0} J_0(w) w dw \\ &= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta 2\pi \frac{r_0 R}{k\rho_P} J_1(kR\rho_P/r_0) \\ &= \frac{U_0 k}{2\pi i} \frac{e^{ik(q_0+r_0)}}{q_0 r_0} \cos \vartheta 2\pi R^2 \frac{J_1(kR\rho_P/r_0)}{kR\rho_P/r_0}. \end{aligned} \quad (1.105)$$

Für die Intensität $I_P \propto |U_P|^2$ im Punkt P erhalten wir demzufolge

$$I_P = I_0 \left(\frac{2J_1(\beta)}{\beta} \right)^2 \quad \text{mit } \beta = kR\rho_P/r_0, \quad (1.106)$$

wobei I_0 die maximale Intensität ist und der Faktor 2 daher kommt, dass $J_1(x)/x = 1/2$ für $x = 0$. Betrachten wir diese Intensitätsverteilung etwas genauer so erkennen wir, dass das zentrale Hauptmaximum als heller Fleck erscheint (siehe Abb. 1.21). Diesen Fleck nennt man die *Airy-Scheibe*. Dieser mittlere helle Fleck ist umgeben von einem dunklen Ring, der zur ersten Nullstelle der Besselfunktion $J_1(\beta)$ gehört. Diese befindet sich bei $\beta = kR\rho_P/r_0 = 3.83$. Wir können den Radius ρ_P dieses dunklen Rings als Radius ρ_A der Airy-Scheibe interpretieren. Er beträgt demzufolge

$$\rho_A = 3.83 \frac{r_0}{kR}. \quad (1.107)$$

Wir können die Grösse der Airy-Scheibe auch durch Angabe des entsprechenden Winkel ϑ_A ausdrücken (siehe Abb. 1.20). Da $\rho_P/r_0 = \sin \vartheta \sim \vartheta$ gilt

$$\vartheta_A = 3.83 \frac{1}{kR} = 1.22 \frac{\lambda}{D}, \quad (1.108)$$

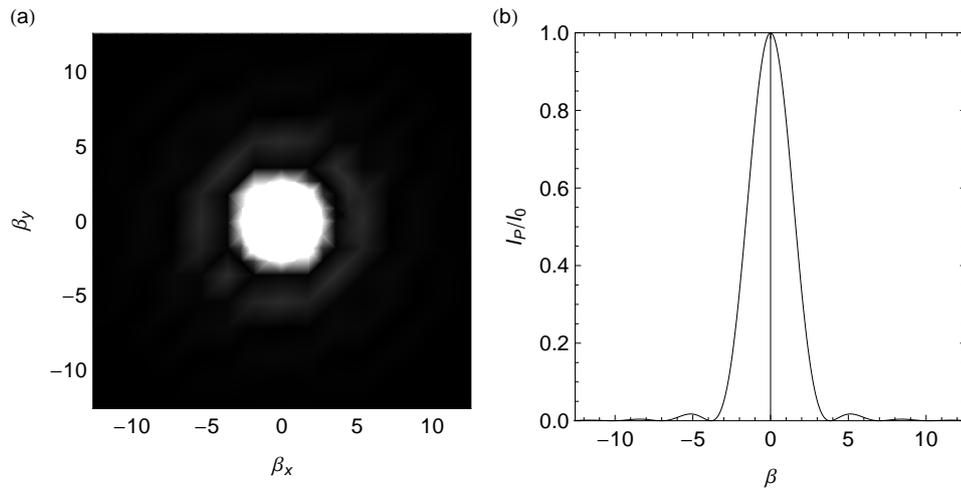


Abb. 1.21: (a) Intensitätsverteilung für die Beugung an einer kreisförmigen Blende als Funktion von $\beta_x = \beta \cos \varphi_P$ und $\beta_y = \beta \sin \varphi_P$. (b) Normierte Intensität I_P/I_0 für die Beugung an einer kreisförmigen Öffnung als Funktion von β .

wobei wir verwendet haben, dass $k = 2\pi/\lambda$ und wir den Durchmesser $D = 2R$, der kreisförmigen Blende eingeführt haben⁸.

Nachdem wir die Beugung an einer kreisförmigen Öffnung verstanden haben, sind wir in der Lage das Auflösungsvermögen eines Teleskops anzugeben. Betrachten wir mit dem Teleskop zwei Sterne, so nehmen wir aufgrund der Beugung an der Frontlinse für jeden Stern eine Intensitätsverteilung wahr, die derjenigen in Abb. 1.21 entspricht. Sei nun der Winkelabstand $\Delta\varphi$ den beiden Sternen ausreichend gross, erscheinen die beiden Beugungsbilder vollständig voneinander getrennt, d.h. wir nehmen die beiden Sterne einzeln wahr. Wird $\Delta\varphi$ jedoch kleiner, so kommen auch die beiden Beugungsbilder näher zusammen, überlagern sich und werden schlussendlich zu einem einzigen Bild. Nach dem Rayleigh-Kriterium können nun die beiden Sterne gerade noch als getrennt wahrgenommen werden, wenn der Mittelpunkt der Airy-Scheibe des Beugungsbilds des ersten Sterns mit dem ersten dunklen Ring des Beugungsbilds des zweiten Sterns übereinander liegen. D.h. der minimale noch auflösbare Winkelabstand $\Delta\varphi_{\min}$ entspricht ϑ_A und somit gilt nach (1.108)

$$\Delta\varphi_{\min} = 1.22 \frac{\lambda}{D}. \quad (1.109)$$

Betrachten wir diese Formel für das Auflösungsvermögen eines Teleskops, so wird klar, dass ein grosser Durchmesser D der Frontlinse von grossem Vorteil ist. Dies ist auch der Grund, wieso in der Astronomie verwendete Teleskope sehr

⁸Wir sind dabei davon ausgegangen, dass unsere Untersuchungen in Luft stattfinden und daher der Brechungsindex $n = 1$ ist.

gross sind. Andererseits ist es schwierig die Position von Niederfrequenzquellen aufzulösen, da tiefere Frequenzen eine höhere Wellenlänge λ bedeuten.

An dieser Stelle sei bemerkt, dass wir bei der Betrachtung des Auflösungsvermögens angenommen haben, dass das Licht der beiden Sterne nicht interferiert. Das hat uns erlaubt die Überlagerung der beiden Intensitätsverteilungen zu betrachten, ohne dabei Phasenunterschiede, zwischen den eintreffenden Wellen zu berücksichtigen. In dem betrachteten Fall ist dies eine gute Näherung, da es sehr unwahrscheinlich ist, dass das Licht der beiden Sterne gleiche Polarisation und stabile Phasen zueinander hat. Beleuchten wir jedoch zur Untersuchung von Objekten diese mit einer einzigen Lichtquelle, so müssten wir die Interferenz des Lichts der verschiedenen Objekte berücksichtigen.

Das nächste Ziel ist nun ausgehend von diesen Betrachtungen beim Teleskop das Auflösungsvermögen eines Mikroskops zu bestimmen. Wir nehmen dabei analog zum Teleskop an, dass das Auflösungsvermögens alleine durch die Beugung am Objektiv begrenzt ist (siehe Abb. 1.8). Die Öffnung sei wiederum kreisförmig mit Durchmesser D und wir können von Gleichung (1.109) ausgehen. Mit der Annahme, dass der Abstand des Gegenstands zum Objektiv etwa der Brennweite f entspricht und der kleinste noch auflösbare Winkel $\Delta\varphi_{\min}$ sehr klein ist, ergibt sich daher für den kleinsten noch auflösbaren Abstand Δx_{\min} zweier Punkte eines Objekts

$$\Delta x_{\min} \sim \Delta\varphi_{\min} f = 1.22 \frac{\lambda f}{D}. \quad (1.110)$$

Bezeichnen wir den halben Öffnungswinkel des Objektivs mit α , dann gilt näherungsweise

$$\sin \alpha \sim \frac{D/2}{f} \quad (1.111)$$

und somit

$$\Delta x_{\min} = 0.61 \frac{\lambda}{\sin \alpha}. \quad (1.112)$$

Um das Auflösungsvermögen zu vergrössern, wird bei Mikroskopen oft eine Immersionsflüssigkeit wie Wasser oder Öl zwischen das Objektiv und den Gegenstand gegeben, d.h. anstelle von Luft mit Brechungsindex $n = 1$ führen wir unsere Untersuchungen in einer Flüssigkeit mit Brechungsindex $n > 1$ durch. Daher müssen wir in unserer Formel für den kleinsten noch auflösbaren Abstand Δx_{\min} den Brechungsindex n dieser Immersionsflüssigkeit hinzufügen

$$\Delta x_{\min} = 0.61 \frac{\lambda}{n \sin \alpha}. \quad (1.113)$$

Führen wir noch die *numerische Apertur* $NA = n \sin \alpha$ ein, so erhalten wir schlussendlich für den kleinsten mit einem Mikroskop noch auflösbaren Abstand Δx_{\min} den Ausdruck

$$\Delta x_{\min} = 0.61 \frac{\lambda}{NA}. \quad (1.114)$$

Dieses Auflösungsvermögen wird nach Ernst Abbe, der diese Beziehung im 19. Jahrhundert aufstellte, auch *Abbe-Auflösungsvermögen* genannt.

Wird z.B. bei einem Mikroskop mit Öffnungswinkel $\alpha = 53^\circ$ als Immersionsflüssigkeit Öl mit Brechungsindex $n = 1.5$ verwendet, so ergibt sich für den kleinsten noch auflösbaren Abstand

$$\Delta x_{\min} \sim 0.5\lambda. \quad (1.115)$$

D.h. in diesem Fall können Details, die kleiner sind als eine halbe Wellenlänge nicht mehr erkannt werden.

1.4 Polarisation

Bisher haben wir Licht einfachheitshalber durch eine skalare Wellenfunktion beschrieben. Dabei haben wir ausser Acht gelassen, dass Licht eigentlich einer elektromagnetischen Welle entspricht und somit durch elektrische und magnetische Feldstärkevektoren, die senkrecht zueinander und zur Ausbreitungsrichtung orientiert sind, zu beschreiben ist. Solange sich Licht im freien Raum ausbreitet, gibt es keine ausgezeichnete Richtung, mit der die Richtungen der elektrischen und magnetischen Feldstärkevektoren verglichen werden könnte und diese Vereinfachung ist gerechtfertigt. Trifft jedoch Licht unter einem bestimmten Winkel auf eine Fläche, dann legt die Fläche eine ausgezeichnete Richtung fest und wir müssen die Richtungen der elektrischen und magnetischen Feldstärkevektoren beachten. Die Schwingungsrichtung des elektrischen Feldstärkevektors bezeichnet man dabei als *Polarisation der elektromagnetischen Welle* bzw. als *Polarisation des Lichts*. Im Folgenden gehen wir auf die verschiedenen Polarisationsarten ein, besprechen doppelbrechende Materialien und betrachten den Übergang von Licht zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes, welcher durch die sogenannten *Fresnel-Gleichungen* beschrieben werden kann.

1.4.1 Polarisationsarten

Zur Besprechung der verschiedenen Polarisationsarten nehmen wir an, dass sich das Licht entlang der z -Achse ausbreitet. Der elektrische Feldstärkevektor $\vec{E}(\vec{r}, t)$, der senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung steht, befindet sich daher in der xy -Ebene und wir können schreiben

$$\vec{E}(z, t) = (E_x \vec{e}_x + E_y e^{i\alpha} \vec{e}_y) e^{i(kz - \omega t)}, \quad (1.116)$$

wobei \vec{e}_x und \vec{e}_y die Einheitsvektoren und E_x und E_y die Amplituden in x - bzw. y -Richtung bezeichnen und α den Phasenunterschied zwischen den beiden Amplituden.

Der einfachste Fall ergibt sich, wenn der Phasenunterschied $\alpha = 0$ ist. Dann zeigt der elektrische Feldstärkevektor immer entlang derselben Richtung. Man spricht dann von *linearer Polarisation*.

Ein weiterer Spezialfall ergibt sich bei identischen Amplituden $E_x = E_y \equiv E_0$ und einem Phasenunterschied von $\alpha = \pm i\pi/2$. In diesem Fall gilt

$$\vec{E}(z, t) = E_0(\vec{e}_x + e^{\pm i\pi/2}\vec{e}_y)e^{i(kz - \omega t)} \quad (1.117)$$

und der elektrische Feldstärkevektor $\vec{E}(z, t)$ rotiert mit der Frequenz ω im Gegen- bzw. im Uhrzeigersinn um die z -Achse. Der Betrag des Feldstärkevektors bleibt dabei konstant. Man spricht in diesem Fall von links bzw. rechts *zirkularer Polarisation*.

Im allgemeinen Fall, bei dem die Amplituden E_x und E_y unterschiedlichen Betrag und einen beliebigen Phasenunterschied α aufweisen, bewegt sich der elektrische Feldstärkevektor $\vec{E}(z, t)$ während der Ausbreitung der Welle auf einer Ellipse. Man spricht in diesem Fall von *elliptischer Polarisation*. Es sei bemerkt, dass die beiden Hauptachsen der Ellipse dabei aber nicht zwingend entlang der x - und y -Richtung liegen müssen. In Abb. 1.22 sind die verschiedenen Polarisationsarten graphisch dargestellt.

1.4.2 Doppelbrechende Materialien

Es gibt viele Materialien, die nicht isotrop sind im Bezug auf optische Wechselwirkungen. Der Grund dafür ist, dass Atome in einem Material normalerweise nicht isotrop verteilt sind - die Atomschichten haben unterschiedliche Abstände in unterschiedliche Raumrichtungen. Eine Folge davon ist z.B. dass die Lichtgeschwindigkeit in einem Material sich als Funktion der Polarisation des Lichts ändern kann. Eine spezielle Klasse von anisotropen Materialien, sogenannte doppelbrechende Materialien, betrachten wir nun etwas genauer. Diese haben die Eigenschaft, dass sie zwei senkrecht zueinander stehende Achsen mit unterschiedlichem Brechungsindex besitzen. Das bedeutet, dass wenn das Licht

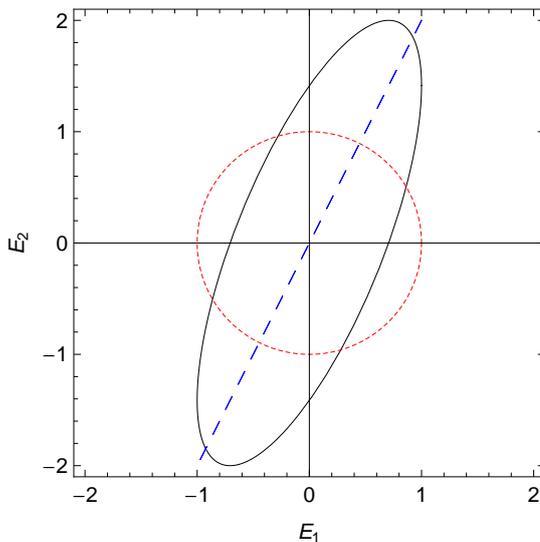


Abb. 1.22: Amplitude und Phase des elektrischen Feldstärkevektors dargestellt in der xy -Ebene für verschiedene Werte von E_x , E_y und α : Für $(E_x, E_y, \alpha) = (1, 2, 0)$ erhalten wir lineare Polarisation (blaue grobgestrichelte Linie), für $(E_x, E_y, \alpha) = (1, 1, \pi/2)$ erhalten wir zirkuläre Polarisation (rote feingestrichelte Linie) und für $(E_x, E_y, \alpha) = (1, 2, \pi/4)$ erhalten wir elliptische Polarisation (schwarze Linie).

entlang der einen dieser beiden Achsen polarisiert ist, es sich mit einer anderen Geschwindigkeit ausbreitet, als wenn es entlang der anderen Achse polarisiert ist. Wir legen nun die x - und y -Achse entlang dieser ausgezeichneten Achsen und bezeichnen die entsprechenden Brechungsindizes mit n_x und n_y (Ausbreitungsrichtung ist weiterhin entlang der z -Achse). Dann ergibt sich im allgemeinen Fall für den elektrischen Feldstärkevektor $\vec{E}(z, t)$ bei einer Eindringtiefe z ins Material zur Zeit t den Ausdruck

$$\vec{E}(z, t) = E_x e^{i(k_x z - \omega t)} \vec{e}_x + E_y e^{i(k_y z - \omega t + \alpha)} \vec{e}_y, \quad (1.118)$$

wobei $k_x = n_x k$, $k_y = n_y k$ und k den Betrag des Wellenvektors im Vakuum bezeichnet. Da sich in diesem Fall der Phasenunterschied zwischen den beiden Komponenten mit der Zeit ändert, kann auch die Polarisation des Lichts mit der Zeit wechseln.

Fertigen wir z.B. eine Platte der Dicke L an, sodass $(n_x - n_y)kL = \pi$, dann hat diese die Eigenschaft, dass sie die Polarisationsrichtung von linear polarisiertem Licht um einen wählbaren Winkel drehen kann. Der Rotationswinkel hängt dabei vom Winkel zwischen den ausgezeichneten Achsen und der ursprünglichen Polarisationsrichtung ab. Ein solches Objekt nennt man $\lambda/2$ -Plättchen.

Eine Platte der Dicke L mit der Eigenschaft $(n_x - n_y)kL = \pi/2$ heisst $\lambda/4$ -Plättchen. Diese kann linear polarisiertes Licht in zirkular oder elliptisch polarisiertes Licht oder zirkular in linear polarisiertes Licht umwandeln. Je nach Zweck, der ein $\lambda/4$ -Plättchen erfüllen soll, muss wiederum der Winkel zwischen den ausgezeichneten Achsen und der ursprünglichen Polarisationsrichtung eingestellt werden. Zum Beispiel ergibt sich für linear entlang der schnellen Achse polarisiertes Licht keine Änderung in der Polarisation. Wenn jedoch der Winkel zwischen der schnellen Achse⁹ und der ursprünglichen Polarisationsrichtung 45° beträgt, dann bewirkt das $\lambda/4$ -Plättchen eine Änderung von linear zu zirkular polarisiertem Licht.

1.4.3 Fresnel-Gleichungen

Wir diskutieren die Frage, wie polarisiertes Licht erzeugt werden kann. Betrachten wir das Licht, das von Atomen ausgesendet wird, so ist dieses meistens polarisiert, aber nur bezüglich der unmittelbaren Umgebung des Atoms. Viele Atome zusammen senden daher oft Licht einer zufälligen Polarisation aus, wie z.B. die Atome einer Gaslampe. In der Natur finden wir typischerweise polarisiertes Licht, wenn dieses an einer Grenzfläche zwischen zwei Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes reflektiert wird. Dies kann z.B. an der Grenzfläche zwischen Luft und Wasser auftreten, da Luft und Wasser sehr unterschiedliche Brechungsindizes aufweisen. Von Vorteil in solchen Umgebungen sind daher sogenannte polarisierte Sonnenbrillen. In diesem Abschnitt werden wir nun ausgehend von den Maxwell-Gleichungen diesen Übergang von polarisiertem Licht zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes genauer untersuchen. Der Einfachheit halber beschränken wir uns dabei auf ebene Wellen.

⁹Die schnelle Achse entspricht derjenigen Achse (x oder y) entlang der sich das Licht schneller ausbreitet.

Die Maxwell-Gleichungen in Materie ohne freie Ladungen und Ströme lauten (siehe Physik II Vorlesung)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0, \quad (1.119)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.120)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.121)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (1.122)$$

wobei für die elektrische Feldstärke \vec{E} , die elektrische Flussdichte \vec{D} , die magnetische Feldstärke \vec{H} und die magnetische Flussdichte \vec{B} die folgenden Zusammenhänge gelten $\vec{D} = \epsilon\epsilon_0\vec{E}$ und $\vec{B} = \mu\mu_0\vec{H}$. Wenden wir die Rotation auf beiden Seiten von Gleichung (1.121) an, so erhalten wir

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla} \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right). \quad (1.123)$$

Mit der mathematischen Identität $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \Delta \vec{E}$ für Vektorfelder und den Maxwell-Gleichungen (1.119) und (1.122) erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}(\underbrace{\vec{\nabla} \cdot \vec{E}}_{=0}) - \Delta \vec{E} &= \vec{\nabla} \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = -\mu\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{H}) \\ &= -\mu\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} = -\mu\mu_0\epsilon\epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \end{aligned} \quad (1.124)$$

Mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ im Vakuum und dem Brechungsindex $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ des Mediums ergibt sich für die elektrische Feldstärke \vec{E} folgende Wellengleichung

$$\Delta \vec{E} = \left(\frac{n}{c} \right)^2 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (1.125)$$

Eine mögliche Lösung dieser Wellengleichung ist

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (1.126)$$

Die entsprechende magnetische Flussdichte $\vec{B}(\vec{r}, t)$ erhalten wir durch Einsetzen in (1.121) und Integration über t . Es ergibt sich

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{k} \times \vec{E}(\vec{r}, t)}{\omega}. \quad (1.127)$$

Zudem gilt nach (1.119) und (1.120) $\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 0$ und $\vec{k} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0$, d.h. die Vektoren $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ und \vec{k} sind wie zu Beginn dieses Abschnitts erwähnt paarweise orthogonal zueinander.

Als nächstes bestimmen wir die Randbedingungen für das elektrische und magnetische Feld und die elektrische und magnetische Flussdichte an der Grenzfläche zweier Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes. Als erstes gehen wir auf das Grenzverhalten der magnetischen Flussdichte \vec{B} ein. Dazu legen wir ein Quader der Fläche A und Höhe h um einen beliebigen Punkt der Grenzfläche G (siehe Abb. 1.23(a)). Der Satz von Gauss liefert dann zusammen mit der Maxwell-Gleichung (1.120) für $h \rightarrow 0$

$$0 = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{B} dV = \oint_S \vec{B} \cdot \vec{n} dS = (\vec{B}_2 + \vec{B}_1) \cdot \vec{n} A = (B_2^\perp - B_1^\perp) A, \quad (1.128)$$

wobei V das Volumen und S die Oberfläche des Quaders bezeichnen. Somit gilt für die magnetische Flussdichte \vec{B} die Randbedingung

$$B_2^\perp = B_1^\perp, \quad (1.129)$$

d.h. beim Übergang an einer Grenzfläche G ist die Normalkomponente $\vec{B}_{\perp G}$ der magnetischen Flussdichte stetig. Analog lässt sich zeigen, dass auch die Normalkomponente $\vec{D}_{\perp G}$ der elektrischen Flussdichte beim Übergang an einer Grenzfläche stetig ist.

Um das Verhalten der magnetischen Feldstärke \vec{H} zu untersuchen, legen wir eine Schlaufe der Höhe h und Länge a um einen beliebigen Punkt der Grenzfläche G (siehe Abb. 1.23(b)). Der Satz von Stokes liefert dann für $h \rightarrow 0$

$$0 = \int_S (\vec{\nabla} \times \vec{H}) \cdot \vec{n} dS = \oint_{\partial S} \vec{H} \cdot \vec{l} dl = (\vec{H}_2 + \vec{H}_1) \cdot \vec{l} a = (H_2^\parallel - H_1^\parallel) a, \quad (1.130)$$

wobei S die Fläche und ∂S den Rand der Schlaufe bezeichnen. Somit gilt für die magnetische Feldstärke \vec{H} die Randbedingung

$$H_2^\parallel = H_1^\parallel, \quad (1.131)$$

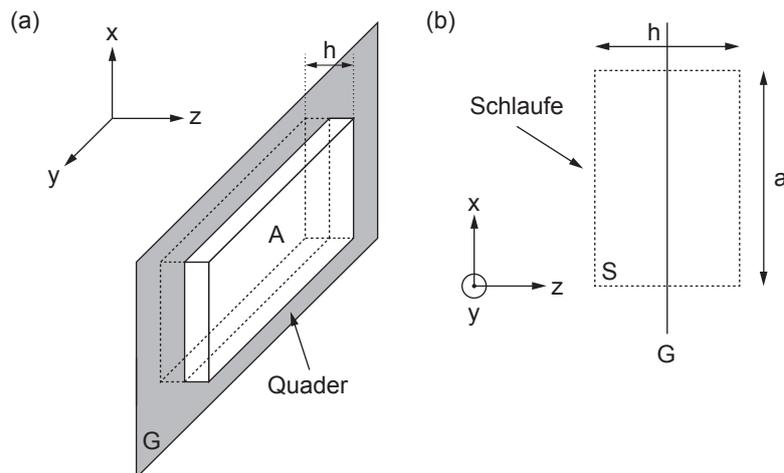


Abb. 1.23: (a) Quader der Fläche A und Höhe h um einen beliebigen Punkt der Grenzfläche G . (b) Schlaufe der Höhe h und Länge a um einen beliebigen Punkt der Grenzfläche G .

d.h. beim Übergang an einer Grenzfläche G ist die Parallelkomponente $\vec{H}_{\parallel G}$ der magnetischen Feldstärke stetig. Analog lässt sich zeigen, dass auch die Parallelkomponente $\vec{E}_{\parallel G}$ der elektrischen Feldstärke beim Übergang an einer Grenzfläche stetig ist.

Wir verwenden nun diese Randbedingungen um den Übergang von polarisiertem Licht zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes zu untersuchen. Dabei wählen wir das Koordinatensystem so, dass der Wellenvektor \vec{k} in der xz -Ebene liegt, die Normale der Grenzfläche zwischen den beiden Materialien durch die z -Achse gegeben ist und die Grenzfläche der xy -Ebene entspricht (siehe Abb. 1.24). Die Einfallsebene, die durch die Normale auf der Grenzfläche und den Wellenvektor der einfallenden Welle definiert ist, entspricht demzufolge der xz -Ebene.

Die elektrische Feldstärke der einfallenden, reflektierten und transmittierten ebenen Welle sind dann gegeben durch

$$\vec{E}_i = \vec{E}_{i0} e^{i(k_{ix}x + k_{iz}z - \omega t)}, \quad (1.132)$$

$$\vec{E}_r = \vec{E}_{r0} e^{i(k_{rx}x + k_{rz}z - \omega t)}, \quad (1.133)$$

$$\vec{E}_t = \vec{E}_{t0} e^{i(k_{tx}x + k_{tz}z - \omega t)}, \quad (1.134)$$

mit

$$k_{ix} = kn_1 \sin \vartheta_i, \quad k_{iz} = kn_1 \cos \vartheta_i, \quad (1.135)$$

$$k_{rx} = kn_1 \sin \vartheta_r, \quad k_{rz} = -kn_1 \cos \vartheta_r, \quad (1.136)$$

$$k_{tx} = kn_2 \sin \vartheta_t, \quad k_{tz} = kn_2 \cos \vartheta_t, \quad (1.137)$$

wobei n_1 und n_2 die Brechungsindizes der Materialien 1 und 2 sind, ϑ_i der Einfallswinkel, ϑ_r der Reflexionswinkel, ϑ_t der Transmissionswinkel und \vec{E}_{i0} , \vec{E}_{r0} , \vec{E}_{t0} die Amplituden der einfallenden, reflektierten und transmittierten Wellen.

Wir haben dabei angenommen, dass sich die Frequenz bei der Reflexion und Transmission nicht ändert und die Wellenvektoren der reflektierten und transmittierten Welle in der Einfallsebene liegen. Diese Annahmen lassen sich durch die Betrachtung der Randbedingung für die elektrische Feldstärke rechtfertigen: Die Parallelkomponente der elektrischen Feldstärke beim Übergang an einer Grenzfläche ist stetig

$$E_i^{\parallel} + E_r^{\parallel} = E_t^{\parallel}. \quad (1.138)$$

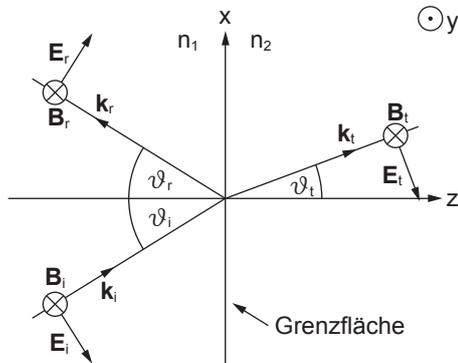


Abb. 1.24: Wahl des Koordinatensystems zur Untersuchung des Übergangs von polarisiertem Licht zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes $n_2 > n_1$.

Für den Koordinatenursprung $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ gilt dann

$$E_{i0}^{\parallel} e^{-i\omega_i t} + E_{r0}^{\parallel} e^{-i\omega_r t} = E_{t0}^{\parallel} e^{-i\omega_t t}, \quad (1.139)$$

wobei ω_i , ω_r und ω_t die Kreisfrequenz der einfallenden, reflektierten und transmittierten Welle sind. Diese Gleichung hat für beliebige Zeiten t nur dann eine nichttriviale Lösung, wenn $\omega_i = \omega_r = \omega_t \equiv \omega$. D.h. bei der Reflexion und Transmission ändert sich die Frequenz nicht. Betrachten wir die Randbedingung (1.138) für $z = 0$ und $t = 0$, so ergibt sich

$$E_{i0}^{\parallel} e^{ik_{ix}x} + E_{r0}^{\parallel} e^{i(k_{rx}x + k_{ry}y)} = E_{t0}^{\parallel} e^{i(k_{tx}x + k_{ty}y)}. \quad (1.140)$$

Diese Gleichung muss für alle x und y erfüllt sein. Folglich gilt für alle x und y

$$k_{ix}x = k_{rx}x + k_{ry}y = k_{tx}x + k_{ty}y \quad (1.141)$$

und somit für $x = 0$, dass $k_{ry} = k_{ty} = 0$, d.h. die Wellenvektoren der reflektierten und transmittierten Welle liegen in der Einfallsebene. Zudem erhalten wir

$$k_{ix} = k_{rx} = k_{tx}. \quad (1.142)$$

Mit (1.135), (1.136) und (1.137) erhalten wir daraus das Reflexionsgesetz $\vartheta_i = \vartheta_r$ und das Brechungsgesetz von Snellius $n_1 \sin \vartheta_i = n_2 \sin \vartheta_t$. Diese beiden Gesetze sind uns bereits bekannt, d.h. wir haben noch keine neue Informationen erhalten im Vergleich zur Beschreibung des Lichts durch eine skalare Wellenfunktion.

Unser Ziel ist es nun das Verhältnis der Amplituden der reflektierten und transmittierten Welle zur Amplitude der einfallenden Welle zu bestimmen. Wir beschränken uns dabei auf die Situation, bei der die elektrische Feldstärke parallel zur Einfallsebene ist (siehe Abb. 1.24).¹⁰ In diesem Fall spricht man von parallel polarisiertem Licht. Die Randbedingung für die elektrische Feldstärke lautet dann (siehe (1.138))

$$E_i \cos \vartheta_i - E_r \cos \vartheta_i = E_t \cos \vartheta_t, \quad (1.143)$$

wobei wir das Reflexionsgesetz $\vartheta_i = \vartheta_r$ verwendet haben. Auflösen nach E_t ergibt

$$E_t = (E_i - E_r) \frac{\cos \vartheta_i}{\cos \vartheta_t}. \quad (1.144)$$

Nach (1.131) ist wie bei der elektrischen Feldstärke auch die Parallelkomponente der magnetischen Feldstärke beim Übergang an einer Grenzfläche stetig. In unserem Fall ist die magnetische Feldstärke parallel zur Grenzfläche und daher gilt

$$H_i + H_r = H_t. \quad (1.145)$$

¹⁰Für weitere Ausführungen sei auf die Elektrodynamik-Vorlesung oder weiterführende Literatur verwiesen [1].

Mit $B = \mu\mu_0 H$ und der Annahme, dass $\mu_1 \sim \mu_2$ gilt daher auch

$$B_i + B_r = B_t. \quad (1.146)$$

Zudem erhalten wir mit (1.127)

$$B = \frac{kE}{\omega} = \frac{nE}{c} \quad (1.147)$$

und daher

$$n_1(E_i + E_r) = n_2 E_t. \quad (1.148)$$

Einsetzen von 1.144 für die Amplitude der transmittierten Welle ergibt

$$(E_i + E_r) = \frac{n_2}{n_1} (E_i - E_r) \frac{\cos \vartheta_i}{\cos \vartheta_t}. \quad (1.149)$$

Als nächstes bringen wir alle Ausdrücke mit E_i auf die eine Seite und alle Ausdrücke mit E_r auf die andere Seite und erhalten

$$E_r \left(1 + \frac{n_2 \cos \vartheta_i}{n_1 \cos \vartheta_t} \right) = E_i \left(\frac{n_2 \cos \vartheta_i}{n_1 \cos \vartheta_t} - 1 \right). \quad (1.150)$$

Damit ergibt sich schlussendlich für das Verhältnis der Amplitude E_r der reflektierten Welle zur Amplitude E_i der einfallenden Welle das folgende Resultat

$$\frac{E_r}{E_i} = \frac{n_2 \cos \vartheta_i - n_1 \cos \vartheta_t}{n_2 \cos \vartheta_i + n_1 \cos \vartheta_t}. \quad (1.151)$$

Analog erhalten wir sich für das Verhältnis der Amplitude E_t der transmittierten Welle zur Amplitude E_i der einfallenden Welle

$$\frac{E_t}{E_i} = \frac{2n_1 \cos \vartheta_i}{n_2 \cos \vartheta_i + n_1 \cos \vartheta_t}. \quad (1.152)$$

Diese beiden Gleichungen sind unter dem Namen *Fresnel-Gleichungen* bekannt. Wir gehen nun noch etwas genauer auf die Reflexion ein und formen dazu die Gleichung (1.151) mit Hilfe des Brechungsgesetzes von Snellius (1.6) und den

Additionstheoremen für trigonometrische Funktionen um

$$\begin{aligned}
\frac{E_r}{E_i} &= \frac{n_2 \cos \vartheta_i - n_1 \cos \vartheta_t}{n_2 \cos \vartheta_i + n_1 \cos \vartheta_t} \\
&= \frac{\cos \vartheta_i \sin \vartheta_i - \cos \vartheta_t \sin \vartheta_t}{\cos \vartheta_i \sin \vartheta_i + \cos \vartheta_t \sin \vartheta_t} \\
&= \frac{\cos \vartheta_i \sin \vartheta_i (\cos^2 \vartheta_t + \sin^2 \vartheta_t) - \cos \vartheta_t \sin \vartheta_t (\cos^2 \vartheta_i + \sin^2 \vartheta_i)}{\cos \vartheta_i \sin \vartheta_i (\cos^2 \vartheta_t + \sin^2 \vartheta_t) + \cos \vartheta_t \sin \vartheta_t (\cos^2 \vartheta_i + \sin^2 \vartheta_i)} \\
&= \frac{(\sin \vartheta_i \cos \vartheta_t - \cos \vartheta_i \sin \vartheta_t)(\cos \vartheta_i \cos \vartheta_t - \sin \vartheta_i \sin \vartheta_t)}{(\cos \vartheta_i \cos \vartheta_t + \sin \vartheta_i \sin \vartheta_t)(\sin \vartheta_i \cos \vartheta_t + \cos \vartheta_i \sin \vartheta_t)} \\
&= \frac{\sin \vartheta_i \cos \vartheta_t - \cos \vartheta_i \sin \vartheta_t}{\cos \vartheta_i \cos \vartheta_t + \sin \vartheta_i \sin \vartheta_t} \bigg/ \frac{\sin \vartheta_i \cos \vartheta_t + \cos \vartheta_i \sin \vartheta_t}{\cos \vartheta_i \cos \vartheta_t - \sin \vartheta_i \sin \vartheta_t} \\
&= \frac{\sin(\vartheta_i - \vartheta_t)}{\cos(\vartheta_i - \vartheta_t)} \bigg/ \frac{\sin(\vartheta_i + \vartheta_t)}{\cos(\vartheta_i + \vartheta_t)} \\
&= \frac{\tan(\vartheta_i - \vartheta_t)}{\tan(\vartheta_i + \vartheta_t)}. \tag{1.153}
\end{aligned}$$

Betrachten wir diesen Ausdruck, so erkennen wir, dass für $\tan(\vartheta_i + \vartheta_t) \rightarrow \infty$ das Verhältnis E_r/E_i gegen null geht und somit kein Licht reflektiert wird. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn $\vartheta_i + \vartheta_t = \pi/2$. Einsetzen ins Brechungsgesetz von Snellius (1.6) ergibt

$$n_1 \sin \vartheta_i = n_2 \sin(\pi/2 - \vartheta_i) = n_2 \cos \vartheta_i. \tag{1.154}$$

Somit erhalten wir für den Einfallswinkel ϑ_{iB} , bei dem kein Licht reflektiert wird, folgende Bedingung

$$\tan \vartheta_{iB} = \frac{n_2}{n_1}. \tag{1.155}$$

Dieser ausgezeichnete Winkel ϑ_{iB} heisst *Brewster-Winkel*. Es ist wichtig zu bemerken, dass ein solcher Winkel nur in dem von uns betrachteten Fall, bei dem das einfallende Licht parallel zur Einfallsebene polarisiert ist, auftritt. Ist das einfallende Licht senkrecht zur Einfallsebene polarisiert, tritt dieses Phänomen nicht auf. Dies ist eine sehr wichtige Eigenschaft. Fällt z.B. unpolarisiertes Licht unter dem Brewster-Winkel auf eine Grenzfläche zwischen zwei Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes, so wird nur der Anteil reflektiert, der senkrecht zur Einfallsebene polarisiert ist. In anderen Worten: Aufgrund des Phänomens des Brewster-Winkels ergibt sich eine Methode zur Erzeugung von linear polarisiertem Licht.

1.5 Messung von Spektren

Bisher haben wir unsere Betrachtungen auf die Ausbreitung von monochromatischem Licht beschränkt, d.h. Licht hatte bisher eine einzige Farbe und entsprach damit einer elektromagnetischen Welle mit einer genau definierten Frequenz (Wellenlänge). Natürliche Lichtquellen senden jedoch Licht aus, das aus verschiedenen Farben zusammengesetzt ist und somit eine Überlagerung von mehreren elektromagnetischen Wellen mit unterschiedlichen Frequenzen darstellt.

Dabei ist es so, dass die auftretenden Frequenzen je nach Lichtquelle unterschiedlich sind oder genauer gesagt: Die Intensität des Lichts in Abhängigkeit der Frequenz, das sogenannte *Spektrum*, ist für jede Lichtquelle einzigartig. Das bedeutet, dass durch die Analyse des Spektrums einer Lichtquelle Rückschlüsse auf die Natur der Lichtquelle gezogen werden können. Solche Untersuchungen, insbesondere die Analyse des Spektrums des Wasserstoffatoms, lieferten einen grossen Teil der experimentellen Resultate, auf deren Basis die Quantenmechanik entwickelt wurde (siehe Kapitel 8). Bevor jedoch ein Spektrum analysiert werden kann, muss es gemessen werden. Diesem Thema, der Messung von Spektren, ist dieser Abschnitt gewidmet. Dabei spielen zwei Effekte eine wichtige Rolle. Der eine ist unter dem Namen *Dispersion* bekannt. Darunter versteht man, dass sich Licht unterschiedlicher Frequenzen in den meisten Materialien mit einer unterschiedlichen Geschwindigkeit ausbreitet, d.h. der Brechungsindex ist eine Funktion der Frequenz. Der zweite Effekt ist die bereits diskutierte Beugung: Wir haben in Abschnitt 1.2.2 gesehen, dass in vielen Ausdrücken zur Beschreibung von Beugung und Interferenzmustern die Wellenlänge eine wichtige Rolle spielt, d.h. das Interferenzmuster von der Frequenz abhängen. Im Folgenden diskutieren wir eine Reihe von Aufbauten mit denen optische Spektren aufgenommen werden können.

1.5.1 Das Prisma

Ein einfaches Instrument zur Aufnahme von Spektren ist das Prisma. Es bewirkt eine räumliche Trennung der unterschiedlichen Frequenzen (Farben) des Lichts einer Lichtquelle. Die Funktionsweise beruht auf dem Brechungsgesetz von Snellius und der Tatsache, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Licht in einem Material je nach Frequenz unterschiedlich ist (Dispersion). Trifft z.B. Licht vom Vakuum auf ein Material mit Brechungsindex n , so gilt nach dem Brechungsgesetz von Snellius (1.6) für den Transmissionswinkel

$$\vartheta_t = \arcsin(n \sin \vartheta_i). \quad (1.156)$$

Da nun der Brechungsindex $n(f)$ eine Funktion der Frequenz f ist, ändert sich auch der Transmissionswinkel ϑ_t als Funktion der Frequenz. Dies erklärt wie ein Prisma unterschiedliche Frequenzen (Farben) des Lichts einer Lichtquelle räumlich trennt. Moderne Prismen verwenden Materialien wie SiO_2 (Quarz), ZnSe (Zinkselenid) oder NaCl (Kochsalz). Gegenüber anderen Messinstrumenten haben Prismen den Vorteil, dass typischerweise das gesamte Spektrum sichtbar wird, jedoch ist die Trennung von nahe beieinander liegenden Frequenzen (Farben) nur beschränkt möglich. Dies liegt darin begründet, dass Brechungsindizes von Materialien im sichtbaren Bereich nur sehr wenig variieren und somit der Transmissionswinkel für nahe beieinander liegende Frequenzen (Farben) sehr ähnlich ist. Zum Beispiel beträgt der Unterschied im Brechungsindex zwischen blauem ($\lambda = 470 \text{ nm}$, $f = 630 \text{ THz}$) und rotem Licht ($\lambda = 700 \text{ nm}$, $f = 430 \text{ THz}$) bei Kronglas (Mischung aus verschiedenen Elementen mit dem Hauptanteil Quarz) etwa 2%. Da Prismen in der modernen Physik eher selten eingesetzt werden, beschäftigen wir uns intensiver mit heute weiter verbreiteten Messinstrumenten für Spektren.

1.5.2 Das Gitterspektrometer

Das Gitterspektrometer ist ein Messinstrument, welches heutzutage in der Chemie und der Physik häufig zum Einsatz kommt. Das Hauptelement ist ein Reflexionsgitter, welches frequenzabhängig Licht reflektiert. Um ein solches Objekt zu produzieren, ist es üblich nichtreflektierende Streifen auf eine reflektierende Metalloberfläche zu ritzen. Die Funktionsweise eines Reflexionsgitters ist im Wesentlichen dieselbe wie die eines Transmissionsgitters, d.h. bei einem Gitter mit periodisch angeordneten Öffnungen.

Bevor wir genauer auf die Physik eingehen, betrachten wir einen typischen Aufbau eines Gitterspektrometers mit dessen Hilfe das Licht einer unbekanntenen Quelle untersucht werden kann (siehe Abb. 1.25): Das Licht der Quelle wird mit Hilfe einer Linse auf einen Spalt fokussiert. Dieser Spalt reduziert die ausgedehnte Lichtquelle auf eine Punktquelle. Eine weitere Linse im Abstand von einer Brennweite vom Spalt sorgt dafür, dass paralleles Licht unter einem Einfallswinkel ϑ_i auf das Reflexionsgitter trifft. Das Licht wird am Gitter reflektiert und das Licht, das das Gitter unter einem Ausfallswinkel ϑ_j verlässt, wird mit Hilfe einer weiteren Linse auf einen einzelnen Punkt fokussiert, wo sich der Detektor (z.B. eine CCD-Kamera) befindet. Diese letzte Linse bildet zusammen mit dem Detektor eine bewegliche Einheit, mit der es möglich ist die Intensität in Abhängigkeit des Orts zu messen.

Wir betrachten nun die Reflexion am Gitter mit Abstand d zwischen zwei reflektierenden Streifen etwas genauer (siehe Abb. 1.26). Der Phasenunterschied $\Delta\phi$ zwischen Lichtstrahlen, die unter einem Winkel ϑ_i auf das Gitter einfallen und unter einem Winkel ϑ_j reflektiert werden und von zwei benachbarten Streifen stammen, beträgt

$$\Delta\phi = kd(\sin\vartheta_j - \sin\vartheta_i) = \frac{2\pi d}{\lambda}(\sin\vartheta_j - \sin\vartheta_i). \quad (1.157)$$

Besitzt das Gitter N reflektierende Streifen im Abstand d , dann gilt für die Auslenkung U_P im Beobachtungspunkt P (Detektor)

$$\begin{aligned} U_P &\propto \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} e^{in\Delta\phi} = e^{-iN\Delta\phi/2} \sum_{j=0}^{N-1} \left(e^{i\Delta\phi} \right)^j \\ &= e^{-iN\Delta\phi/2} \frac{e^{iN\Delta\phi} - 1}{e^{i\Delta\phi} - 1} = e^{-i\Delta\phi/2} \frac{e^{iN\Delta\phi/2} - e^{-iN\Delta\phi/2}}{e^{i\Delta\phi/2} - e^{-i\Delta\phi/2}} \\ &\propto \frac{\sin(N\Delta\phi/2)}{\sin(\Delta\phi/2)}. \end{aligned} \quad (1.158)$$

Für die Intensität $I_P \propto |U_P|^2$ im Punkt P ergibt sich demzufolge¹¹

$$I_P = I_0 \frac{\sin^2(N\Delta\phi/2)}{\sin^2(\Delta\phi/2)}. \quad (1.159)$$

¹¹Wir haben angenommen, dass von jedem Reflexionsstreifen eine einzige reflektierte Welle ausgeht. Würde man die Ausdehnung der Streifen berücksichtigen, so müsste das Resultat für die Intensität I_P im Punkt P mit dem Faktor $\sin^2\beta/\beta^2$, d.h. der Intensität für die Beugung am Einzelspalt, multipliziert werden.

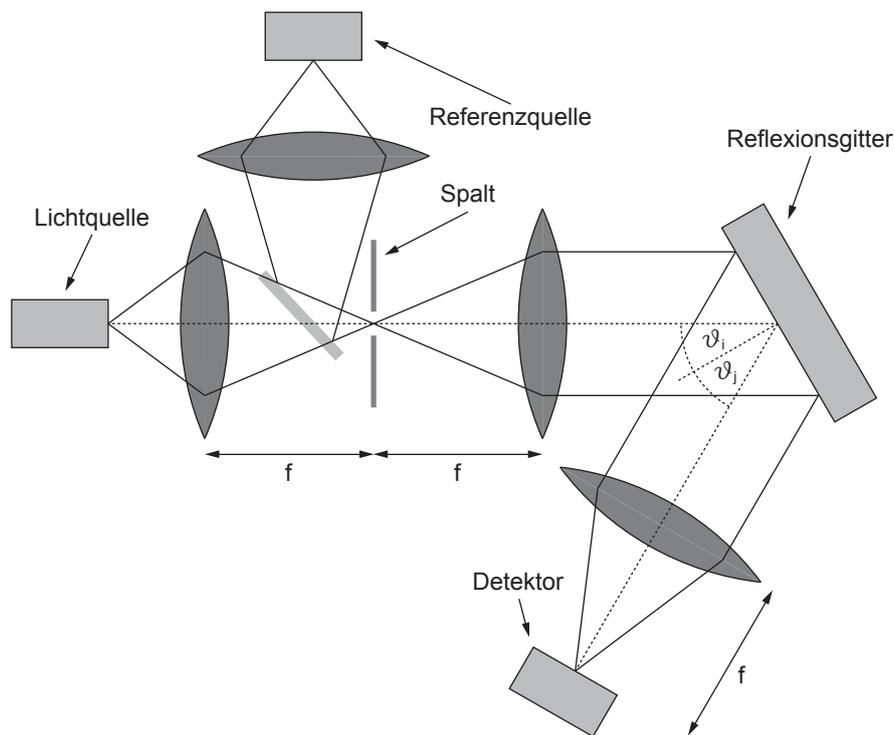


Abb. 1.25: Aufbau eines Gitterspektrometers: Das Licht der Lichtquelle wird mit Hilfe einer Linse auf einen Spalt fokussiert. Eine weitere Linse nach dem Spalt sorgt dafür, dass paralleles Licht auf das Reflexionsgitter trifft. Dieses wird dort reflektiert und schlussendlich von einem Detektor (z.B. einer CCD-Kamera) registriert. Die Referenzquelle liefert Licht bekannter Frequenzen, das ein Spektrum hervorruft, welches über demjenigen der unbekannt Lichtquelle zu liegen kommt und der Analyse des unbekannt Spektrums dient.

Wir gehen hier kurz auf die wichtigsten Eigenschaften dieser Intensitätsverteilung ein. Das Hauptmaximum in der Mitte des Musters ergibt sich unter der Bedingung $\vartheta_i = \vartheta_j$. Dies ist die gewöhnliche Reflexion und liefert keine spektralen Informationen. Nebenmaxima ergeben sich wenn der Nenner null wird, d.h. wenn $\Delta\phi/2 = p\pi$, $p \in \mathbb{Z}$. Das zu einem Maximum benachbarte Minimum tritt bei der benachbarten Nullstelle des Zählers auf, d.h. wenn $N\Delta\phi/2 = (pN + 1)\pi$, $p \in \mathbb{Z}$.

Wie zu Beginn angedeutet hängt auch diese Intensität für die Reflexion an einem Gitter von der Wellenlänge ab. Dies zeigt sich auch in den aufgeführten Bedingungen für Maxima und Minima. Das bedeutet, dass bei der Analyse einer unbekannt Lichtquelle mit einem Gitterspektrometer mehrere gegeneinander verschobene Muster zu erkennen sind und jede dieser Muster entspricht einer unterschiedlichen Wellenlänge. Dies ist genau die Art und Weise wie mit einem Gitterspektrometer ein Spektrum einer Lichtquelle gemessen wird. Hier stellt sich nun die Frage, wie gross das maximale Auflösungsvermögen eines Gitterspektrometers ist. Im Abschnitt 1.3 haben wir von einem räumlichen Auf-

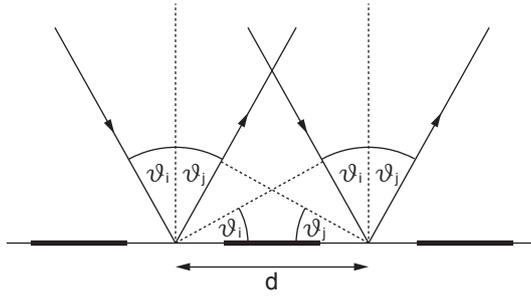


Abb. 1.26: Verlauf des Lichts bei der Reflexion an einem Gitter mit reflektierenden Streifen im Abstand d . Der Einfallswinkel ϑ_i entspricht dabei aufgrund der Interferenz nicht zwingend dem Ausfallswinkel ϑ_j .

lösungsvermögen gesprochen. Damit war der kleinste Abstand zweier Objekte gemeint, so dass diese noch als zwei Objekte wahrgenommen werden können. Hier sprechen wir von einem spektralen Auflösungsvermögen, d.h. von der kleinsten Differenz zweier Wellenlängen, so dass die entsprechenden Farben noch als getrennt wahrgenommen werden können. Analog zum Rayleigh-Kriterium (siehe Abschnitt 1.3) ergibt sich für das spektrale Auflösungsvermögen folgendes Kriterium:

Zwei Wellenlängen (Farben) können gerade noch als getrennt wahrgenommen (aufgelöst) werden, wenn die Maxima der Intensitätsverteilung, die der ersten Wellenlänge (Farbe) entspricht, mit den zu den Maxima benachbarten Minima der Intensitätsverteilung, die der zweiten Wellenlänge (Farbe) entspricht, zusammenfallen.

Mathematisch ausgedrückt, bedeutet dies für unser Gitterspektrometer

$$\frac{\Delta\phi(\lambda_1)}{2} = p\pi, \quad p \in \mathbb{Z}, \quad (1.160)$$

$$\frac{N\Delta\phi(\lambda_2)}{2} = (pN + 1)\pi, \quad p \in \mathbb{Z}. \quad (1.161)$$

Subtrahieren wir diese beiden Ausdrücke, so erhalten wir

$$\frac{\Delta\phi(\lambda_2)}{2} - \frac{\Delta\phi(\lambda_1)}{2} = \frac{\pi}{N}. \quad (1.162)$$

Einsetzen von (1.157) liefert

$$Nd(\sin\vartheta_j - \sin\vartheta_i) \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right) = 1. \quad (1.163)$$

Somit ergibt sich für die Differenz $\Delta\lambda$ der beiden Wellenlängen λ_1 und λ_2 unter der Annahme $\lambda \sim \lambda_1, \lambda_2$

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_2 \sim \frac{\lambda^2}{Nd(\sin\vartheta_j - \sin\vartheta_i)}. \quad (1.164)$$

Der maximale Wert den $(\sin\vartheta_j - \sin\vartheta_i)$ annehmen kann ist 2. Daher ergibt sich für das Auflösungsvermögen $\Delta\lambda_{\min}$ bzw. Δf_{\min} eines Gitterspektrometers¹²

¹²Da $c = \lambda f$ gilt $|df/d\lambda| = c/\lambda^2$. Damit ergibt sich zwischen dem Auflösungsvermögen $\Delta\lambda_{\min}$

$$\Delta\lambda_{\min} = \frac{\lambda^2}{2Nd} \text{ bzw. } \Delta f_{\min} = \frac{c}{2Nd}. \quad (1.166)$$

An dieser Formel erkennen wir, dass das Auflösungsvermögen eines Gitterspektrometers umgekehrt proportional zur Gesamtlänge Nd des Gitters ist. Dies gilt nicht nur für das Gitterspektrometer, sondern allgemein für spektroskopische Messinstrumente: Das Auflösungsvermögen ist umgekehrt proportional zum maximalen Wegunterschied, den zwei Lichtstrahlen haben können, die unterschiedliche Teile der Apparatur passieren. Insbesondere treffen wir dieses Resultat in den beiden nächsten Abschnitten im Zusammenhang mit der Besprechung des Michelson- und des Fabry-Pérot-Interferometers wieder an.

In vielen Anwendungen des Gitterspektrometers wird eine Anordnung gewählt, so dass nur eine einzige Ordnung des Gitters verwendet wird oder experimentell ausgedrückt, nur ein kleiner Winkelbereich um einen gegebenen Winkel, der Gleichung (1.160) erfüllt, wird verwendet. In diesem Fall ergibt sich mit Gleichung (1.164) für das Auflösungsvermögen $\Delta\lambda_{\min}$ eines Gitterspektrometers

$$\Delta\lambda_{\min} = \frac{\lambda}{Np}, \quad p \in \mathbb{Z}. \quad (1.167)$$

An dieser Stelle sei bemerkt, dass oft nicht $\Delta\lambda_{\min}$ sondern der Kehrwert $1/\Delta\lambda_{\min}$ als Auflösungsvermögen bezeichnet wird, da der Kehrwert ansteigt, wenn die Möglichkeit näher beieinander liegende Wellenlängen aufzulösen, zunimmt.

1.5.3 Das Michelson-Interferometer

Das Michelson-Interferometer ist eines der klassischen Messinstrumente in der Optik. Ursprünglich wurde es vom Nobelpreisträger Albert Abraham Michelson entwickelt um die unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten des Lichts auf der Erde wegen deren relativen Bewegung zum sogenannten Äther nachzuweisen¹³. Heute wird diese Messanordnung immer noch eingesetzt. Am LIGO (Laser Interferometer Gravitationswellen Observatorium) werden damit z.B. Experimente zum Test der allgemeinen Relativitätstheorie durchgeführt.

Wir gehen nun auf den Aufbau eines Michelson-Interferometers ein (siehe Abb. 1.27). Eine Quelle sendet eine Lichtwelle aus, welche auf einen Strahlenteiler trifft, der diese in zwei Lichtwellen aufteilt. Eine dieser Lichtwellen breitet

und Δf_{\min} der Zusammenhang

$$\Delta f_{\min} = \frac{c}{\lambda^2} \Delta\lambda_{\min}. \quad (1.165)$$

Zudem haben wir angenommen, dass die Messungen in Luft oder im Vakuum stattfinden und daher der Brechungsindex $n = 1$ ist.

¹³Ende des 17. Jahrhunderts entstand die Theorie, dass sich Lichtwellen in einem hypothetischen Medium, dem Äther, ausbreiten. Das Ergebnis des Michelson-Experiments (auch Michelson-Morley-Experiment genannt) war dann entgegen dem ursprünglichen Ziel, ein Grund zur Widerlegung dieser Theorie.

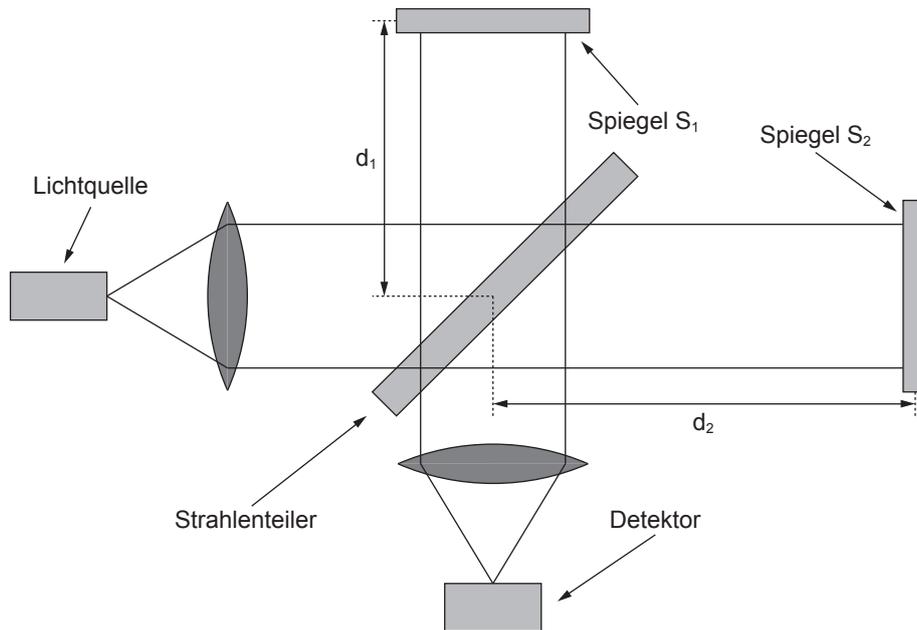


Abb. 1.27: Aufbau eines Michelson-Interferometers: Die elektromagnetische Strahlung einer Lichtquelle wird durch einen Strahlenteiler in zwei Teile aufgeteilt. Die Teilwellen reflektieren an den Spiegeln S_1 bzw. S_2 und treffen beim Strahlenteiler wieder aufeinander. Ein Teil der wieder vereinten Lichtwelle trifft auf den Detektor.

sich dann nach rechts aus und die andere nach oben. Am Ende der sogenannten Arme des Michelson-Interferometers befinden sich je ein Spiegel S_1 und S_2 an denen die beiden Lichtwellen dann reflektiert werden und sich wieder Richtung Strahlenteiler ausbreiten. Dort interferieren sie und ein Teil der wieder vereinten Lichtwelle trifft auf den Detektor.

Bezeichnen wir die Längen der beiden Arme des Michelson-Interferometers mit d_1 und d_2 , dann beträgt der Phasenunterschied $\Delta\phi$ der beiden Lichtwellen, wenn sie beim Strahlenteiler interferieren¹⁴

$$\Delta\phi = 2k(d_2 - d_1), \quad (1.168)$$

wobei der Grund für den Faktor 2 ist, dass die Lichtwellen die Strecken d_1 bzw. d_2 zweimal zurücklegen. Für die Auslenkung U_P der elektromagnetischen Welle im Beobachtungspunkt P (Detektor) ergibt sich dann

$$U_P \propto (1 + e^{i\Delta\phi}). \quad (1.169)$$

Demzufolge erhalten wir für die Intensität $I_P \propto |U_P|^2$ im Punkt P

$$I_P \propto (1 + e^{i\Delta\phi})(1 + e^{-i\Delta\phi}) = 2 + 2 \cos \Delta\phi \quad (1.170)$$

¹⁴Wir gehen auch beim Michelson-Interferometer davon aus, dass die Messungen in Luft oder im Vakuum stattfinden und daher der Brechungsindex $n = 1$ ist.

und somit

$$I_{\text{P}} = \frac{I_0}{2}(1 + \cos \Delta\phi), \quad (1.171)$$

wobei I_0 die Intensität bei Phasenunterschied $\Delta\phi = 0$ bezeichnet.

Gleichung (1.171) entspricht der Intensität für eine monochromatische Lichtquelle. Wir beschäftigen uns in diesem Abschnitt jedoch mit natürlichen Lichtquellen, die Licht aussenden, das eine Überlagerung von mehreren elektromagnetischen Wellen mit unterschiedlichen Frequenzen darstellt und verfolgen das Ziel das Spektrum solcher Lichtquellen zu bestimmen. Im Folgenden gehen wir darauf ein, wie wir eine solche Messung mit einem Michelson-Interferometer durchführen können.

Wenn wir den Detektor für genügend lange Zeit öffnen, können wir Interferenz zwischen den einzelnen Wellen mit unterschiedlicher Frequenz ausschliessen. Führen wir den Längenunterschied $x = d_2 - d_1$ der beiden Arme des Michelson-Interferometers ein, so ergibt sich für den Phasenunterschied $\Delta\phi = 2kx = 4\pi fx/c$ und wir erhalten für die Intensität I_{P} beim Detektor in Abhängigkeit des Längenunterschieds x

$$I_{\text{P}}(x) = \frac{1}{2} \int_0^\infty I(f) \left(1 + \cos \left(\frac{4\pi f}{c} x \right) \right) df = \frac{I_0}{2} + \int_0^\infty I(f) \cos \left(\frac{4\pi f}{c} x \right) df, \quad (1.172)$$

wobei $I(f)$ die Intensität der Lichtquelle pro Frequenzintervall df um die Frequenz f bezeichnet und somit nichts anderes als das gesuchte Spektrum der Lichtquelle darstellt. Betrachten wir den Ausdruck in Gleichung (1.172) etwas genauer, so erkennen wir, dass der erste Term eine Konstante darstellt unabhängig von x und der zweite Term die Kosinus-Transformierte¹⁵ des Spektrums $I(f)$. Nehmen wir an das Spektrum $I(f)$ sei symmetrisch um eine zentrale Frequenz f_0 , dann können wir die Kosinus-Transformation umkehren und erhalten

$$I(f) = \int_0^{x_{\text{max}}} (2I_{\text{P}}(x) - I_0) \cos \left(\frac{4\pi f}{c} x \right) dx, \quad (1.173)$$

wobei x_{max} den maximalen Längenunterschied zwischen den beiden Armen des Michelson-Interferometers bezeichnet. Somit kann das Spektrum $I(f)$ einer Lichtquelle mit Hilfe eines Michelson-Interferometers bestimmt werden, in dem die Intensität $I_{\text{P}}(x)$ in Abhängigkeit des Längenunterschieds x gemessen wird und vom Ausdruck $2I_{\text{P}}(x) - I_0$ die Kosinus-Transformierte bestimmt wird.

Wie beim Gitterspektrometer stellen wir uns nun auch hier die Frage, wie gross ist das spektrale Auflösungsvermögen eines Michelson-Interferometers. Zur Beantwortung dieser Frage, betrachten wir eine monochromatische Lichtquelle mit Frequenz f_0 . Beim Detektor des Michelson-Interferometers wird dann nach Gleichung (1.171) die Intensitätsverteilung

$$I_{\text{P}}(x) = \frac{I_0}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{4\pi f_0}{c} x \right) \right) \quad (1.174)$$

¹⁵Unter der Kosinus-Transformation versteht man eine Variante der Fourier-Transformation für reelle Zahlen.

registriert. Da wir weiterhin von natürlichen Lichtquellen ausgehen, so wird auch diese monochromatische Lichtquelle nicht nur Lichtwellen der Frequenz f_0 aussenden, sondern Lichtwellen in einem schmalen Frequenzband nahe bei f_0 . Um die genaue Intensitätsverteilung der Lichtquelle zu bestimmen, wenden wir auf dieses Signal die Kosinus-Transformation nach Gleichung (1.173) an und erhalten

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_0^{x_{\max}} \cos\left(\frac{4\pi f_0}{c}x\right) \cos\left(\frac{4\pi f}{c}x\right) dx \\ &= \frac{\sin(4\pi(f-f_0)x_{\max}/c)}{4\pi(f-f_0)/c} + \frac{\sin(4\pi(f+f_0)x_{\max}/c)}{4\pi(f+f_0)/c}. \end{aligned} \quad (1.175)$$

Da wie erwähnt alle Frequenzen f nahe bei der Frequenz f_0 liegen, gilt $f-f_0 \ll f+f_0$ und wir können den zweiten gegenüber dem ersten Term vernachlässigen

$$I(f) \sim \frac{\sin(4\pi(f-f_0)x_{\max}/c)}{4\pi(f-f_0)/c}. \quad (1.176)$$

Der Abstand zwischen dem Hauptmaximum und dem benachbarten Minimum beträgt

$$\Delta f_{\min} = \frac{c}{4x_{\max}}, \quad (1.177)$$

was analog zu den Ausführungen beim Gitterspektrometer dem spektralen Auflösungsvermögen des Michelson-Interferometers entspricht.

Das bedeutet, dass zwei Frequenzen gerade noch als getrennt wahrgenommen werden können, wenn ihre Differenz $c/4x_{\max}$ ist. Da der maximale Wegunterschied zwischen zwei Lichtstrahlen, die jeweils einen Arm des Michelson-Interferometers passieren $2x_{\max}$ beträgt, gilt auch hier wie bei allen optischen Messinstrumenten, dass das Auflösungsvermögen umgekehrt proportional zum maximalen Wegunterschied ist, den zwei Lichtstrahlen haben können, die unterschiedliche Teile einer Apparatur passieren. Da es einfacher ist einen Spiegel über grössere Distanzen zu verschieben als ein sehr grosses Gitter zu bauen, wird das Michelson-Interferometer gegenüber dem Gitterspektrometer zur Messung eines Spektrums häufig bevorzugt.

1.5.4 Das Fabry-Pérot-Interferometer

Das Fabry-Pérot-Interferometer ist heutzutage wahrscheinlich das am häufigsten verwendete optische Messinstrument. Der Grund dafür ist, dass es nicht nur zur Messung eines Spektrums eingesetzt werden kann, sondern auch eine der wichtigsten Komponenten eines Lasers darstellt. Der Aufbau eines Fabry-Pérot-Interferometers ist relativ einfach. Es besteht aus zwei parallelen teildurchlässigen Spiegeln, die in einem Abstand d voneinander entfernt aufgestellt werden (siehe Abb. 1.28). Ein von links eintreffender Lichtstrahl wird dann mehrfach zwischen den beiden Spiegeln hin und her reflektiert und alle diese Teilwellen

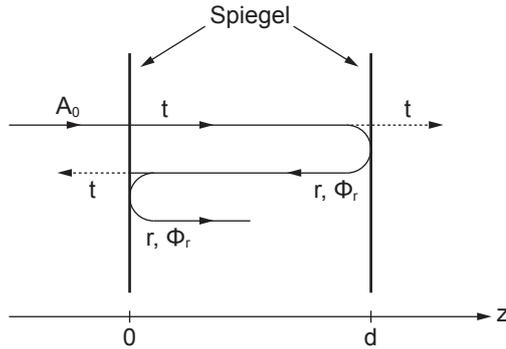


Abb. 1.28: Schematischer Aufbau eines Fabry-Pérot-Interferometers: Zwei parallele Spiegel mit Transmissionskoeffizient t und Reflexionskoeffizient $re^{i\phi_r}$ sind in einem Abstand d voneinander aufgestellt.

werden miteinander interferieren. Man spricht daher bei dieser Anordnung auch von einem *optischen Resonator*. Damit kann ein grosser (maximaler) Wegunterschied zwischen zwei Lichtstrahlen erreicht werden, was nach unseren Ausführungen zum Gitterspektrometer und zum Michelson-Interferometer bedeutet, dass wir mit einem Fabry-Pérot-Interferometer ein grosses Auflösungsvermögen erreichen können.

Wir gehen nun genauer auf die Funktionsweise des Fabry-Pérot-Interferometers ein. Dabei beschränken wir uns auf den Spezialfall, bei dem die beiden Spiegel aus demselben Material sind, keine Absorption auftritt und der Einfallswinkel, der von links einfallenden Lichtwelle null ist. Beträgt die Amplitude der einfallenden Lichtwelle A_0 , dann wird diese beim Eintritt in den optischen Resonator um den Transmissionskoeffizient t reduziert¹⁶. Demzufolge hat die Amplitude bei $z = 0$ den Wert A_0t . In der Folge breitet sich die Lichtwelle über die Länge d des optischen Resonators aus und reflektiert am zweiten Spiegel. Bei der Reflexion ändert sich dann die Amplitude um den Faktor $re^{i\phi_r}$, wobei r der reelle Reflexionskoeffizient ist und ϕ_r die Phasenverschiebung bei der Reflexion. Anschliessend breitet sich die Lichtwelle wieder zurück zum ersten Spiegel aus und wird dort reflektiert. Diese Lichtwelle breitet sich dann parallel zur einfallenden Welle aus und interferiert mit dieser. Die Amplituden dieser beiden Wellen addieren sich dann zu einer gesamten Amplitude¹⁷

$$A_1 = A_0t + A_0tr^2e^{i\Delta\phi} \quad \text{mit } \Delta\phi = k2d + 2\phi_r. \quad (1.178)$$

Jeder der folgenden Durchgänge liefert dann einen zusätzlichen Beitrag zu dieser Amplitude, so dass schlussendlich eine Gesamtamplitude

$$A = A_0t \sum_{n=0}^{\infty} \left(r^2 e^{i\Delta\phi} \right)^n = \frac{A_0t}{1 - r^2 e^{i\Delta\phi}} \quad (1.179)$$

resultiert. Dient das Fabry-Pérot-Interferometer zur Messung eines Spektrums, dann untersuchen wir die Intensität des Lichts, das den optischen Resonator auf der rechten Seite verlässt. Die Amplitude A_t dieser transmittierten Lichtwelle ergibt sich durch Multiplikation von (1.179) mit te^{ikd} . Mit diesem Faktor berücksichtigen wir einerseits, dass das Licht zusätzlich die Strecke d zurücklegen muss

¹⁶Der Transmissionskoeffizient t kann im Allgemeinen komplex sein, d.h. bei der Transmission kann eine Phasenverschiebung auftreten. Wir werden dies hier jedoch nicht berücksichtigen.

¹⁷Die beiden Spiegel seien von Luft umgeben und daher ist der Brechungsindex $n = 1$.

und andererseits die Transmission durch den rechten Spiegel. Damit erhalten wir für das Verhältnis von transmittierter zu einfallender Lichtintensität

$$\frac{|A_t|^2}{|A_0|^2} = \frac{t^4}{(1 - r^2 e^{i\Delta\phi})(1 - r^2 e^{-i\Delta\phi})} = \frac{t^4}{1 + r^4 - 2r^2 \cos \Delta\phi}. \quad (1.180)$$

Wie zu Beginn erwähnt, nehmen wir an, dass das Licht bei den Spiegeln nicht absorbiert wird. Daher gilt $t^2 = 1 - r^2$. Führen wir zusätzlich die Konstanten $R \equiv r^2$ und $T = (1 - R) \equiv t^2$ ein, welche den Anteil der Intensität, der bei den Spiegeln reflektiert bzw. transmittiert wird, bezeichnen, dann vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\begin{aligned} \frac{|A_t|^2}{|A_0|^2} &= \frac{(1 - R)^2}{1 + R^2 - 2R \cos \Delta\phi} = \frac{(1 - R)^2}{(1 - R)^2 + 2R(1 - \cos \Delta\phi)} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{2R}{(1-R)^2}(1 - \cos \Delta\phi)} = \frac{1}{1 + \frac{4R}{(1-R)^2} \sin^2(\Delta\phi/2)}. \end{aligned} \quad (1.181)$$

Wir untersuchen nun dieses Resultat etwas genauer, indem wir das Verhältnis von transmittierter zu einfallender Lichtintensität $|A_t|^2/|A_0|^2$ als Funktion von $\Delta\phi$ für verschiedene Werte von R zeichnen (siehe Abb. 1.29). Wir erkennen regelmässig angeordnete Resonanzen bei $\Delta\phi = 2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$, deren Breiten mit zunehmendem R abnehmen. Da $k = 2\pi f/c$ gilt mit (1.178)

$$\Delta\phi = \frac{4\pi f d}{c} + 2\phi_r \quad (1.182)$$

und wir können jedem $\Delta\phi$ und damit auch jeder Resonanz eine Frequenz f zuordnen. Das Ziel ist es nun mit Hilfe dieses Zusammenhangs die Breite und den Abstand der Resonanzen durch die Frequenz auszudrücken.

Es seien $\Delta\phi_1$ und $\Delta\phi_2$ die Phasen zweier benachbarter Resonanzen und f_1 und f_2 die entsprechenden Frequenzen dann gilt aufgrund der Resonanzbedingung $\Delta\phi = 2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$

$$2\pi = \Delta\phi_1 - \Delta\phi_2 = \frac{4\pi f_1 d}{c} - \frac{4\pi f_2 d}{c} = \frac{4\pi d}{c}(f_1 - f_2). \quad (1.183)$$

Demzufolge ergibt sich für den Frequenzabstand Δf zweier benachbarter Resonanzen, den sogenannten *freien Spektralbereich* (FSR),

$$\Delta f = f_1 - f_2 = \frac{c}{2d}. \quad (1.184)$$

Wir bezeichnen nun die Phase bei den Resonanzen mit $\Delta\phi_m = 2\pi m$, $m \in \mathbb{Z}$. Dann ist das Verhältnis von transmittierter zu einfallender Lichtintensität bei $\Delta\phi_m + \Delta\phi_{1/2}$ auf die Hälfte gesunken ist, wobei $\Delta\phi_{1/2}$ folgende Bedingung erfüllt (siehe Gleichung (1.181))

$$\frac{4R}{(1 - R)^2} \sin^2(\Delta\phi_{1/2}/2) = 1. \quad (1.185)$$

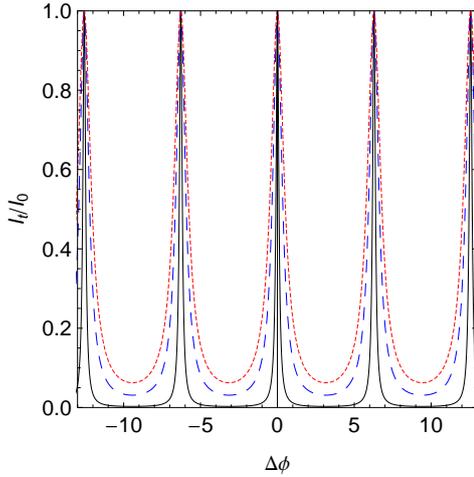


Abb. 1.29: Verhältnis von transmittierter zu einfallender Lichtintensität $|A_t|^2/|A_0|^2$ für ein Fabry-Pérot-Interferometer als Funktion von $\Delta\phi$ für $R = 0.9$ (schwarze Linie), $R = 0.7$ (blaue grobgestrichelte Linie) und $R = 0.6$ (rote feingestrichelte Linie).

Daraus folgt

$$\Delta\phi_{1/2} = 2 \arcsin \left(\sqrt{\frac{(1-R)^2}{4R}} \right) \quad (1.186)$$

und damit ergibt sich für die Halbwertsbreite δ einer Resonanz ausgedrückt in der Phase

$$\delta = 2\Delta\phi_{1/2} = 4 \arcsin \left(\sqrt{\frac{(1-R)^2}{4R}} \right) \sim 4\sqrt{\frac{(1-R)^2}{4R}}, \quad (1.187)$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass R typischerweise nahe bei 1 liegt und daher das Argument des Arkussinus klein ist. Mit Hilfe von (1.183) ergibt sich daraus die Halbwertsbreite δf ausgedrückt in der Frequenz

$$\delta f = \frac{c}{4\pi d} \delta = \frac{c}{\pi d} \sqrt{\frac{(1-R)^2}{4R}} = \frac{\Delta f}{F} \quad \text{mit} \quad F = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{4R}{(1-R)^2}}, \quad (1.188)$$

wobei F die sogenannte *Finesse* bezeichnet. Diese gibt demzufolge das Verhältnis des Abstands Δf von zwei benachbarten Resonanzen zur Halbwertsbreite δf der Resonanzen an. Eine hohe Finesse bedeutet somit sehr schmale Resonanzen.

Als nächstes gehen wir nun darauf ein wie mit einem Fabry-Pérot-Interferometer Messungen durchgeführt werden können. Damit soll auch ein besseres Verständnis der hergeleiteten Resultate erlangt werden. Eine mögliche Art der Messung besteht darin die emittierte Lichtintensität in Abhängigkeit des Abstands d der beiden Spiegel zu bestimmen. Diese Methode wird eher selten verwendet, da es eine grosse Herausforderung darstellt, dass bei diesem Scanningvorgang kein Licht den optischen Resonator unerwünscht verlässt. Alternativ wird daher häufig anstelle des Abstands der Druck des Gases zwischen den beiden Spiegeln verändert. Dadurch ändert sich der Brechungsindex und demzufolge die optische Weglänge. Eine weitere Messmethode besteht darin, die emittierte Lichtintensität in Abhängigkeit des Austrittswinkels ϑ des Lichts zu

bestimmen. Die Phasenverschiebung $\Delta\phi$ (siehe Gleichung (1.178)) beträgt dann (siehe Abb. 1.30)

$$\begin{aligned}\Delta\phi &= k \left(\frac{2d}{\cos\vartheta} - 2d \tan\vartheta \sin\vartheta \right) + 2\phi_r = 2kd \left(\frac{1}{\cos\vartheta} - \tan\vartheta \sin\vartheta \right) + 2\phi_r \\ &= 2kd \frac{1 - \sin^2\vartheta}{\cos\vartheta} + 2\phi_r = 2kd \cos\vartheta + 2\phi_r.\end{aligned}\quad (1.189)$$

Unabhängig von der Messmethode ergeben sich entsprechend unseren Berechnungen für die emittierte Lichtintensität in Abhängigkeit der veränderbaren Grösse ein Muster wie in Abb. 1.29. Da wir hier von Lichtquellen ausgehen, die Licht unterschiedlicher Frequenzen aussendet, werden sich diese einzelnen frequenzabhängigen Muster überlagern. Für das spektrale Auflösungsvermögen eines Fabry-Pérot-Interferometers sind dabei die zuvor bestimmten Grössen, der freie Spektralbereich Δf und die Halbwertsbreite δf , entscheidend. In der Praxis existieren heute optische Resonatoren mit einer Finesse $F > 250000$. Dazu sind Materialien mit $R = 0.999987$ notwendig. Bei einem solchen optischen Resonator wird das Licht etwa 250000 mal an beiden Spiegeln reflektiert, d.h. bei einem Abstand von 10 cm zwischen den Spiegeln entspricht dies einer Strecke von 50 km. Dieser Typ von Fabry-Pérot-Interferometer, das aus Glas gefertigt wird, welches sich bei Temperaturänderungen stark ausdehnt oder zusammenzieht, wird bei Lasern zur Stabilisation der Frequenz eingesetzt. Diese kommen in Atomuhren oder im Bereich der Quanteninformationsverarbeitung zum Einsatz.

Zum Abschluss dieses Abschnitts sei noch erwähnt, dass wie bereits angedeutet Messungen mit dem Fabry-Pérot-Interferometer relativ heikel sind und es daher oft in Verbindung mit einem anderen Messinstrument wie z.B. einem Gitterspektrometer verwendet wird. Dabei wird mit Hilfe des Gitterspektrometers der Bereich des Spektrums ausgewählt, der beobachtet werden möchte und das Fabry-Pérot-Interferometer liefert dann die Details. Ein möglicher Aufbau eines solchen Experiments ist in Abb. 1.31 skizziert.

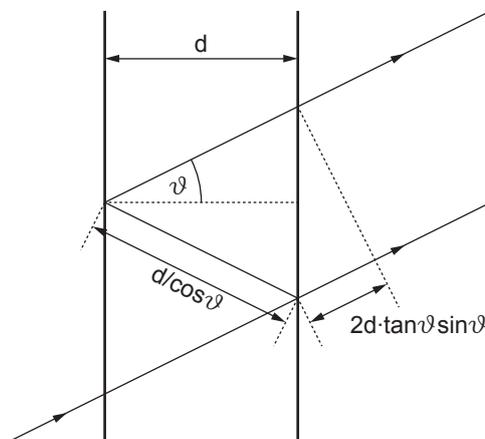


Abb. 1.30: Illustration der Berechnung des Wegunterschieds für parallele Lichtstrahlen, die ein Fabry-Pérot-Interferometer passieren. Der reflektierte Lichtstrahl legt zwischen den beiden Spiegeln gegenüber dem nicht abgelenkten Lichtstrahl einen zusätzlichen Weg $2d/\cos\vartheta$ zurück. Ausserhalb der Spiegel benötigt der nicht abgelenkte Lichtstrahl einen zusätzlichen Weg $2d \tan\vartheta \sin\vartheta$.

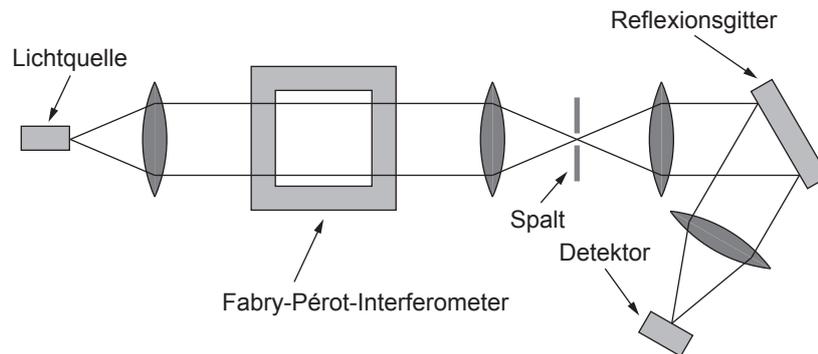


Abb. 1.31: Aufbau eines Experiments mit einem Fabry-Pérot-Interferometer kombiniert mit einem Gitterspektrometer.

1.6 Zusammenfassung

- Licht ist eines der wichtigsten Hilfsmittel zur Untersuchung der Natur. Ein typischer experimenteller Aufbau besteht dabei aus einer Lichtquelle, die Licht der Wellenlänge λ isotrop in alle Richtungen des Raumes aussendet. Dahinter folgt eine Sammellinse, so dass das Licht, das anschliessend auf das zu untersuchende Objekt mit Ausdehnung d und Masse m trifft, in guter Näherung als ebene elektromagnetische Welle beschrieben werden kann. Nach der Wechselwirkung mit dem Objekt wird das Licht mit einem Detektor aufgefangen und die Intensität I der detektierten Strahlung als Funktion des Ortes dargestellt. Je nachdem unter welchen Bedingungen Experimente mit Licht durchgeführt werden, kommen andere Eigenschaften des Lichts zum Vorschein und ein geeignetes Modell muss zur Beschreibung der Eigenschaften des Lichts herangezogen werden.
- Ist die Wellenlänge λ des Lichts viel kleiner als die Ausdehnung d der Objekte mit denen es wechselwirkt und besitzen die Objekte eine grosse Masse m , so befinden wir uns im Bereich der **geometrischen Optik**, in dem wir Licht als geometrische Strahlen beschreiben können.

Die Grundlage der geometrischen Optik bildet das *Fermatsche Prinzip*, das besagt, dass das Licht von einem Punkt zu einem anderen den Weg wählt, für den die benötigte Zeit minimal ist. Mit Hilfe dieses Prinzips kann z.B. das Reflexionsgesetz oder das Brechungsgesetz von Snellius hergeleitet werden.

Eines der wichtigsten optischen Elemente ist die *Linse*. Darunter versteht man speziell geformte transparente Körper, die in optischen Instrumenten verwendet werden um Gegenstände abzubilden. Sie werden gemäss ihren Abbildungseigenschaften in Sammellinsen (konvexe Linsen) und Streulinsen (konkave Linsen) unterteilt. Das vom Menschen am häufigsten eingesetzte optische Instrument ist das Auge. Es dient oft als Inspiration beim Design von anderen optischen Instrumenten. Das Auge hat jedoch auch seine Einschränkungen, was u.a. zur Entwicklung des Teleskops und des Mikroskops führte.

· In der **Wellenoptik** betrachtet man Experimente, bei denen die Wellenlänge λ des Lichts von ähnlicher Grössenordnung ist wie die Abmessungen d der zu untersuchenden Objekte und die Objekte eine grosse Masse m aufweisen. Unter diesen Bedingungen treten Interferenz- oder Beugungserscheinungen zu Tage, d.h. das Licht zeigt klar die Eigenschaften elektromagnetischer Wellen. Typischerweise betrachten wir im Rahmen der Wellenoptik Experimente, bei denen elektromagnetische Strahlung (Licht) ausgehend von einer Quelle auf ein Beugungsobjekt trifft und fragen uns was für eine Intensität wir in einem Beobachtungspunkt hinter dem Beugungsobjekt messen werden.

Eine anschauliche Beschreibung der Beugung folgt aus dem *Prinzip von Huygens*, das besagt: Jeder Punkt einer bestehenden Wellenfront wird als Quelle einer neuen kugelförmigen Elementarwelle aufgefasst. Die Umhüllende dieser Elementarwellen ergibt dann die Wellenfront zu einem späteren Zeitpunkt. Dieses Prinzip wurde nicht aus fundamentalen Prinzipien hergeleitet, sondern von Huygens postuliert. Im Rahmen der *Kirchhoffschen Beugungstheorie* wird gezeigt, dass die aus dem Prinzip von Huygens hergeleiteten Resultate auch aus der skalaren Wellengleichung folgen, was das Prinzip von Huygens im Nachhinein rechtfertigt.

Wenn wir im Bereich des Beugungsobjekts von ebenen Wellen ausgehen können, sprechen wir von *Fraunhofer-Beugung*. Diese Näherung ist gerechtfertigt, wenn der Abstand zwischen Quelle und Beugungsobjekt, sowie zwischen Beugungsobjekt und Beobachtungspunkt sehr viel grösser ist als die Dimensionen der Blende. Als Alternative kann jedoch auch die Punktquelle im Brennpunkt einer Sammellinse positioniert werden und der Beobachtungspunkt im Brennpunkt einer zweiten Sammellinse. In diesem Fall ist die Fraunhofer-Näherung exakt.

Im Rahmen der Fraunhofer-Näherung ergeben sich folgende Intensitätsverteilungen I_P im Beobachtungspunkt P hinter einem Beugungsobjekt:

· Spalt

$$I_P = I_0 \frac{\sin^2 \beta}{\beta^2} \text{ mit } \beta = kXa/2. \quad (1.190)$$

· Doppelspalt

$$I_P = I_0 \cos^2 \varphi \frac{\sin^2 \beta}{\beta^2} \text{ mit } \varphi = kYa/2, \beta = kYb/2. \quad (1.191)$$

· Rechteckige Blende

$$I_P = I_0 \frac{\sin^2 \beta_x}{\beta_x^2} \frac{\sin^2 \beta_y}{\beta_y^2} \text{ mit } \beta_x = kXa/2, \beta_y = kYb/2. \quad (1.192)$$

· Kreisförmige Blende

$$I_P = I_0 \left(\frac{2J_1(\beta)}{\beta} \right)^2 \text{ mit } \beta = kR\rho_P/r_0. \quad (1.193)$$

Eine allgemeinere Formulierung der Bedingung für Fraunhofer-Beugung lautet: Fraunhofer-Beugung wird in der Bildebene eines Objekts beobachtet. In diesem Fall wird die Beugung durch Beugungsobjekte verursacht, die sich zwischen dem Objekt und der Bildebene befinden.

Unter dem *Auflösungsvermögen* eines optischen Instruments versteht man den kleinsten Abstand zweier Objekte, so dass diese noch als zwei Objekte getrennt wahrgenommen werden können. Die Hauptursache für das begrenzte Auflösungsvermögen von optischen Instrumenten sind Beugungseffekte. Das bekannteste Kriterium für das Auflösungsvermögen stammt von Rayleigh und besagt: Zwei Objekte können gerade noch als getrennt wahrgenommen werden, wenn das Hauptmaximum der Intensitätsverteilung, die vom ersten Objekt stammt, mit dem ersten Minimum der Intensitätsverteilung, die vom zweiten Objekt stammt, zusammenfällt. Daraus ergibt sich für den minimalen auflösbaren Winkelabstand $\Delta\varphi_{\min}$ bei einem Teleskop

$$\Delta\varphi_{\min} = 1.22 \frac{\lambda}{D}, \quad (1.194)$$

wobei D der Durchmesser der Frontlinse bezeichnet. Für den kleinsten mit einem Mikroskop noch auflösbaren Abstand Δx_{\min} resultiert

$$\Delta x_{\min} = 0.61 \frac{\lambda}{NA}, \quad (1.195)$$

wobei $NA = n \sin \alpha$ die numerische Apertur bezeichnet. n entspricht dabei dem Brechungsindex des Mediums zwischen dem Objektiv und dem Gegenstand und α dem halben Öffnungswinkel des Objektivs.

Licht entspricht im Allgemeinen einer elektromagnetischen Welle und wird somit durch elektrische und magnetische Feldstärkevektoren, die senkrecht zueinander und zur Ausbreitungsrichtung orientiert sind, beschrieben. Die Schwingungsrichtung des elektrischen Feldstärkevektors bezeichnet man dabei als *Polarisation* des Lichts. Bei der Ausbreitung von Licht im freien Raum gibt es keine ausgezeichnete Richtung, mit der die Richtungen der elektrischen und magnetischen Feldstärkevektoren verglichen werden kann und Licht kann durch eine skalare Wellenfunktion beschrieben werden. Trifft jedoch Licht unter einem bestimmten Winkel auf eine Fläche, dann legt die Fläche eine ausgezeichnete Richtung fest und wir müssen uns um die Richtungen der elektrischen und magnetischen Feldstärkevektoren kümmern.

Natürliche Lichtquellen senden Licht aus, das eine Überlagerung von mehreren elektromagnetischen Wellen mit unterschiedlichen Frequenzen darstellt. Die auftretenden Frequenzen sind dabei je nach Lichtquelle unterschiedlich, d.h. die Intensität des Lichts in Abhängigkeit der Frequenz, das sogenannte *Spektrum*, ist für jede Lichtquelle einzigartig. Somit können durch die Analyse des Spektrums einer Lichtquelle Rückschlüsse auf die Eigenschaften der Lichtquelle gezogen werden. Solche Untersuchungen, insbesondere die Analyse des Spektrums des Wasserstoffatoms, lieferten einen grossen Teil der experimentellen Resultate, auf deren Basis

die Quantenmechanik entwickelt wurde. Das Spektrum einer Lichtquelle kann z.B. mit einem Prisma, einem Gitterspektrometer, einem Michelson-Interferometer oder einem Fabry-Pérot-Interferometer gemessen werden.

- Sind die Abmessungen d der zu untersuchenden Objekte viel kleiner als die Wellenlänge λ des Lichts und die Masse m der Objekte klein, so befinden wir uns im Bereich der **Quantenoptik**. In diesem Fall werden neue Effekte, wie z.B. der Photoeffekt oder der Compton-Effekt beobachtbar, bei deren Erklärung die klassische Beschreibung des Lichts durch Wellen versagt.

Kapitel 2

Der Photoeffekt

In Kapitel 1 haben wir betrachtet wie Welleneigenschaften von Licht in Interferenz- und Beugungsexperimenten zu Tage treten. In diesem Kapitel betrachten wir den Photoeffekt, der im klassischen Wellenbild des Lichts nicht zu erklären ist. Der Photoeffekt zeigt, dass Licht ebenfalls Teilchencharakter aufweist, nämlich, dass die Energie elektromagnetischer Strahlung quantisiert ist.

2.1 Experimentelle Beobachtung des Photoeffekts

Der Photoeffekt wurde erstmals 1839 von Alexandre Edmond Becquerel beobachtet. 1886 führten Heinrich Hertz und sein Assistent Wilhelm Hallwachs dann erste systematische Untersuchungen durch. Philipp Lenard untersuchte dann 1900 als erster quantitativ den Photoeffekt in einer Hochvakuumapparatur.

Wir untersuchen zunächst anhand eines Versuchs, den Hallwachs um 1888 durchführte, den Photoeffekt (siehe Abb. 2.1). Eine Zinkplatte, die zuvor mit einer Spannungsquelle positiv oder negativ aufgeladen wurde, wird mit dem weissen Licht einer Bogenlampe bestrahlt. Das Licht passiert gegebenenfalls vor dem Auftreffen auf die Zinkplatte einen Filter (z.B. Fensterglas oder eine Quarzscheibe). Die Ladung der Zinkplatte wird während des Versuchs mit einem Elektrometer¹ gemessen.

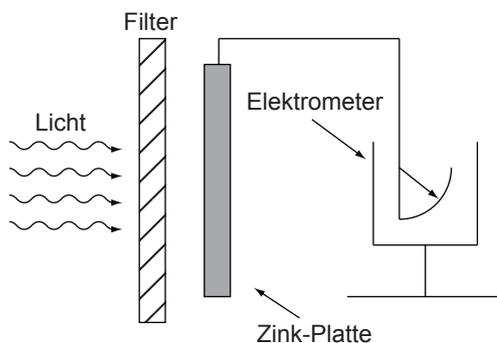


Abb. 2.1: Photoeffektexperiment von Hallwachs um 1888: Eine geladene Zinkplatte wird mit Licht bestrahlt, welches zuvor einen Filter passiert. Ein Elektrometer misst die Ladung der Platte.

¹Ein Elektrometer ist ein Gerät mit dem elektrische Ladungen und Spannungen nachgewiesen und gemessen werden können. Seine Funktionsweise beruht auf der Anziehung und Abstossung elektrischer Ladungen.

Bei diesem Experiment macht man die folgenden **Beobachtungen**:

- a) Bei der Bestrahlung der **positiv geladenen** Zink-Platte mit Licht bleibt die Ladung konstant unabhängig von der Frequenz des Lichts oder des verwendeten Filters.
- b) Bei der Bestrahlung der **negativ geladenen** Zink-Platte mit Licht erfolgt eine Entladung der Platte. Die Rate, mit der sich das Elektrometer entlädt (der Photostrom) nimmt dabei mit der Intensität des Lichts zu. Durch Verwendung einer Glasplatte als Filter kann die Entladung gestoppt werden, da offenbar der für den Photoeffekt relevante Teil, des von der Lichtquelle ausgesandten Spektrums, absorbiert wird. Eine Quarzscheibe als Filter hingegen vermag die Entladung nicht zu verhindern.

Aus den experimentellen Beobachtungen können wir die folgenden **Schlussfolgerungen** ziehen:

- a) Durch die Bestrahlung mit Licht werden negative Ladungsträger (Elektronen) von der Zink-Platte entfernt.
- b) Aus der Beobachtung des Experiments unter Verwendung verschiedenartiger Filter folgt, dass das Austreten von Elektronen von der Wellenlänge des Lichts abhängt. Im Falle einer Zinkplatte ist das ultraviolette Spektrum für den Effekt verantwortlich. Eine Glasplatte absorbiert dieses, während es von Quarz durchgelassen wird.
- c) Bei genügend stark positiv aufgeladener Platte werden weitere Elektronen, aufgrund der starken Coulomb-Wechselwirkung mit den positiven Ladungen der Platte, am Austreten gehindert.

Das Auslösen von Elektronen bei der Bestrahlung der Oberfläche eines Metalls oder eines anderen Festkörpers mit Licht wird *Photoeffekt* genannt.

2.1.1 Messung des Photoeffekts im Vakuum

Der Photoeffekt kann in einer Vakuumapparatur, in der die ausgelösten Elektronen als elektrischer Strom nachgewiesen werden können, quantitativ untersucht werden (siehe Abb. 2.2):

- Das Experiment wird im *Hochvakuum* durchgeführt, damit die ausgetretenen Elektronen sich weitgehend ungehindert durch Stöße mit dem umgebenden Gas möglichst frei bewegen können.
- Anstelle von Zink wird für dieses Experiment häufig ein *Alkalimetall* verwendet, bei dem der Photoeffekt schon bei sichtbarem Licht (also niedrigeren Frequenzen als im ultravioletten) demonstriert werden kann.
- In der Vakuumröhre befindet sich gegenüber des Alkalimetalls, das die Funktion der *Photokathode* einnimmt, eine *Kollektorelektrode* aus einem edleren Metall.

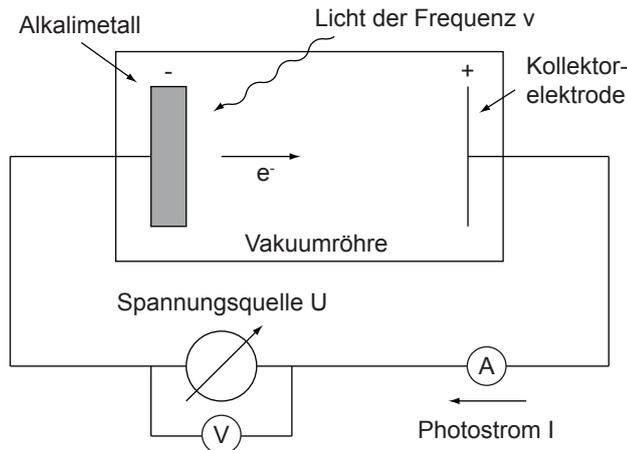


Abb. 2.2: Quantitative Untersuchung des Photoeffekts anhand der Bestrahlung eines Alkalimetalls mit Licht. Auf die verschiedenen Bestandteile der Versuchsanordnung wird im Text eingegangen.

- Das Experiment wird mit *monochromatischem*² Licht durchgeführt. Dieses kann zum Beispiel von einer Quecksilberdampfampe erzeugt werden, deren Licht mit einem Prisma spektral zerlegt wird, sodass die Photokathode nur von dem Licht einer ausgewählten Spektrallinie bei einer festen Frequenz beleuchtet wird.
- Zur Bestimmung der Energie der ausgelösten Elektronen verwendet man die sogenannte *Gegenfeldmethode*. Durch das Bestrahlen des Alkalimetalls mit monochromatischem Licht gelangen Elektronen von der Photokathode zur Kollektorelektrode (Anode). Dabei wird ein Photostrom, der durch die ausgelösten Elektronen transportiert wird, gemessen. Zwischen Photokathode und Anode kann nun eine Gegenspannung (Beschleunigungsspannung) angelegt werden, sodass die Elektronen durch das elektrische Feld der Gegenspannung abgebremst werden und bei genügend hoher Spannung die Kollektorelektrode nicht mehr erreichen.

Bei der Durchführung dieses Experiments werden folgende **Beobachtungen** gemacht:

- Der **Photostrom** I hängt von der angelegten Beschleunigungsspannung U und der Intensität³ P/A des eingestrahelten Lichts ab (siehe Abb. 2.3). Dabei beobachtet man, dass der Strom bei ausreichend grossen positiven Beschleunigungsspannungen sättigt. Er erreicht dabei einen Grenzwert $I = I_S$, der zur Anzahl der ausgelösten Elektronen proportional ist. Bei kleinen (negativen) Gegenspannungen wird zunächst noch ein Strom gemessen, der bei $U = -U_{\max}$ verschwindet, d.h. $I(-U_{\max}) = 0$. Daraus folgt, dass die Elektronen, die das Alkalimetall aufgrund der Bestrahlung verlassen, offenbar eine maximale kinetische Energie von $E_{\text{kin}}^{\max} = (-e) \cdot (-U_{\max})$ besitzen.

²Monochromatisches Licht ist Strahlung mit einer genau definierten Frequenz.

³Wir wählen in diesem Kapitel die Notation P/A (Leistung P pro Fläche A) anstelle von I für die Intensität um eine Verwechslung mit dem Strom I zu vermeiden.

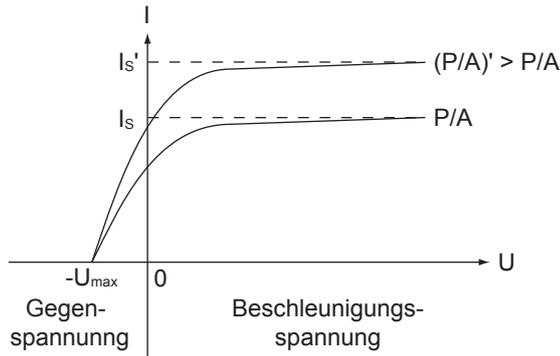


Abb. 2.3: Der Photostrom I in Abhängigkeit der angelegten Spannung U für zwei unterschiedliche Lichtintensitäten P/A . Für hohe Spannungen strebt der Photostrom gegen einen konstanten Wert I_S (Sättigungsstrom). Bei einer Gegenspannung $U = -U_{\max}$ verschwindet der Photostrom.

- b) Der **Sättigungsstrom** I_S nimmt proportional zur Intensität P/A des eingestrahlten Lichts zu, da bei höheren Intensitäten mehr Elektronen pro Zeit und Fläche ausgelöst werden, siehe schematische Darstellung in Abb. 2.4.
- c) Als wichtigste Beobachtung stellt man fest, dass die **maximale kinetische Energie** E_{kin}^{\max} der ausgetretenen Elektronen linear von der Frequenz ν des eingestrahlten Lichts abhängt (siehe Abb. 2.5). Wie bereits in a) diskutiert, ist $-U_{\max}$ ein Mass für die maximale kinetische Energie E_{kin}^{\max} der ausgetretenen Elektronen. Es wird beobachtet, dass U_{\max} unabhängig von der Intensität P/A des eingestrahlten Lichts ist und nur von der Frequenz ν des eingestrahlten Lichts abhängt. Die Proportionalitätskonstante ist materialunabhängig und kann zu $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js bestimmt werden. Sie wird *Plancksches Wirkungsquantum* genannt. Es gibt eine **minimale Frequenz** ν_{\min} unterhalb welcher keine Elektronen ausgelöst werden. ν_{\min} ist abhängig vom bestrahlten Material. Diese Beobachtung kann folgendermassen interpretiert werden: Um die Elektronen aus dem Metall auszulösen muss Arbeit verrichtet werden. Diese wird *Austrittsarbeit* W genannt und hängt vom bestrahlten Material ab. Damit ergibt sich auch der Zusammenhang $W = h \cdot \nu_{\min}$.
- d) Ausserdem beobachtet man, dass die Verteilung der Elektronenenergie unabhängig von der Intensität P/A des eingestrahlten Lichts ist und dass Elektronen nach wenigen Nanosekunden (10^{-9} s), d.h. quasi *instantan*, nach dem Einschalten des Lichts ausgelöst werden, selbst bei sehr kleinen Intensitäten ($P/A \sim 1 \mu\text{W}/\text{m}^2$).

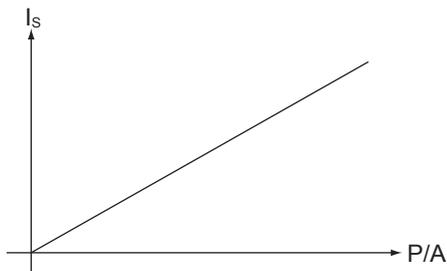


Abb. 2.4: Der Sättigungsstrom I_S zeigt eine lineare Abhängigkeit von der Intensität P/A des eingestrahlten Lichts.

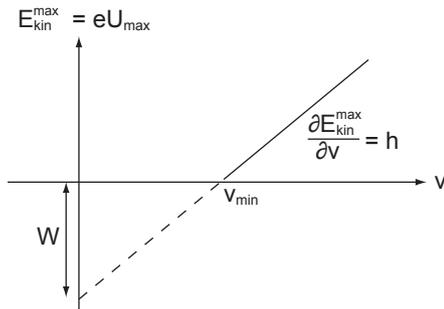


Abb. 2.5: Die maximale kinetische Energie $E_{\text{kin}}^{\text{max}}$ der ausgetretenen Elektronen zeigt eine lineare Abhängigkeit von der Frequenz ν des eingestrahlt Lichts. Die Proportionalitätskonstante ist gegeben durch $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js und die minimale Frequenz ν_{min} , bei der Elektronen ausgelöst werden, ist bestimmt durch die Austrittsarbeit W .

2.2 Erklärung des Photoeffekts

Der Photoeffekt lässt sich mit den Mitteln der klassischen Physik nicht ausreichend schlüssig erklären, wie wir im folgenden mittels einiger einfachen Abschätzungen sehen werden.

2.2.1 Klassische Erwartung

Wir betrachten eine Metalloberfläche ($A = 1 \text{ m}^2$), die mit Licht der Leistung $P = 1 \text{ }\mu\text{W}$ bestrahlt wird (siehe Abb. 2.6). Das Ziel ist es die mittlere Energieaufnahme pro Elektron pro Zeiteinheit an der Metalloberfläche zu bestimmen und daraus die Zeit, die es dauert bis im Mittel alle Elektronen aus der Oberfläche des Metalls ausgelöst sind. Aus dem Experiment (siehe Abschnitt 2.1.1) weiss man, dass diese Auslösung quasi instantan erfolgt und diese Zeit in der Größenordnung von $\sim 10^{-9}$ s liegt.

Die Zahl der Elektronen an einer Metalloberfläche lässt sich wie folgt abschätzen. Der Durchmesser d eines Atoms beträgt $\sim 1 \text{ \AA}$. Unter der Annahme, dass ein Elektron pro Atom, welches die Fläche $d^2 = 1 \text{ \AA}^2$ einnimmt, relevant ist für die Ladungsdichte an der Oberfläche, ergibt sich für die Anzahl der Elektronen N auf der Oberfläche des Metalls

$$N \sim \frac{A}{d^2} = 10^{20}. \quad (2.1)$$

Somit ergibt sich für die mittlere Energieaufnahme pro Elektron und Zeiteinheit an der Metalloberfläche

$$\frac{P}{N} \sim 10^{-26} \text{ W} = 10^{-7} \text{ eV / s}. \quad (2.2)$$

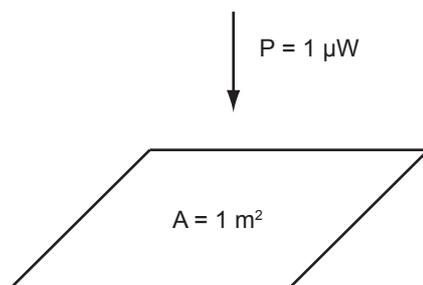


Abb. 2.6: Anordnung zum Versuch einer klassischen Erklärung des Photoeffekts: Eine Metalloberfläche der Fläche $A = 1 \text{ m}^2$ wird mit Licht der Leistung $P = 1 \text{ }\mu\text{W}$ bestrahlt.

Die Austrittsarbeit W eines typischen Metalls ist von der Grössenordnung von 1 eV. Wenn die Energie des einfallenden Lichts gleichmässig auf alle Elektronen an der Oberfläche verteilt würde, würde es $\sim 10^7$ s dauern, bis alle Elektronen im Mittel genügend Energie absorbiert haben, um die Austrittsarbeit zu überwinden. Unter dieser Annahme würde ein Elektron im Mittel in 1 ns nur eine Energie von 10^{-16} eV aufnehmen, viel zu wenig, um die Austrittsarbeit zu überwinden.

Dieses Resultat steht im klaren Widerspruch zu den Beobachtungen aus dem Experiment, dass diese Auslösung quasi instantan erfolgt. Daher wird hier ein neuer Ansatz zur Erklärung des Photoeffekts benötigt, der durch Albert Einstein geliefert wurde, wofür er 1921 den Nobelpreis in Physik erhielt.

2.2.2 Erklärung nach Einstein

Licht der Frequenz ν kann auf ein Elektron die Energie $h\nu$ übertragen, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum ist. Um ein Elektron aus dem Metall zu befreien, muss die Austrittsarbeit W aufgewendet werden. Die kinetische Energie $E_{\text{kin}}^{\text{max}}$ des vom Licht losgelösten Elektrons beträgt maximal

$$E_{\text{kin}}^{\text{max}} = h\nu - W. \quad (2.3)$$

Daraus schloss Einstein, dass Licht der Frequenz ν sich wie ein Teilchen der Energie $h\nu$ verhält. Diese Teilchen nennt man *Lichtquanten* oder *Photonen*. Ein einzelnes Photon kann seine gesamte Energie auf ein einzelnes Elektron übertragen. Beim Austritt aus dem Metall wird das Elektron die Austrittsarbeit W überwinden und die restliche Energie als kinetische Energie $E_{\text{kin}}^{\text{max}}$ aufnehmen

$$h\nu = W + E_{\text{kin}}^{\text{max}}. \quad (2.4)$$

Den Prozess des Auslösens eines einzelnen Elektrons aus einer Metalloberfläche durch Wechselwirkung mit einem einzelnen Photon kann man in einem Energieniveaudiagramm einfach darstellen (siehe Abb. 2.7). Solche Energieniveaudiagramme werden uns im weiteren Verlauf des Buchs häufig begegnen, da sie sehr hilfreich sind zum Verständnis zahlreicher Probleme in der Quantenmechanik.

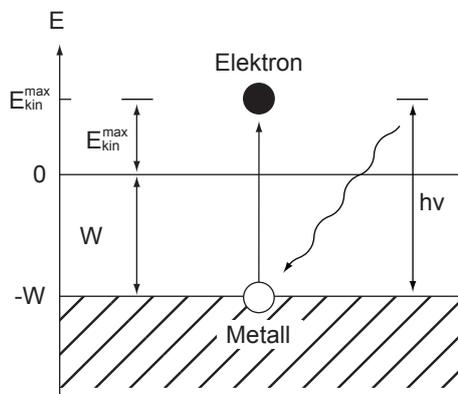


Abb. 2.7: Energieniveaudiagramm: Ein Photon der Energie $h\nu$ trifft auf ein Elektron eines Metalls und gibt seine gesamte Energie an dieses weiter. Dadurch ist es dem Elektron möglich die Austrittsarbeit W zu überwinden und es verlässt das Metall mit einer kinetischen Energie $E_{\text{kin}}^{\text{max}}$.

2.3 Einzelphotonendetektoren

Der Photoeffekt wird heute in vielerlei Art und Weise in technischen Anwendungen zum Einsatz gebracht, wenn kleine Lichtintensitäten, bis hinunter zu einzelnen Photonen, empfindlich nachgewiesen werden sollen, wie zum Beispiel auf dem Charged-Coupled-Device-(CCD)-Mikrochip einer Digitalkamera.

Mit den ersten technisch realisierten Einphotonendetektoren wurde es möglich ein einzelnes von einem Metall ausgelöstes Elektron und damit auch ein einzelnes Photon als elektrischen Impuls zu detektieren. Solche Einphotonendetektoren sind in etwa nach dem in Abb. 2.8 skizzierten Schema aufgebaut.

Der Einphotonendetektor funktioniert wie folgt: (1) **Ein** Photon erzeugt **ein** Elektron mittels Photoeffekt. (2) Das Elektron wird anschliessend mit Hilfe einer elektromagnetischen Linse auf die sogenannten *Dynoden* fokussiert. Eine Dynode ist eine Elektrode aus einer Serie von Einzelelektroden. Über die gesamte Serie der Dynoden ist eine Beschleunigungsspannung angelegt. Zwischen einem Paar von Dynoden fällt somit entsprechend der Anzahl der einzelnen Dynoden eine Teilspannung ab und Elektronen werden von Dynode zu Dynode beschleunigt. Trifft ein Elektron auf die Oberfläche einer Dynode, so werden weitere Elektronen emittiert und der Strom wird verstärkt. Eine Dynode erfüllt sowohl die Eigenschaften einer Kathode als auch einer Anode, da sie Elektronen emittiert und absorbiert. (3) Das erste Elektron wird aufgrund der positiven Spannung U_5 auf eine kinetische Energie von $E_{kin} = eU_5 \gg W$ beschleunigt, wobei W der Austrittsarbeit einer Dynode entspricht. Dadurch werden Sekundärelektronen⁴ ausgelöst. Durch das Aneinanderreihen von mehreren Dynoden unter der Bedingung $U_1 > U_2 > U_3 > U_4 > U_5$ wird die Elektronenzahl auf ein messbares Niveau vervielfacht. (4) Zur Messung werden die Sekundärelektronen durch eine Kollektoranode aufgefangen und ein Strompuls, welcher von **einem** Elektron bzw. Photon ausgelöst wurde, kann detektiert werden. Jeder Strompuls entspricht somit **einem** einzelnen einfallenden Photon.

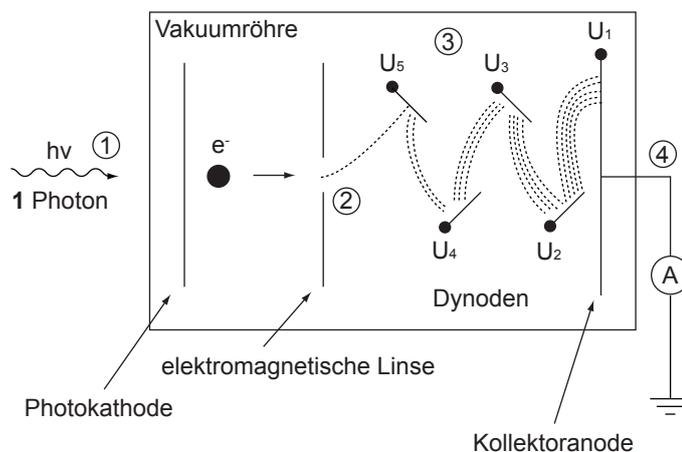


Abb. 2.8: Photonen-Zähler: Detektion einzelner Photonen. Auf die einzelnen Punkte wird im Text eingegangen.

⁴Durch auftreffende primäre Elektronen aus einem Material ausgelöste Elektronen werden Sekundärelektronen genannt.

In der modernen Halbleiterelektronik können einzelne Photonen im Halbleiter frei bewegliche Ladungsträger erzeugen, wenn ihre Energie grösser ist als die Energielücke des Halbleiters. Die so erzeugten Ladungen lassen sich dann elektrisch detektieren. Dabei ist es nicht mehr nötig, die Ladungen aus dem Material ins Vakuum herauszulösen. Für die Weiterentwicklung dieser Technik zum CCD-Detektor, wie er in vielen Digitalkameras eingesetzt wird, wurden Willard Boyle und George Elwood Smith 2009 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.

2.4 Teilchen- und Wellencharakter elektromagnetischer Strahlung

Einerseits haben wir bei der Beobachtung des Photoeffekts erkannt, dass elektromagnetische Strahlung Teilcheneigenschaften besitzt. In geeignet ausgewählten Experimenten zeigt sich, dass die Energie der Strahlung in Form von einzelnen Quanten der Energie $h\nu$, die wir Photonen nennen, quantisiert ist. Andererseits zeigen Beugungs- und Interferenzexperimente (siehe Kapitel 1), dass Licht sich ebenfalls in geeigneten Experimenten wie eine Welle verhält. Dies könnte auf den ersten Blick widersprüchlich erscheinen. Jedoch handelt es sich hier um eine grundlegende Eigenschaft von Licht, die zuerst im Rahmen der Entwicklung der Quantenmechanik erkannt wurde, d.h. Licht hat sowohl Wellen- als auch Teilchencharakter. Was wir genau unter dieser Doppelnatur verstehen, erläutern wir in diesem Abschnitt anhand eines Experiments genauer.

2.4.1 Interferenz einzelner Photonen am Doppelspalt

Wir betrachten ein Experiment, das sowohl die Wellen- als auch die Teilcheneigenschaften des Lichts, in einem einzigen Experiment zu Tage treten lässt (siehe Abb. 2.9).

Als Lichtquelle dient ein Laser, der Licht der Wellenlänge $\lambda \sim 500$ nm bei einer Leistung von $P = 5$ mW erzeugt. Dies entspricht ungefähr einer Anzahl

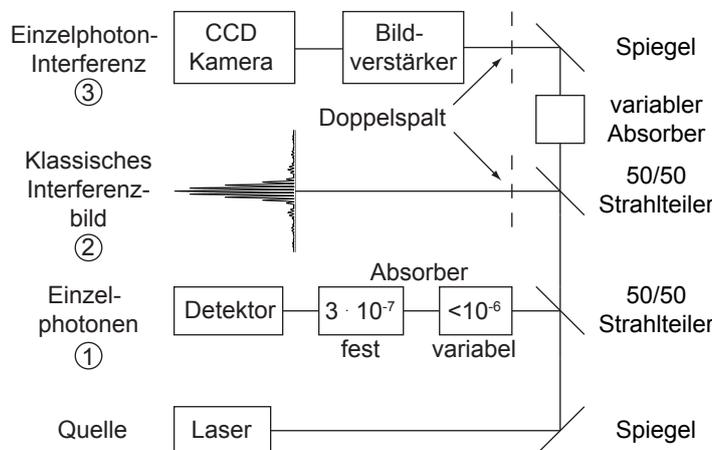


Abb. 2.9: Versuchsaufbau zum Experiment Beobachtung von Wellen- und Teilchencharakter von Licht bei der Beugung am Doppelspalt. Auf die einzelnen Teile der Versuchsanordnung wird im Text eingegangen.

von $n = 1.2 \cdot 10^{16}$ Photonen, die pro Sekunde vom Laser emittiert werden. Der ausgesandte Lichtstrahl wird mit Spiegeln und Strahlteilern auf verschiedene Messapparaturen in den drei Armen des Aufbaus aufgeteilt, auf die wir nun genauer eingehen werden.

Mit der ersten Apparatur wird der **Teilchencharakter** des Lichts nachgewiesen. Dazu wird mittels Absorber die Lichtintensität so stark reduziert, dass nur noch alle paar Sekunden ein Photon aus dem Absorber austritt. Die Detektion einzelner Photonen erfolgt dann mit einem Photonenzähler, den wir in Abschnitt 2.3 kennengelernt haben.

In der zweiten Apparatur erfolgt, ohne Reduktion der Intensität des vom Laser ausgesandten Lichts, die bekannte Beugung von Licht am Doppelspalt, analog zum Abschnitt 1.2.2, bei der man das bekannte Interferenzmuster beobachtet, welches die **Welleneigenschaften** von Licht sichtbar macht.

In der dritten Apparatur wird der Laserstrahl wieder soweit abgeschwächt, dass nur wenige Photonen pro Zeiteinheit im Strahl vorliegen. Diese Photonen passieren dann einen Doppelspalt. Ein Einzelphotonendetektor weist die einzelnen durch den Doppelspalt getretenen Photonen orts aufgelöst in der Bildebene nach. Dies ist zum Beispiel möglich durch Verwendung eines Bildverstärkers⁵ kombiniert mit einer CCD-Kamera⁶, die die einzelnen Photonen in der Bildebene registriert.

In diesem Experiment beobachten wir, wie einzelne Photonen in der Bildebene scheinbar an zufälligen Orten eines nach dem anderen detektiert werden. Sammeln wir mehr und mehr Photonen mit dem Detektor auf, so beobachten wir, dass sich langsam das bekannte Interferenzmuster des Doppelspalts ergibt. Die Anzahl der Photonen, die an einer bestimmten Stelle auf dem Schirm auftreffen, scheint durch das Quadrat der Amplitude der interferierenden elektromagnetischen Welle, die durch den Doppelspalt tritt, gegeben zu sein.

Die Wellen- und Teilcheneigenschaften elektromagnetischer Strahlung lassen sich somit wie folgt in Einklang bringen: *Die in der klassischen Theorie der elektromagnetischen Wellen als Intensität gegebene Grösse (proportional zum Quadrat der Amplitude des Feldes) ist proportional zur Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon an dem betrachteten Ort des Raumes detektiert werden kann.* Diese Beobachtung wird sich im weiteren Verlauf des Buchs als wichtiges Element der Quantentheorie herausstellen.

Wir untersuchen nun als nächstes wie diese Interpretation am Beispiel der Beugung am Spalt (siehe Abschnitt 1.2.2) konkret zu verstehen ist.

2.4.2 Statistische Interpretation

Die Beugungsintensität hinter einem Spalt ist nach der oben ausgeführten Interpretation als Statistik zu verstehen. D.h. die Beugungsintensität ist ein Mass für die Häufigkeit, mit welcher Photonen unter dem betreffenden Beugungswinkel α beobachtet werden (siehe Abb. 2.10).

⁵Ein Bildverstärker verstärkt geringe Lichtmengen, sodass sie mit dem Auge oder mit elektronischen Bildaufnehmern (in unserem Fall mit einer CCD-Kamera) registriert werden können.

⁶Eine CCD-Kamera ist im wesentlichen eine Anordnung von einzelnen Photonenzählern in einem Gitter.

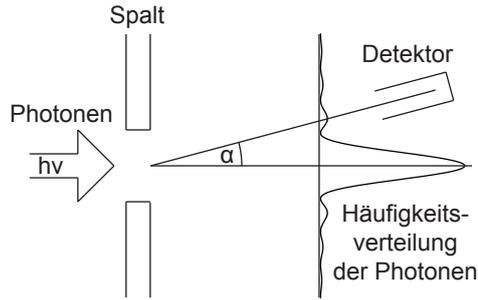


Abb. 2.10: Die Doppelnatur des Lichts am Beispiel der Beugung am Spalt: Photonen treffen auf einen Spalt und dahinter mittels Detektor registriert. Die Häufigkeitsverteilung hinter dem Spalt ist gegeben durch die nach dem Wellenbild berechnete Intensitätsverteilung.

Wir bemerken dabei, dass der Detektor in jeder Winkeleinstellung einzelne Photonen detektiert. Es werden niemals Bruchteile von Photonen detektiert. Ein Photon wird also nicht aufgeteilt und ist auch nicht über den Beugungsbereich verteilt, wenn es detektiert wird.

Ein weiterer wichtiger Punkt ist, dass die Intensitätsverteilung hinter dem Spalt nicht von einer Interferenz zwischen verschiedenen Photonen herrührt. Auch wenn sich zu jedem Zeitpunkt des Experiments nur ein einzelnes Photon in der Apparatur befindet, werden dieselben Interferenzphänomene beobachtet.

In anderen Worten: Mit elektromagnetischer Strahlung kann man Beugungsversuche machen, bei denen die Intensität so klein ist, dass sich aufs Mal nur ein einziges Photon in der Apparatur aufhält. Auch in diesem Fall ist die Häufigkeitsverteilung der detektierten Photonen gegeben durch die aufgrund des Wellenbildes berechnete. Mit diesen Überlegungen sind wir zu einer statistischen Interpretation der Intensität gelangt.

Beugung von Mikrowellen am Spalt

Wir betrachten die Beugung von Mikrowellen, d.h. die Beugung von Licht der Wellenlänge $\lambda = 3 \text{ cm}$ (Frequenz $\nu = 10^{10} \text{ 1/s}$), an einem Spalt der Breite $d \sim 6 \text{ cm}$. Die auf den Spalt einfallende Strahlungsleistung P sei von der Grössenordnung 10^{-3} W . Für die Energie E eines Mikrowellenphotons ergibt sich

$$E = h\nu = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 10^{10} \text{ 1/s} = 6.63 \cdot 10^{-24} \text{ J.} \quad (2.5)$$

Pro Sekunde fällt somit die folgende Anzahl Photonen n auf den Spalt

$$n = \frac{P}{E} \sim 10^{20}, \quad (2.6)$$

d.h. eine relativ grosse Anzahl. Somit bekommt man bei der Beugung von Mikrowellen am Spalt bereits für eine kurz andauernde Messung eine grosse Zahl von detektierten Photonen und die Quantennatur der Strahlung ist nicht einfach nachzuweisen, da die detektierten Photonen nicht mehr zeitlich aufgelöst werden können.

Beugung von Röntgen-Strahlen am Spalt

Als zweites Beispiel betrachten wir die Beugung von Röntgen-Strahlen, d.h. die Beugung von Licht der Wellenlänge $\lambda = 3 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ (Frequenz $\nu = 10^{18} \text{ 1/s}$),

an einem Spalt der Breite $d \sim 10^{-4}$ cm. Die auf den Spalt einfallende Strahlungsleistung P ist von der Grössenordnung 10^{-11} W. Für die Energie E eines Röntgen-Photons ergibt sich

$$E = h\nu = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 10^{18} \text{ 1/s} = 6.63 \cdot 10^{-16} \text{ J.} \quad (2.7)$$

Pro Sekunde fällt somit die folgende Anzahl Photonen n auf den Spalt

$$n = \frac{P}{E} \sim 10^6. \quad (2.8)$$

Auf den ersten Blick erkennt man, dass man bedeutend länger messen muss als beim Mikrowellenexperiment, um bei der Ausmessung der Winkelverteilung hinter dem Spalt eine gute Statistik zu erhalten.

Zum Abschluss gehen wir noch der Frage nach, wie viele Photonen sich gleichzeitig in der Apparatur aufhalten. Wir nehmen dazu an, dass die Wegstrecke l , die die Photonen zu durchlaufen haben, 10 cm beträgt. Daraus ergibt sich für die Zeit t , die sich ein Photon in der Apparatur aufhält

$$t = \frac{l}{c} = \frac{10}{3 \cdot 10^{10} \text{ s}} = 3.33 \cdot 10^{-10} \text{ s.} \quad (2.9)$$

Da pro Sekunde nur $n = 10^6$ Photonen eintreffen, ist es daher sehr unwahrscheinlich, dass sich zur selben Zeit mehr als ein Photon in der Apparatur befindet.

2.5 Zusammenfassung

Bei der Bestrahlung einer Metallplatte mit Licht werden Elektronen ausgelöst. Dieser Effekt wird Photoeffekt genannt und war ein erster Hinweis auf die Quantisierung des Lichts, d.h. dass Licht Teilchencharakter zeigt. Das klassische Wellenmodell versagt bei der Erklärung und es benötigt ein neues Modell. Hier nochmals die wichtigsten Resultate zur Interpretation des Photoeffekts durch Einstein:

- Licht der Frequenz ν besteht aus Teilchen mit der Energie $h\nu$.
- Diese Teilchen nennt man *Lichtquanten* oder *Photonen*.
- Ein einzelnes Photon kann seine gesamte Energie auf ein einzelnes Elektron übertragen.
- Beim Austritt aus dem Metall überwindet das Elektron die Austrittsarbeit W und nimmt die restliche Energie als kinetische Energie $E_{\text{kin}}^{\text{max}}$ auf

$$h\nu = W + E_{\text{kin}}^{\text{max}}. \quad (2.10)$$

Eine weitere Erkenntnis ist, dass Licht sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften besitzt. Welche Eigenschaft in Erscheinung tritt, hängt vom durchgeführten Experiment ab.

Kapitel 3

Inverser Photoeffekt

In Kapitel 2 haben wir den Photoeffekt kennengelernt. Der Effekt beschreibt die Tatsache, dass durch die Bestrahlung einer Metalloberfläche mit Licht, Elektronen aus einem Metall gelöst werden können. Dabei kann ein Lichtquant (Photon) seine gesamte Energie $h\nu$ auf ein einzelnes Elektron übertragen.

Dazu existiert ein inverser Effekt: Bei der Abbremsung von Elektronen an einer Metalloberfläche wird elektromagnetische Strahlung emittiert. Auf diesen *inversen Photoeffekt* der durch *Bremsstrahlung* hervorgerufen wird, gehen wir in diesem Kapitel ein. Zuerst betrachten wir die Erzeugung von Bremsstrahlung klassisch. Anschliessend wenden wir uns der Erzeugung und Charakterisierung von Röntgen-Strahlung zu. Aufbauend auf der Messung des Röntgen-Spektrums erfolgt eine quantenmechanische Interpretation der Bremsstrahlung.

3.1 Klassische Beschreibung der Bremsstrahlung

Wir untersuchen als erstes die Bremsstrahlung, d.h. die Emission von elektromagnetischer Strahlung beim Abbremsen von Elektronen an einer Metalloberfläche, an einem einfachen klassischen Modell (siehe Abb. 3.1): Eine negativ geladene Ladung $-q$ (z.B. ein Elektron) bewegt sich auf eine positive Ladung $+q$ zu und erfahre dabei eine negative Beschleunigung (Bremsung), deren Ursache wir zunächst nicht weiter diskutieren wollen. Diese Ladungskonfiguration lässt sich als *Hertzscher Dipol* beschreiben. Wir nehmen an, dass sich die negative Ladung $-q$ längs der z -Achse bewegt und die positive Ladung $+q$ im Ursprung fixiert ist. Das entsprechende Dipolmoment ist dann längs der z -Achse gerichtet und beträgt $p = qz$, wenn z der Ort der Ladung $-q$ bezeichnet.

Die vom Dipol unter dem Winkel ϑ bezogen auf die Dipolachse z abgestrahlte Intensität I im Abstand r vom Dipol ist gegeben durch den Betrag des entsprechenden Poyntingvektors $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ (auf eine Herleitung wird hier verzichtet und auf weiterführende Literatur [2] verwiesen)

$$I(r, \vartheta, t) = \left| \vec{S}(r, \vartheta, t) \right| = \frac{\mu_0}{c} \left(\frac{\ddot{p}(t - r/c)}{4\pi r} \right)^2 \sin^2 \vartheta. \quad (3.1)$$

Wegen der endlichen Fortpflanzungsgeschwindigkeit c der elektromagnetischen Wellen ist \ddot{p} zur (retardierten) Zeit $t - r/c$ zu nehmen, damit man S bzw. I

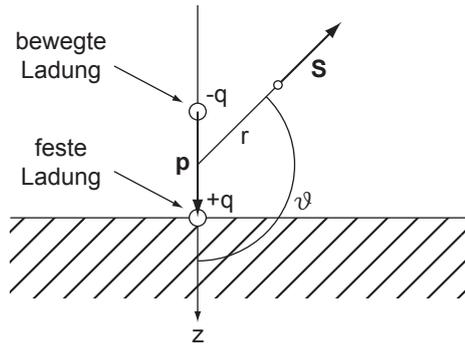


Abb. 3.1: Der Hertz'sche Dipol als klassisches Modell für die Bremsstrahlung: Eine negative Ladung $-q$ bewegt sich auf eine positive Ladung $+q$ zu und wird dabei abgebremst. Dadurch sendet der Dipol \vec{p} elektromagnetische Strahlung aus.

zur Zeit t erhält. Aus (3.1) wird klar, dass ein elektrischer Dipol strahlt, wenn die zweite Ableitung des Dipolmoments nach der Zeit \ddot{p} nicht verschwindet. Aus $p = qz$ folgt $\ddot{p} = q\ddot{z}$. Damit also $\ddot{p} \neq 0$ ist, muss gelten $\ddot{z} \neq 0$, was in unserem Modell erfüllt ist, da unsere negative Ladung $-q$ eine negative Beschleunigung erfährt. Grosse Werte von \ddot{z} und damit eine hohe Strahlungsintensität werden erreicht, wenn sehr schnelle Elektronen beim Auftreffen auf Materie abgebremst werden. Da der Bremsvorgang die Ursache für die elektromagnetische Strahlung ist, wird diese Strahlung *Bremsstrahlung* genannt.

Der Bremsvorgang wird im Allgemeinen sehr kompliziert sein. Das Elektron kann viele Zusammenstöße erleiden, bis es seinen Platz im Metall gefunden hat, sei es in einem Atom oder im Elektronengas. Als Extremfall könnte man sich klassisch folgenden Einzelprozess vorstellen, bei dem das Elektron seine ganze kinetische Energie in Strahlung umwandelt (siehe Abb. 3.2): Das einfallende Elektron dringt in die Elektronenwolke eines (neutralen) Atoms ein und wird durch das im Innern herrschende elektrische Feld umgelenkt. Wegen der Beschleunigung bzw. Verzögerung, die es dabei erfährt, strahlt es eine elektromagnetische Welle ab und verliert dadurch kinetische Energie. Im Grenzfall könnte es am Rande des Atoms zum Stillstand kommen.

Wir führen hier die aufwendige Rechnung nicht durch, sondern nur eine qualitative Betrachtung über die Form des Frequenzspektrums der emittierten Strahlung geben. Wir betrachten einfachheitshalber den Bremsvorgang des Elektrons in einer Dimension. In Abb. 3.3 ist diese Bewegung in einem Geschwindigkeits-Weg- und in einem Beschleunigungs-Weg-Diagramm dargestellt: Das Elektron befindet sich zuerst in einem freien Flug und wird anschliessend in einem Atom oder im Elektronengas eines Metalls gebremst. Die Stärke des elektrischen und

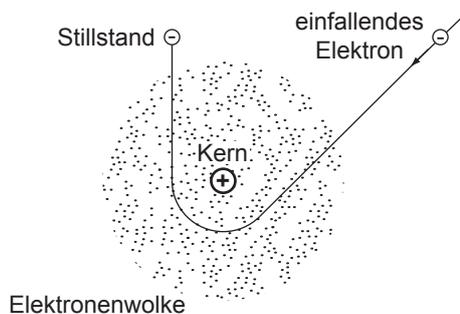


Abb. 3.2: Schematische Darstellung des Bremsvorgangs: Ein Elektron dringt in die Elektronenwolke eines Atoms ein und wird dabei abgebremst.

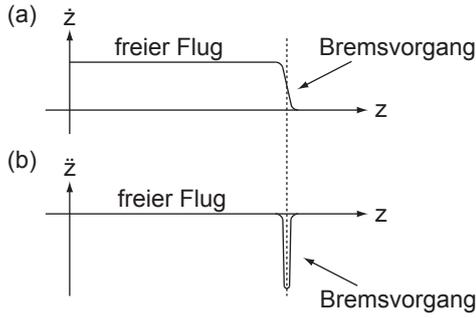


Abb. 3.3: (a) Darstellung des Bremsvorgangs in einem Geschwindigkeits-Weg-Diagramm und (b) in einem Beschleunigungs-Weg-Diagramm.

magnetischen Feldes in der Wellenzone ist proportional zu $\ddot{z}(t - r/c)$. Das Frequenzspektrum ergibt sich dann durch Fourier-Transformation von $\ddot{z}(t - r/c)$. Das Spektrum wird kontinuierlich sein und sich zumindest bei klassischer Betrachtung von $\nu = 0$ bis zu beliebig hohen Frequenzen erstrecken. Die Verschiebung r/c beeinflusst das Spektrum nicht, so dass wir $\ddot{z}(t)$ fourier-transformieren können.

Um eine Idee zu gewinnen, wie das Spektrum etwa aussehen könnte, nehmen wir an, dass der zeitliche Verlauf $-\ddot{z}(t)$ des Bremsvorgangs durch eine Glockenkurve der Breite 2τ gegeben ist. Die maximale negative Beschleunigung a_0 wird bei $t = 0$ gesetzt. Die Glockenkurve ist gegeben durch (siehe Abb. 3.4)

$$-\ddot{z}(t) = a_0 e^{-(t/2\tau)^2}. \tag{3.2}$$

Die Fourier-Transformierte ist dann wieder eine Glockenkurve

$$A(\nu) = A_0 e^{-(\nu\tau/2)^2}. \tag{3.3}$$

Wesentlich ist hier, dass sich das Spektrum bis zu beliebig hohen Frequenzen erstreckt und das Amplitudenmaximum bei $\nu = 0$ liegt. Da \ddot{z} symmetrisch angenommen wurde, muss man positive und negative Frequenzen im Spektrum nicht unterscheiden, d.h. es genügt, die rechte Hälfte des Spektrums zu betrachten.

An diesem sehr vereinfachten klassischen Modell ist noch eine wesentliche Korrektur anzubringen: Beim Bremsprozess dringen die Elektronen eine sehr

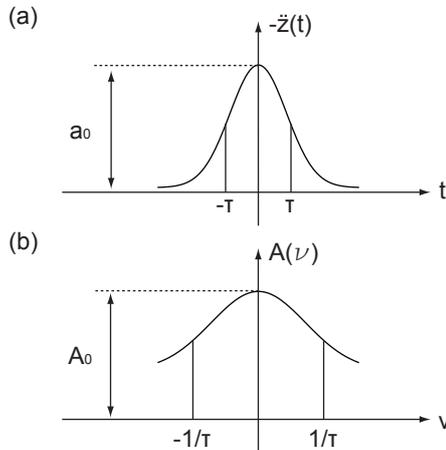


Abb. 3.4: (a) Glockenkurve als Modell für den Bremsvorgang. (b) Frequenzspektrum der Bremsstrahlung (Fourier-Transformierte).

kleine Strecke in das Metall ein, so dass ein Teil der emittierten Bremsstrahlung in diesem absorbiert wird. Die niederfrequente Strahlung wird dabei viel stärker absorbiert als die hochfrequente Strahlung. Dieser Effekt bewirkt eine bedeutende Veränderung der Form des klassisch erwarteten Spektrums auf der niederfrequenten Seite (siehe Abb. 3.5).

3.2 Röntgen-Strahlung

Beschleunigt man Elektronen auf Energien von einigen 10 keV, so kann der inverse photoelektrische Effekt benutzt werden, um kurzwellige elektromagnetische Strahlung kontrolliert zu erzeugen. Diese Strahlung wird nach ihrem Entdecker Wilhelm Röntgen¹ auch Röntgen-Strahlung genannt. Solche Strahlung durchdringt Materie und findet daher auch Anwendung in der Medizin bei der Abbildung von Knochen oder inneren Organen, sowie in der Festkörperphysik bei der Untersuchung von Materialeigenschaften. Dabei wird im ersten Fall typischerweise die Absorption der Röntgen-Strahlung gemessen, wohingegen im zweiten Fall Interferenzphänomene benutzt werden, um Kristallstrukturen akkurat zu bestimmen.

3.2.1 Funktionsweise einer Röntgen-Röhre

Eine Röntgen-Röhre (siehe Abb. 3.6) besteht aus einem in einem Vakuumbehälter installierten thermischen Elektronenemitter dessen Elektronen auf hohe Energien beschleunigt werden und dann auf eine Anode treffen. Wir gehen nun auf einige wichtige Aspekte bei der Erzeugung von Röntgen-Strahlung ein.

(1) In einem ersten Schritt werden freie Elektronen mittels des thermoelektrischen Effekts (siehe Abschnitt 3.3) erzeugt. Dazu wird ein Filament elektrisch erhitzt indem es an eine Stromquelle angeschlossen wird. Erreicht das Filament eine ausreichend hohe Temperatur, so können einzelne Elektronen die Austrittsarbeit überwinden und das Filament verlassen. (2) Anschliessend werden die Elektronen stark beschleunigt indem sie einen Feldgradienten durchlaufen, der durch eine Spannung der Grössenordnung $U = 1 - 100$ kV erzeugt wird, die zwischen einer Gitterelektrode und einer Kollektorelektrode angelegt ist. Die so

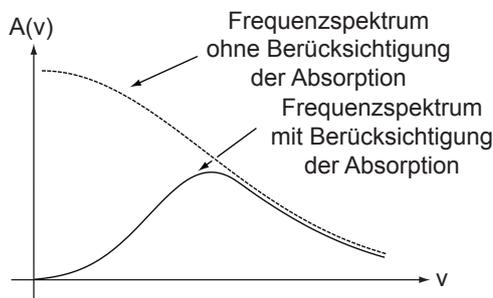


Abb. 3.5: Klassisches Frequenzspektrum der Bremsstrahlung mit und ohne Berücksichtigung der Absorption im Metall.

¹Wilhelm Röntgen studierte an der ETH Zürich Maschinenbau. 1901 wurde ihm für die Entdeckung der Röntgen-Strahlung der erste Nobelpreis in Physik verliehen.

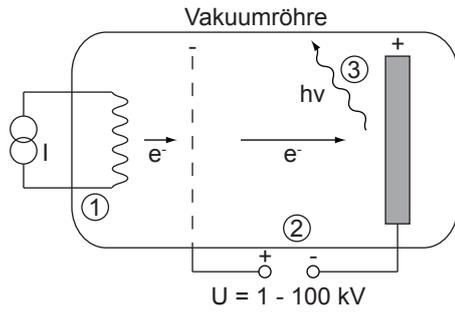


Abb. 3.6: Der schematische Aufbau einer Röntgen-Röhre. Auf die einzelnen Bestandteile wird im Text eingegangen.

beschleunigten Elektronen treffen auf die Anode und werden darin durch Vielfachstreuung an Elektronen und Kernen abgebremst. (3) Dabei wird Bremsstrahlung mit einem kontinuierlichen Spektrum erzeugt. Bei den betrachteten Beschleunigungsspannungen erhält man Röntgen-Strahlung bei Wellenlängen zwischen 10^{-8} und 10^{-12} m.

3.3 Der thermoelektrische Effekt

In der Röntgen-Röhre wird der *thermoelektrische Effekt* eingesetzt um freie Elektronen zu erzeugen. Dieser Prozess löst, ähnlich dem Photoeffekt, Elektronen aus einem Metall aus. Beim thermoelektrischen Effekt wird die nötige Energie durch thermische Anregung anstatt durch Bestrahlung mit elektromagnetischer Strahlung bereitgestellt. Dieser Effekt wird z.B. auch in analogen Oszilloskopen, in den früher üblichen Röhrenfernsehern und in Elektronenmikroskopen zum Einsatz gebracht.

Die thermische Anregung der Elektronen erfolgt folgendermassen: Durch das Metall fliesst ein Strom. Infolgedessen führt der elektrische Widerstand zum Aufheizen des Metalls und der in ihm befindlichen Elektronen bis ein thermisches Gleichgewicht eintritt. Für die Elektronen bei den höchsten Energien wird es dann möglich die Austrittsarbeit W zu überwinden und das Metall zu verlassen.

Zur Veranschaulichung betrachten wir den Effekt in einem Energiediagramm (siehe Abb. 3.7). Wir führen dazu die *Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion* $P_{\text{FD}}(E)$ ein, die die Wahrscheinlichkeit angibt mit der ein Elektron eine Energie E bei gegebener Temperatur T (im thermischen Gleichgewicht) hat

$$P_{\text{FD}}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_{\text{F}})/(k_{\text{B}}T)} + 1}, \quad (3.4)$$

wobei E_{F} die *Fermi-Energie* ist. Die Bedeutung der Fermi-Energie wird klar, wenn wir den Fall $T = 0$ K betrachten. Bei $T = 0$ K nimmt die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion die Form einer Stufenfunktion ein, d.h.

$$P_{\text{FD}}(E) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } E > E_{\text{F}}, \\ 1, & \text{wenn } E < E_{\text{F}}. \end{cases} \quad (3.5)$$

Mit anderen Worten: Bei $T = 0$ K sind alle Zustände im Metall bis zur Energie E_{F} besetzt, alle Zustände höherer Energie unbesetzt. Bei Metallen entspricht E_{F} ungefähr der Austrittsarbeit und ist von der Grössenordnung 2 - 5 eV.

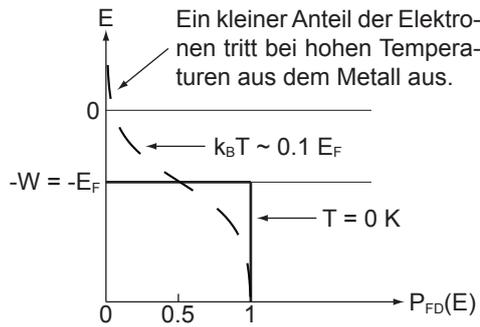


Abb. 3.7: Der thermoelektrische Effekt dargestellt im Energiediagramm: Bei $T = 0 \text{ K}$ nimmt die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion eine Stufenform an, für höhere Temperaturen verformt sich die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion und bei $T \sim 2000 - 10^4 \text{ K}$ wird es für Elektronen möglich das Metall zu verlassen.

Wird jedoch die Temperatur erhöht, so verformt sich die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion und es wird für die Elektronen durch thermische Anregung möglich, Zustände oberhalb des Fermi-Niveaus einzunehmen. Wird nun die Temperatur so stark erhöht, dass $k_B T \sim 0.1 E_F$, d.h. $T \sim 2000 - 10^4 \text{ K}$, so ist es für die Elektronen möglich das Metall zu verlassen.

3.4 Beugung von Röntgen-Strahlung

In diesem Abschnitt untersuchen wir das Spektrum einer Röntgen-Röhre, deren Funktionsweise wir bereits kennengelernt haben (siehe Abschnitt 3.2), anhand verschiedener Messmethoden.

3.4.1 Wellenlängenmessungen mit künstlichen Gittern

Im sichtbaren Bereich elektromagnetischer Strahlung, d.h. für Wellenlängen λ zwischen 380 und 780 nm, verwendet man zur Wellenlängenmessung z.B. künstlich hergestellte Beugungsgitter mit einer bekannten Gitterkonstante a von der Größenordnung der Wellenlänge λ . Für kurzwellige Strahlung, wie z.B. Röntgen-Strahlung, ist diese Methode allerdings schwierig zu realisieren.

Röntgen-Strahlung hat eine Wellenlänge λ von etwa 1 \AA . Diese entstehen bei Beschleunigungsspannungen U zwischen 20 und 50 kV. Technisch lassen sich bei künstlichen Beugungsgittern minimale Spaltabstände von der Größenordnung von $a \sim 10'000 \text{ \AA}$ realisieren. Wir betrachten nun die Bedingung für die Beugungswinkel der Maxima unter diesen Aspekten (siehe Abb. 3.8):

$$\sin \alpha_{\max} = n \frac{\lambda}{a}. \quad (3.6)$$

Aufgrund der vorangegangenen Betrachtungen gilt für die Röntgen-Strahlung: $\lambda \ll a$, was zur Folge hat, dass bei kleinen Ordnungszahlen n die Spektren auf einen sehr kleinen Winkelbereich zusammengedrängt wären und bei grossen Ordnungszahlen bzw. Beugungswinkeln sind die Beugungsmaxima so schwach, dass man sie nicht mehr messen kann. Es wird klar, dass wir uns für die Wellenlängenbestimmung bei der Röntgen-Strahlung einer anderen Methode bedienen müssen.

Eine Möglichkeit ist Interferenz bei *streifendem Einfall* zu betrachten, d.h. wenn die Strahlung unter kleinem Winkel zur Oberfläche des Gitters einfällt

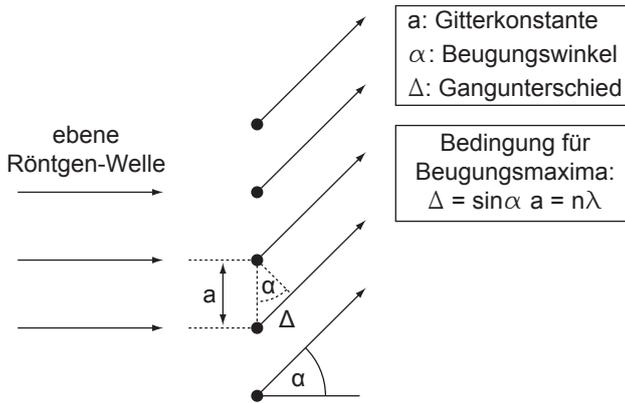


Abb. 3.8: Beugung von Röntgen-Strahlung am künstlichen Gitter mit Gitterkonstante a .

(siehe Abb. 3.9). Mit Hilfe eines Reflexionsgitters lässt sich damit Strahlung spektral zerlegen, auch dann, wenn die Gitterkonstante a gross ist im Vergleich zur Wellenlänge λ . Ein Beugungsmaximum tritt auf, wenn die Wegdifferenz zwischen zwei an benachbarten Kämmen reflektierten Strahlen ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist

$$n\lambda = a - a \cos \alpha = a (1 - \cos \alpha) = 2a \sin^2(\alpha/2). \tag{3.7}$$

Daraus ergibt sich die folgende Bedingung für die Beugungsmaxima bei streifendem Einfall

$$\sin(\alpha_{\max}/2) = \sqrt{\frac{n\lambda}{2a}}. \tag{3.8}$$

Im Gegensatz zum Fall eines Gitters bei normalem Einfall der Strahlung ist der Beugungswinkel im wesentlichen proportional zu $\sqrt{\lambda/a}$ statt zu λ/a . Bei streifendem Einfall kann man deshalb auch noch bei sehr kleinen Verhältnissen λ/a spektrale Zerlegung vornehmen. Mit geeigneten optischen Reflexionsgittern ($a = 5 \mu\text{m}$) ist es daher möglich, Röntgen-Strahlen im Wellenlängenbereich von einigen Å aufzunehmen. Tatsächlich ist die Wellenlängenskala der Röntgen-Spektren auf diese Weise an diejenige der optischen Spektren angeschlossen worden.

3.4.2 Bragg-Reflexion

Anstelle von künstlich hergestellten Gittern kann man aber auch natürlich vorkommende periodische Strukturen, wie z.B. *Kristallgitter* verwenden. Bei natür-

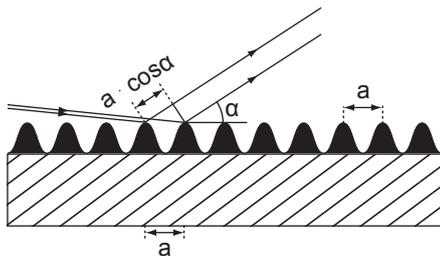


Abb. 3.9: Trick des streifenden Einfalls: Spektrale Zerlegung von Strahlung mit Hilfe eines Reflexionsgitters.

lichen Kristallgittern sind typische Gitterkonstanten von der Grössenordnung von einigen Å, welche im Wellenlängenbereich der Röntgen-Strahlung liegen. Diese eignen sich daher bestens für die Beugung und damit Wellenlängenmessung von Röntgen-Strahlung. Allerdings handelt es sich hier nicht um zweidimensionale Strichgitter, sondern um sogenannte *Raumgitter*. Wir werden hier nur eine vereinfachte Theorie der Raumgitterinterferenz diskutieren und verweisen für weitere Ausführungen auf die Festkörperphysik.

Als Beispiel betrachten wir die Beugung von Röntgen-Strahlung an einem *einfachen kubischen Gitter* mit der Gitterkonstante a längs der kubischen Achsen (siehe Abb. 3.10). Vereinfachend nehmen wir dazu an, dass die Gitterpunkte mit gleichen Atomen besetzt sein sollen².

In dieses Gitter soll eine ebene elektromagnetische Welle eindringen, wobei die Einfallrichtung in der xy -Ebene liegt. Der Einfallswinkel wird mit ϑ bezeichnet. Unter dem Einfluss des Feldes der einfallenden Welle werden die Elektronen der Atome zu erzwungenen Schwingungen angeregt, die eine feste Phasenbeziehung mit der einfallenden Welle haben. Sie werden damit zu kohärenten Sekundärstrahlern. Man spricht in diesem Fall von *kohärenter Streuung*³.

Wir analysieren nun unter welchen Bedingungen, insbesondere unter welchen Winkeln, konstruktive Interferenz zwischen den von den einzelnen Atomen kohärent gestreuten Wellen auftritt. Ein Interferenzmaximum in der gestreuten Intensität kommt in der skizzierten Situation zustande, wenn die folgenden zwei sogenannten *Bragg-Bedingungen*⁴ (siehe Abb. 3.10) gleichzeitig erfüllt sind:

1. Die Sekundärwellen der Atome auf jeder Netzebene⁵ parallel zur x -Achse

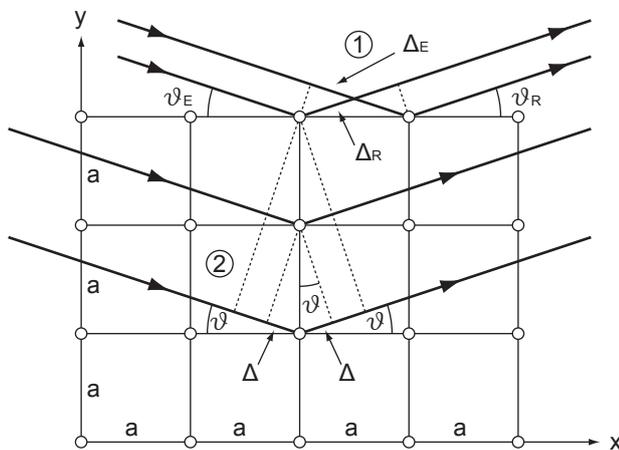


Abb. 3.10: Bragg-Reflexion am einfach kubischen Kristall. Auf die Bezeichnungen wird im Text eingegangen.

²Eine solche Kristallstruktur kommt in der Natur für ein einzelnes chemisches Element nicht vor, ist aber zum Beispiel bei NaCl (Kochsalz) realisiert, bei dem jeder Gitterplatz abwechselnd durch ein Na oder ein Cl Atom besetzt ist.

³Bei kohärenter Streuung ändert sich weder die Energie noch die Phase der gestreuten Welle. Kohärenz ist die Voraussetzung für Interferenzerscheinungen.

⁴Den Namensgebern William Henry Bragg und William Lawrence Bragg wurde 1915 für ihre Verdienste um die Erforschung der Kristallstrukturen mittels Röntgenstrahlen der Nobelpreis in Physik verliehen.

⁵Als Netzebene bezeichnet man eine Ebene, die durch Punkte (Atome) eines Kristallgitters aufgespannt wird.

müssen konstruktiv interferieren. Für beliebige Einfallswinkel ϑ_E ist dies erfüllt, wenn für die Gangunterschiede der einfallenden Welle Δ_E und der reflektierten Welle Δ_R gilt

$$\Delta_E = a \cos \vartheta_E = \Delta_R = a \cos \vartheta_R. \quad (3.9)$$

Daraus folgt für $\lambda_E = \lambda_R$ die Bedingung, dass der Einfallswinkel ϑ_E dem Ausfallswinkel ϑ_R identisch sein muss⁶

$$\vartheta_E = \vartheta_R = \vartheta. \quad (3.10)$$

2. Die Sekundärwellen der Atome auf Netzebenen parallel zur y-Achse sollen ebenfalls konstruktiv interferieren. Dabei ergibt sich für den Wegunterschied zweier Strahlen ausgesandt von benachbarten Atomen unter der Bedingung (3.10) $2\Delta = 2a \sin \vartheta$. Für konstruktive Interferenz muss dieser Wegunterschied einem ganzzahligen Vielfachen der Wellenlänge λ entsprechen. Damit folgt die zweite Bragg-Bedingung

$$\sin \vartheta_{\max} = \frac{n\lambda}{2a}. \quad (3.11)$$

Dies sind die Bedingungen für Bragg-Reflexion an einer Schar von *Netzebenen* (im Beispiel sind sie senkrecht zur y-Achse), deren Abstand a beträgt. Zusätzlich bemerken wir, dass das Interferenzmaximum umso schärfer ist, je grösser die Anzahl Netzebenen ist, die beteiligt sind.

Diese Methode eignet sich, wie erwähnt, für die Bestimmung der Wellenlänge λ von Röntgen-Strahlen bei bekannter Gitterkonstante a . Umgekehrt kann bei bekannter Wellenlänge λ die Gitterkonstante a eines natürlichen Kristalls bestimmt werden. Diese Technik kommt in der Festkörperphysik häufig zur Anwendung (siehe Abschnitt 7.2.2).

Netzebenen

Man kann Atome in einem Gitter auf viele Weisen zu Netzebenen zusammenfassen. Den einfachsten Fall haben wir in der Beschreibung der Bragg-Reflexion nach Abb. 3.10 kennengelernt. In Abb. 3.11 ist nun eine weitere Möglichkeit skizziert, wie die Atome in einem einfach kubischen Gitter zu Netzebenen zusammengefasst werden können. In die Bragg-Bedingung (3.11) ist dann anstelle von a der Abstand dieser Netzebenen einzusetzen. Wir überprüfen dies in diesem neuen Beispiel.

Als Braggsche Netzebenen betrachten wir die eingezeichneten Diagonalebene des kubischen Gitters. Konstruktive Interferenz der Streuwellen, d.h. ein Beugungsmaximum, tritt auf, wenn gleichzeitig folgende zwei Bedingungen erfüllt sind:

⁶Im Allgemeinen ist ein Gangunterschied $n\lambda$ erlaubt und würde Reflexionen höherer Ordnung zur Folge haben. Jedoch kommt es auf die Versuchsanordnung an, ob diese beobachtet werden oder nicht. In unserem Fall, wo $\lambda \sim a$, wird nur die nullte Ordnung beobachtet, bei der der Gangunterschied bei der Reflexion an benachbarten Atomen (in einer Ebene) verschwindet und demzufolge Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel ist.

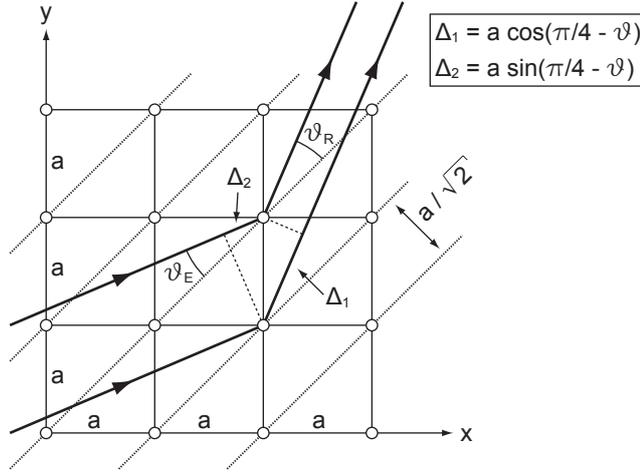


Abb. 3.11: Beispiel zu Netz-ebenen im einfach kubischen Gitter.

Analog zur Bragg-Reflexion nach Abb. 3.10 muss auch hier der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel sein

$$\vartheta_E = \vartheta_R = \vartheta \text{ für } \lambda_E = \lambda_R. \quad (3.12)$$

Ebenfalls muss der Wegunterschied zweier Strahlen, welche an zwei benachbarten parallelen Ebenen reflektiert werden, einem ganzzahligen Vielfachen der Wellenlänge λ entsprechen

$$a \cos(\pi/4 - \vartheta) - a \sin(\pi/4 - \vartheta) = n\lambda. \quad (3.13)$$

Daraus ergibt sich

$$a [\cos(\pi/4) \cos \vartheta + \sin(\pi/4) \sin \vartheta - (\sin(\pi/4) \cos \vartheta - \cos(\pi/4) \sin \vartheta)] = n\lambda. \quad (3.14)$$

Mit $\cos(\pi/4) = \sin(\pi/4) = 1/\sqrt{2}$ folgt

$$\frac{a}{\sqrt{2}} (\cos \vartheta + \sin \vartheta - \cos \vartheta + \sin \vartheta) = n\lambda. \quad (3.15)$$

Die Bragg-Bedingung lautet somit

$$\sin \vartheta_{\max} = \frac{n\lambda}{2(a/\sqrt{2})}, \quad (3.16)$$

d.h. wir erhalten wie behauptet die Bragg-Bedingung (3.11), wo anstelle von a der neue Netzebenenabstand $a/\sqrt{2}$ einzusetzen ist.

Bragg-Reflexion mit Mikrowellen

Das Phänomen der Bragg-Reflexion lässt sich statt mit Röntgen-Strahlung an einem natürlichen Kristall mit Netzebenenabstand von einigen Å anschaulicher mit Mikrowellenstrahlung an einem künstlichen Kristall mit einigen cm Netzebenenabstand demonstrieren (siehe Abb. 3.12). Eingebettet in Schaumstoff, der

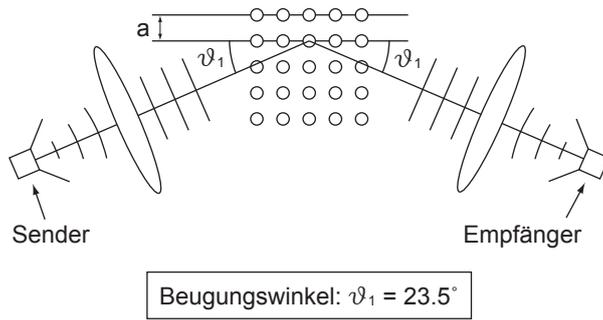


Abb. 3.12: Demonstration der Bragg-Reflexion mit Mikrowellen. Auf die einzelnen Bestandteile des Versuchsaufbaus wird im Text eingegangen.

die Mikrowellen nicht streut, sind 5^3 Aluminiumkugeln von 1.25 cm Durchmesser. Sie bilden ein einfaches kubisches Gitter mit der Gitterkonstanten $a = 4$ cm. Ein Klystron-Oszillator sendet eine elektromagnetische Welle von 3.2 cm Wellenlänge aus, die durch eine Kunststofflinse in eine ebene Welle umgewandelt wird, die dann auf das Kristallmodell einfällt.

Die skizzierte Stellung von Sender, Kristallmodell und Empfänger entspricht der Bragg-Bedingung für $n = 1$ und $a = 4$ cm

$$\sin \vartheta_1 = \frac{\lambda}{2a} = \frac{3.2 \text{ cm}}{2 \cdot 4 \text{ cm}} = 0.4 \Rightarrow \vartheta_1 = 23.5^\circ. \quad (3.17)$$

Auch die Bragg-Reflexion an den Diagonalebene des kubischen Gitters lässt sich in diesem Modell demonstrieren

$$\sin \vartheta_1 = \frac{\lambda}{2(a/\sqrt{2})} = \frac{3.2 \text{ cm} \cdot \sqrt{2}}{2 \cdot 4 \text{ cm}} = 0.57 \Rightarrow \vartheta_1 = 34.5^\circ. \quad (3.18)$$

3.5 Messung des Spektrums einer Röntgen-Röhre

Wir betrachten nun die Messung des Spektrums einer Röntgen-Röhre. Zur Messung dient ein sogenanntes *Bragg-Spektrometer* (siehe Abb. 3.13). Aus dem Strahlungsfeld einer Röntgen-Röhre mit Molybdän-Anode wird durch zwei Spalte ein annähernd paralleles Strahlenbündel ausgeblendet und an einem NaCl-Kristall (einfach kubisches Gitter mit $a = 2.81 \text{ \AA}$) Bragg reflektiert. Als Detektor wird ein *Geiger-Zähler* verwendet. Er spricht auf die einfallenden Röntgen-Lichtquanten an. Die Intensität der Strahlung ist proportional zur Zählrate, d.h. zur Anzahl der Quanten, die in einem bestimmten Zeitintervall registriert werden.

Zur Aufnahme des Intensitätsspektrums der Röntgen-Röhre wird der Kristall langsam gedreht. Die Bewegung des Geigerzählers ist mit derjenigen des Kristalls so gekoppelt, dass die erste Bragg-Bedingung immer erfüllt ist. Bei gleichzeitiger Erfüllung der zweiten Bragg-Bedingung wird die Intensität der an der Schar der Netzebenen mit dem Abstand $a = 2.81 \text{ \AA}$ gestreuten Strahlung detektiert.

Abb. 3.14 zeigt die Skizze einer Messung der Zählrate als Funktion des Reflexionswinkels für verschiedene Beschleunigungsspannungen (20, 30 und 50 kV), wie sie mit dem Aufbau aus Abb. 3.13 gemessen wird.

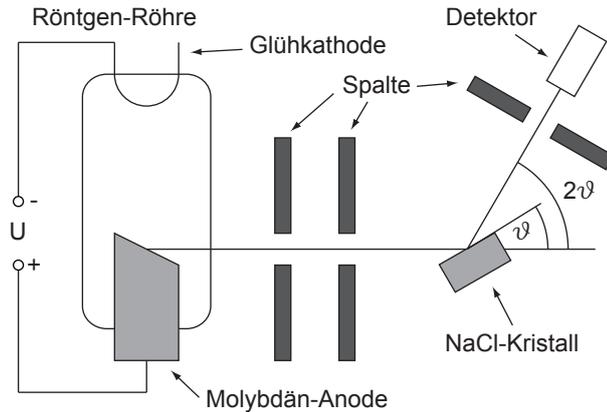


Abb. 3.13: Bragg-Spektrometer: Experimenteller Aufbau zur Bestimmung des Spektrums einer Röntgen-Röhre. Auf die einzelnen Bestandteile des Versuchsaufbaus wird im Text eingegangen.

Bei 20 kV beobachten wir ein kontinuierliches Spektrum, welches bei kleinen Winkeln $\vartheta \sim 6^\circ$ abbricht. Bei höheren Beschleunigungsspannungen (30 kV, 50 kV) steigt die Intensität des Spektrums und der Winkel bei dem die Verteilung abbricht erniedrigt sich. Dieses Abbrechen des Spektrums bei einer minimalen Wellenlänge λ_{\min} bzw. maximalen Frequenz ν_{\max} steht klar im Widerspruch zur klassischen Betrachtung (siehe Abschnitt 3.1). Zusätzlich treten bei ausreichend hohen Spannungen diskrete Linien im Spektrum auf, deren Position nicht von der Beschleunigungsspannung abhängt.

Wenn die kürzeste Wellenlänge λ_{\min} der von der Röntgen-Röhre erzeugten Strahlung deutlich kleiner ist als der Netzebenenabstand a des Kristalls, dann wird die Bragg-Bedingung nicht nur in erster Ordnung ($n = 1$) sondern auch in höheren Ordnungen ($n > 1$) erfüllt. Dadurch zeigen sich im Spektrum bei grösseren Beugungswinkeln Repliken der diskreten Spektrallinien und die Gesamtintensität steigt an. Bei einer Winkeleinstellung ϑ wird nicht nur die Wellenlänge $\lambda = 2a \sin \vartheta$ reflektiert, sondern auch die Wellenlängen $\lambda/2$, $\lambda/3$, $\lambda/4$, ... , sofern sie im Spektrum der Röntgen-Röhre vorkommen. Nur wenn das Spektrum der Röhre so beschaffen ist, dass der Kristall nur in der ersten Ordnung ($n = 1$) reflektiert, würde bei jeder Winkelstellung ϑ nur Strahlung einer einzigen Wellenlänge $\lambda = 2a \sin \vartheta$ in den Detektor gelangen und die Zählrate ergäbe ein direktes Abbild des Intensitätsspektrums. Eine grobe Zerlegung in

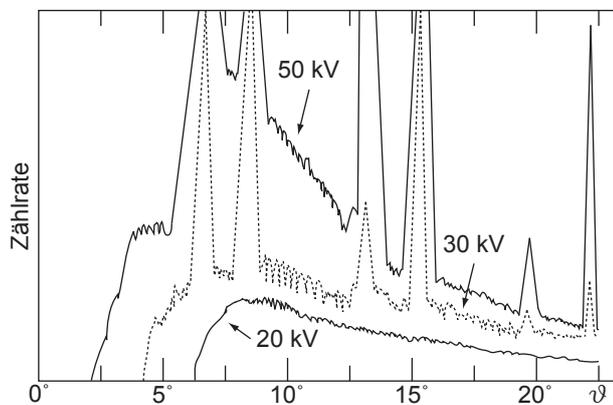


Abb. 3.14: Das Spektrum einer Röntgen-Röhre: Skizze einer Messung der Zählrate als Funktion des Reflexionswinkels für Beschleunigungsspannungen von 20, 30 und 50 kV.

die Ordnungen $n = 1, 2$ und 3 für die 50 kV Messung ist in Abb. 3.15 skizziert.

Die experimentellen Spektren brechen bei einer Grenzfrequenz ν_{\max} , die innerhalb der Messgenauigkeit der Messapparatur proportional zur Beschleunigungsspannung U ist, scharf ab. Der Proportionalitätsfaktor hängt nicht vom Anodenmaterial ab. Ganz offensichtlich besteht hier ein Zusammenhang mit der Einsteinschen Interpretation des Photoeffekts. Mit dieser quantenmechanischen Interpretation beschäftigen wir uns im nächsten Abschnitt.

Die dem kontinuierlichen Spektrum überlagerten Linien treten bei einer Mo-Anode nur auf, wenn die Beschleunigungsspannung 20 kV überschreitet. Ihre Wellenlängen und die Schwellenspannung⁷ hängen nur vom Anodenmaterial ab.

3.6 Quantenmechanik des Inversen Photoeffekts

Trägt man die Beschleunigungsspannung U als Funktion der bei einer Röntgen-Röhre gemessenen Grenzfrequenz ν_{\max} auf, so ergibt sich ein linearer Zusammenhang (siehe Abb. 3.16). Die Gleichung der Geraden ist gegeben durch

$$h\nu_{\max} = eU + W, \quad (3.19)$$

wobei die Steigung wie beim Photoeffekt durch das Plancksche Wirkungsquantum h und die Elektronenladung e bestimmt ist. Die Austrittsarbeit W ist von der Größenordnung von 1 eV und kann in diesem Experiment gegenüber eU (Größenordnung 10^4 eV) vernachlässigt werden.

Die Interpretation der Gleichung ist folgende:

- Die maximale Frequenz ν_{\max} der elektromagnetischen Strahlung, die beim Abbremsen eines geladenen Teilchens der kinetischen Energie E_{kin} entstehen kann, ist gegeben durch die Energie $h\nu_{\max} = E_{\text{kin}}$.
- Wenn wir den Begriff des Photons verwenden, lässt sich die Interpretation auch folgendermassen formulieren: Das energiereichste Photon, das

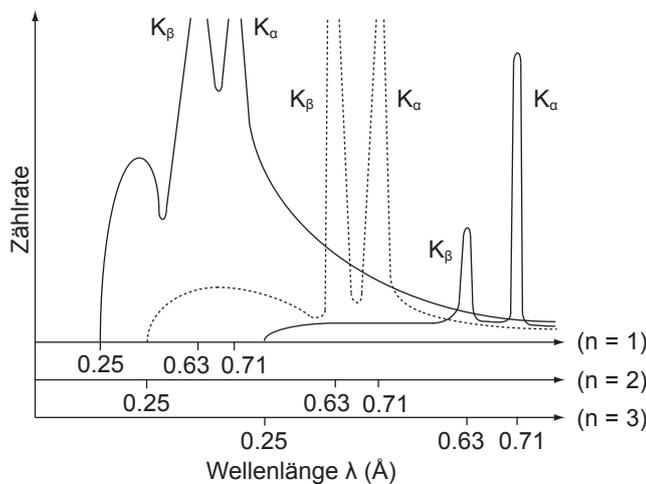


Abb. 3.15: Das Spektrum einer Röntgen-Röhre: Skizze einer Messung der Zählrate als Funktion der Wellenlänge für eine Beschleunigungsspannung von 50 kV mit der Zerlegung in die Ordnungen $n = 1, 2$ und 3 .

⁷Als Schwellenspannung wird die kleinstmögliche Beschleunigungsspannung bezeichnet, bei der die Spektrallinien gerade noch sichtbar sind.

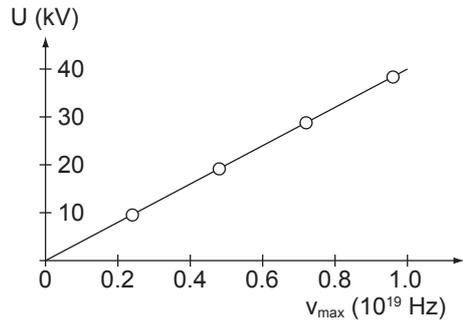


Abb. 3.16: Die Beschleunigungsspannung U zeigt eine lineare Abhängigkeit von der Grenzfrequenz ν_{\max} .

beim Abbremsen eines geladenen Teilchens der kinetischen Energie E_{kin} entstehen kann, hat die Energie $h\nu_{\max} = E_{\text{kin}}$.

Das Bremsstrahlungsexperiment zeigt also in Übereinstimmung mit dem Photoeffekt, dass die Energie eines Lichtquants $h\nu$ beträgt. Offenbar gilt diese Beziehung in einem sehr grossen Energiebereich. Die Existenz der Grenzfrequenz ν_{\max} zeigt, dass das einfallende Elektron seine ganze kinetische Energie zur Erzeugung eines Photons aufwenden kann.

Das sich an die Grenzfrequenz anschliessende kontinuierliche Spektrum ist andererseits ein Indiz dafür, dass im Allgemeinen nur ein Bruchteil der kinetischen Energie zur Erzeugung des Photons dient und dass dieser beliebig sein kann. Dies ist auch plausibel aus der klassischen Betrachtung (siehe Abschnitt 3.1). Tatsächlich liefert die klassische Theorie eine gute Approximation für den langwelligen Teil des Bremsspektrums, wenn man die Absorption der Strahlung im Anodenmaterial als bekannt voraussetzt.

Wir haben gesehen, dass dem kontinuierlichen Spektrum der Röntgen-Röhre (siehe Abb. 3.15) Spektrallinien überlagert sind. Dieses Linienspektrum ist für das verwendete Anodenmaterial charakteristisch und lässt sich akkurat nur unter Betrachtung der quantenmechanischen Eigenschaften der Atome des Anodenmaterials verstehen.

Das einfallende Elektron schlägt aus einer inneren gefüllten Elektronenschale eines Atoms der Anode ein Elektron heraus. Durch den Übergang eines Elektrons aus einer weiter aussen liegenden Schale in das Loch der nun freien inneren Schale wird ein Photon mit einer charakteristischen Energie $h\nu$ emittiert. In Abb. 3.15 entspricht die mit K_{α} bezeichnete Linie ($\lambda = 0.71 \text{ \AA}$) dem Übergang eines Elektrons der L-Schale in ein Loch in der K-Schale. Die mit K_{β} bezeichnete Linie ($\lambda = 0.63 \text{ \AA}$) dem Übergang eines Elektrons aus der M-Schale in ein Loch der K-Schale. Hierbei sind die K-, L- und M-Schalen durch die diskreten Bindungsenergien der Elektronen im Atom bestimmt. Um ein Loch in der K-Schale des Molybdäns zu erzeugen, muss die Energie des einfallenden Elektrons 20 kV übersteigen. Dies erklärt warum die Spektrallinien bei diesem Experiment erst für die höheren Beschleunigungsspannungen (30 und 50 kV) zu beobachten sind.

3.7 Zusammenfassung

- Unter dem inversen Photoeffekt, auch Bremsstrahlung genannt, versteht man die Emission von elektromagnetischer Strahlung, welche durch die Abbremsung von Elektronen an einer Metalloberfläche entsteht.
- Ein einfaches klassisches Modell ergibt sich, indem der zeitliche Verlauf $-\ddot{z}(t)$ des Bremsvorgangs durch eine Glockenkurve angenommen wird. Wird zusätzlich die Absorption im Metall berücksichtigt, liefert dieses einfache Modell eine gute Näherung des Bremsspektrums, zumindest für den langwelligen Teil.
- Der inverse Photoeffekt eignet sich sehr gut zur Erzeugung von Röntgen-Strahlung, d.h. elektromagnetische Strahlung mit Wellenlängen zwischen 10^{-8} und 10^{-12} m. Röntgen-Strahlung findet breite Anwendung in der Medizin und in der Festkörperphysik.
- Zur Erzeugung von Röntgen-Strahlung dienen Röntgen-Röhren: Freie Elektronen, erzeugt mittels thermoelektrischem Effekt, werden auf 1 - 100 keV beschleunigt und anschliessend abgebremst.
- Zur Wellenlängenmessung dienen in der Festkörperphysik künstliche und natürliche Beugungsgitter. Welche Art von Gitter eingesetzt wird, hängt von der Wellenlänge λ der zu untersuchenden Strahlung ab, die etwa in der Grössenordnung der Gitterkonstante a liegen muss, da ansonsten keine Beugungsphänomene beobachtet werden können. Zur Untersuchung von Röntgen-Strahlung dienen deshalb natürliche Beugungsgitter. Bei einfach kubischen Gittern treten Interferenzmaxima unter den beiden Bragg-Bedingungen

$$\vartheta_E = \vartheta_R = \vartheta, \quad (3.20)$$

$$\sin \vartheta_{\max} = \frac{n\lambda}{2a} \quad (3.21)$$

auf. Bei bekannter Wellenlänge λ lässt sich diese Methode umkehren und zur Bestimmung der Gitterkonstante a von natürlichen Kristallen heranziehen.

- Die quantenmechanische Interpretation ergibt sich aus der Betrachtung der Beschleunigungsspannung U als Funktion der bei einer Röntgen-Röhre gemessenen Grenzfrequenz ν_{\max} . Der Zusammenhang dieser beiden Grössen wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$h\nu_{\max} = eU(+W), \quad (3.22)$$

wobei die Austrittsarbeit W gegenüber eU vernachlässigt werden kann und die Steigung wie beim Photoeffekt durch das Plancksche Wirkungsquantum h und die Elektronenladung e bestimmt ist. Das bedeutet, dass die maximale Frequenz ν_{\max} der elektromagnetischen Strahlung, die beim

Abbremsen eines geladenen Teilchens der kinetischen Energie E_{kin} entstehen kann, gegeben ist durch die Energie $h\nu_{\text{max}} = E_{\text{kin}}$. Oder in anderen Worten: Das energiereichste Photon, das beim Abbremsen eines geladenen Teilchens der kinetischen Energie E_{kin} entstehen kann, hat die Energie $h\nu_{\text{max}} = E_{\text{kin}}$. Das Bremsstrahlungsexperiment zeigt also in Übereinstimmung mit dem Photoeffekt, dass die Energie eines Lichtquants $h\nu$ beträgt.

Kapitel 4

Der Impuls des Photons

Wir haben bisher erste Teilcheneigenschaften von Licht kennengelernt, indem wir die Quantisierung der Energie des Lichts betrachtet haben. Wir untersuchen nun Situationen, in denen man nachweisen kann, dass Licht auch einen Impuls trägt oder, anders ausgedrückt, dass Photonen ebenfalls einen Impuls besitzen.

In Abschnitt 4.1 werden wir als erstes eine (klassische) Berechnung durchführen, die zeigt, dass eine elektromagnetische Welle bei der Reflexion an einem Spiegel einen Druck, den sogenannten *Strahlungsdruck*, auf diesen ausübt. Dies wird uns einen ersten Hinweis auf den Impuls von Photonen geben. Der historische Weg zum Ausdruck für den Impuls des Photons führte jedoch nicht über diese Berechnung, sondern über ein von Arthur Holly Compton um 1922 durchgeführtes Experiment. Auf den von ihm beobachteten Effekt, den sogenannten *Compton-Effekt*, gehen wir dann anschliessend im Abschnitt 4.2 ein. Die Beobachtung des Compton-Effekts lieferte den ersten experimentellen Nachweis des Impulses eines Photons.

4.1 Der Strahlungsdruck

Wir berechnen den Strahlungsdruck, der eine elektromagnetische Welle bei der Absorption an einer ebenen Platte auf diese ausübt (siehe Abb. 4.1).

Eine elektromagnetische ebene Welle mit elektrischer Feldstärke \vec{E} und ma-

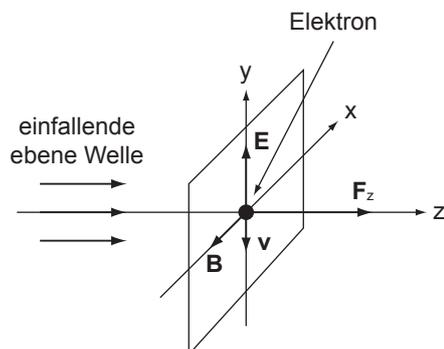


Abb. 4.1: Grafische Darstellung einer elektromagnetischen Welle mit elektrischer Feldstärke \vec{E} und magnetischer Flussdichte \vec{B} deren Wechselwirkung mit den Elektronen einer leitenden Platte zu einer Kraft F_z führt.

gnetischer Flussdichte \vec{B}

$$\vec{E} = E_y \sin(\omega t) \quad (4.1)$$

$$\vec{B} = -B_x \sin(\omega t) \quad (4.2)$$

trifft bei $z = 0$ auf eine Platte. Als erstes berechnen wir den Impulsübertrag von der elektromagnetischen Welle auf ein Elektron im absorbierenden Material.

Auf das Elektron in der Platte wirkt eine elektrische Kraft

$$\vec{F}_E = q\vec{E} = -e\vec{E} = \begin{pmatrix} 0 \\ -eE_y \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Neben dieser Kraft erfährt das Elektron eine Dämpfung im Material, welche durch die sogenannte Beweglichkeit oder Mobilität μ_e charakterisiert wird. Im Gleichgewicht zwischen \vec{F}_E und Dämpfung ist die sogenannte Driftgeschwindigkeit \vec{v}_D mit der sich die Elektronen durch das Material bewegen beschrieben durch die folgende Gleichung

$$\vec{v}_D = \mu_e \vec{F}_E = \mu_e \begin{pmatrix} 0 \\ -eE_y \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Wir nehmen nun an, dass die Zeit, in der dieses Gleichgewicht hergestellt wird, viel kürzer ist als die Periode mit der die elektromagnetische Feldstärke oszilliert. Wir erhalten unter dieser Annahme für die Elektronen im Mittel einen Betrag der Driftgeschwindigkeit von

$$\bar{v}_D^y = -\mu_e e E_y \quad (4.5)$$

mit der sich das Elektron entlang der negativen y-Richtung bewegt. Diese Mittelung bzw. Vernachlässigung der Feldstärkeoszillationen behalten wir für die nachfolgenden Berechnungen bei. Demzufolge sind alle nachfolgenden Größen unter dieser Mittelung zu betrachten. Einfachheitshalber werden wir den Mittelungsstrich jeweils weglassen.

Neben der elektrischen Kraft wirkt auch eine magnetische Kraft, die von der magnetischen Flussdichte herrührt, auf das Elektron

$$\vec{F}_B = -e(\vec{v}_D \times \vec{B}) = -e \begin{pmatrix} 0 \\ v_D^y \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -B_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -e \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ v_D^y B_x \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Das Elektron spürt also eine zusätzliche Kraft entlang der positiven z-Richtung ($v_D^y < 0$). Dieser Term ist für den Strahlungsdruck verantwortlich. Mit (4.5) und der Beziehung $B = E/c$ erhalten wir daraus

$$F_B^z = -e v_D^y B_x = e^2 \mu_e E_y B_x = \frac{e^2 \mu_e E_y^2}{c}. \quad (4.7)$$

Mit der Beziehung

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} \quad (4.8)$$

zwischen einer Kraft \vec{F} und dem Impuls \vec{p} ergibt sich folgende Gleichung

$$F_B^z = \frac{dp_z}{dt} = \frac{e^2 \mu_e E_y^2}{c}. \quad (4.9)$$

Für die Arbeit pro Zeiteinheit dW/dt , die vom elektrischen Feld am Elektron geleistet wird, erhalten wir mit (4.9)

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} &= \vec{F} \cdot \vec{v}_D = (\vec{F}_E + \vec{F}_B) \cdot \vec{v}_D = \vec{F}_E \cdot \vec{v}_D = F_E^y \cdot v_D^y \\ &= (-eE_y)(-e\mu_e E_y) = e^2 \mu_e E_y^2 = c \frac{dp_z}{dt}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Integration liefert schliesslich für den Impulsübertrag p_z einer elektromagnetischen Welle auf ein Elektron der ebenen Platte

$$p_z = \frac{W}{c}, \quad (4.11)$$

d.h. bei der Absorption einer elektromagnetischen Welle in einem Material, wird auf dieses ein Impuls übertragen. Die Grösse des Impulsübertrags ist bestimmt durch die Arbeit W , die von der elektromagnetischen Welle am Material verrichtet wird und durch die Lichtgeschwindigkeit c .

Betrachtet man anstelle von Absorption in der Platte den Fall der Reflexion der Strahlung, so ergibt sich einen zusätzlichen Impulsübertrag des gleichen Betrags auf die interagierende Fläche, d.h. bei der Reflexion an einem Spiegel ergibt sich eine Impulsübertrag p_R^z von:

$$p_R^z = \frac{2W}{c}. \quad (4.12)$$

In den letzten Kapiteln haben wir gesehen, dass wir Licht als Strom von Teilchen (Photonen) betrachten können. Wenn man den Impulsübertrag bei der Reflexion einer elektromagnetischen Welle an einem Spiegel mit dieser Vorstellung von Photonen interpretieren will, muss man annehmen, dass diese einen Impuls haben und wie Teilchen elastisch vom Spiegel reflektiert werden. In diesem Fall wechselt die Komponente des Photonenimpulses, die senkrecht zum Spiegel steht, ihr Vorzeichen und überträgt dabei doppelt so viel Impuls wie bei der Absorption.

Den Impuls eines Photons p_ν erhalten wir aus der Energie W einer elektromagnetischen Welle, die einem ganzzahligen Vielfachen der Energie $E_\nu = h\nu$ eines Photons entspricht

$$W = nh\nu. \quad (4.13)$$

Einsetzen in (4.12) liefert

$$p_R^z = \frac{2nh\nu}{c}. \quad (4.14)$$

Somit erhalten wir folgendes Resultat

Ein Photon besitzt den Impuls

$$p_\nu = \frac{h\nu}{c}. \quad (4.15)$$

Zwischen Impuls p_ν und Energie E_ν des Photons gilt der folgende Zusammenhang

$$E_\nu = cp_\nu. \quad (4.16)$$

Zum Abschluss dieser Betrachtungen kommen wir nochmals auf den Begriff des Strahlungsdrucks zurück und geben eine Formel für diesen an. Wir betrachten den Fall der Absorption. Den Strahlungsdruck p , der auf die Spiegelfläche A wirkt, können wir folgendermassen ausdrücken

$$p = \frac{F_B^z}{A} = \frac{1}{A} \frac{dp_z}{dt} = \frac{1}{Ac} \frac{dW}{dt} = \frac{I}{c}, \quad (4.17)$$

wobei I der Strahlungsintensität entspricht, die vom Spiegel absorbiert wird.

4.2 Der Compton-Effekt

Wie zu Beginn erwähnt, führte der historische Weg zum Ausdruck für den Impuls eines Photons nicht über die in Abschnitt 4.1 durchgeführte Berechnung, sondern über ein Experiment, welches Compton um etwa 1922 durchführte¹.

4.2.1 Das Experiment von Compton

Compton liess die Strahlung einer Röntgen-Röhre mit einer Molybdän-Anode (siehe Abschnitt 3.2.1) direkt auf ein Stück Graphit² fallen (siehe Abb. 4.2). Anschliessend analysierte er das Spektrum der unter einem Winkel von 90° gestreuten Strahlung mit einem Bragg-Spektrometer (siehe Abschnitt 3.5) und verglich es mit dem Spektrum der einfallenden Strahlung. Als Spektrometerelement verwendete er Kalzit (CaCO_3) und als Detektor eine Ionisationskammer³.

In Abb. 4.3 ist das Messergebnis des historischen Experiments von Compton dargestellt, welches 1923 im Physical Review publiziert wurde. Die gestrichelte Linie zeigt das gemessene Spektrum von Molybdän. Die durchgezogene Linie

¹Für die damit verbundene Entdeckung des Compton-Effekts erhielt Compton 1927 den Nobelpreis in Physik.

²Graphit ist eine der natürlichen Erscheinungsformen des chemischen Elements Kohlenstoff in Reinform.

³Eine Ionisationskammer ist ein Strahlungsdetektor und besteht im wesentlichen aus einer Kammer, in der sich ein Kondensator und ein Füllgas befinden. Zwischen der Anode und der Kathode des Kondensators wird eine Hochspannung angelegt. Tritt nun Strahlung in die Ionisationskammer ein, kommt es zur Wechselwirkung mit dem Füllgas, welches dadurch ionisiert wird. Aufgrund der Hochspannung driften die getrennten Ladungen (Elektronen und positiv geladene Ionen) zu den Kondensatorplatten und ein Entladungsstrom kann gemessen werden.

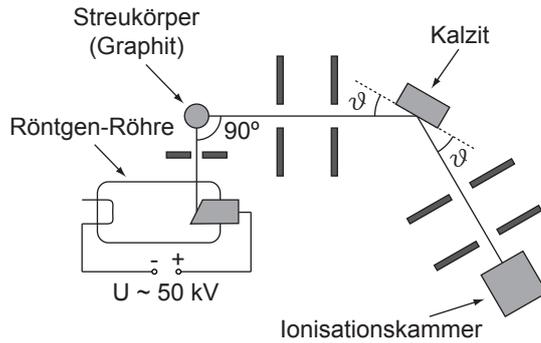


Abb. 4.2: Aufbau zur Messung des Compton-Effekts bestehend aus einer Röntgen-Röhre als Photonenquelle und einem Bragg-Spektrometer zur Detektion des gestreuten Spektrums.

zeigt, das Spektrum von Molybdän nachdem es unter einem Winkel von 90° an Graphit gestreut wurde.

Man erkennt das kontinuierliche Bremspektrum und die beiden dominanten Spektrallinien K_α und K_β . Die beiden Spektren stimmen von der Form her im Wesentlichen überein. Jedoch ergibt sich das folgende wesentliche Ergebnis:

Das Spektrum der gestreuten Strahlung ist gegenüber dem Spektrum der direkten (ungestreuten) Strahlung zu längeren Wellenlängen verschoben. Diese Wellenlängenverschiebung wird *Compton-Verschiebung* genannt.

Was Compton beobachtete, konnte also - im Gegensatz zur Streuung, die der Bragg-Reflexion am Spektrometerkristall zugrunde liegt - nicht kohärente Streuung sein. Offensichtlich gibt es noch andere Streuprozesse.

Compton interpretierte das Messresultat wie folgt:

Ein einfallendes Photon mit der Energie $h\nu$ und dem Impuls $h\nu/c$ stößt elastisch mit einem Elektron des Streukörpers zusammen. Dabei verliert es einen Teil seiner Energie und seines Impulses. Die Impulse und Energien der betrachteten Teilchen lassen sich durch Betrachtung der Energie- und Impulserhaltung des Gesamtsystems bestimmen.

Bevor wir uns mit der Berechnung dieser Wellenlängenverschiebung (Compton-Verschiebung) befassen, betrachten wir zuerst noch ein weiteres moderneres Ex-

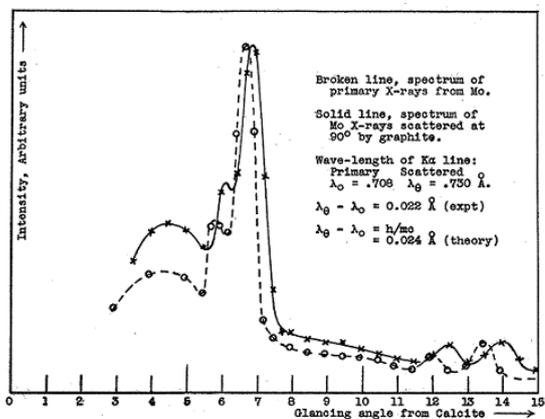


Abb. 4.3: Direkt gemessenes Bragg-Spektrum einer Röntgen-Röhre (gestrichelte Linie) und nach der Streuung an Graphit (durchgezogene Linie). Originaldaten von Compton von 1922 publiziert 1923 [3].

periment zum Compton-Effekt, bei dem deutlich grössere Verschiebungen der Wellenlängen beobachtet werden können.

4.2.2 Compton-Effekt mit Gammastrahlung

Als Quelle dient in diesem Experiment (siehe Abb. 4.4) eine ^{137}Cs -Quelle. Die ausgesendeten hochenergetischen Photonen (Gammastrahlen), die bei einem radioaktiven Zerfall entstehen, werden auf einen dünnen Kupfer-Stab gerichtet, wo ein Teil der Photonen an Elektronen elastisch gestreut wird. Die unter einem Winkel φ gestreuten Photonen werden mit einem Szintillationszähler bestehend aus einem NaI-Kristall mit nachfolgendem Photomultiplier⁴ energieaufgelöst nachgewiesen.

Das Resultat der Messung ist in Abb. 4.5 in einem sogenannten Polardigramm dargestellt. Jedem Streuwinkel φ ist das Verhältnis zwischen der Photonenenergie beim entsprechenden Streuwinkel $h\nu'$ und der Photonenenergie der direkten Strahlung $h\nu$ durch den jeweiligen Abstand der Messkurve zum Nullpunkt zugeordnet.

Das erhaltene Resultat bestätigt das Ergebnis der historischen Messung (siehe Abschnitt 4.2.1): Die Frequenz (Wellenlänge) der gestreuten Strahlung ist gegenüber der direkten Strahlung verschoben. Eine weitere Erkenntnis ist, dass das Maximum des unter $\varphi = 0$ gemessenen Spektrums bei der gleichen Frequenz (Wellenlänge) auftritt wie das Maximum beim Spektrum der direkten Strahlung.

Verfeinerte Experimente zeigen, dass im Streuspektrum nicht nur bei der verschobenen Wellenlänge λ' ein Maximum zu beobachten ist, sondern auch bei der Wellenlänge λ der direkten Strahlung. Auf die Erklärung dieser Beobachtung und die Berechnung der Compton-Verschiebung gehen wir im nächsten Abschnitt genauer ein.

4.2.3 Berechnung der Compton-Verschiebung

Zur Berechnung der Compton-Verschiebung gehen wir von Comptons Interpretation (siehe Abschnitt 4.2.1) aus. Ein einfallendes Photon mit der Energie $h\nu$

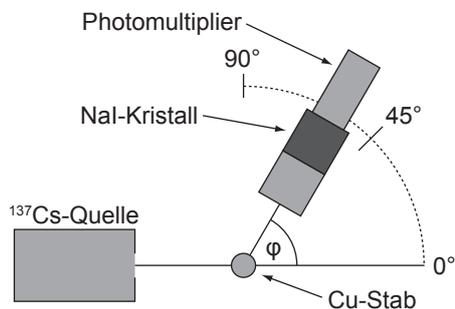


Abb. 4.4: Versuchsanordnung zur Messung des Compton-Effekts mit Gammastrahlung aus einer ^{137}Cs -Quelle. Als Detektor dient ein Szintillationszähler.

⁴Ein Photomultiplier besteht aus einer Photokathode und einem nachgeschalteten Sekundärelektronenvervielfacher. Die Funktionsweise ist analog zu dem in Abschnitt 2.3 beschriebenen Photonenzähler.

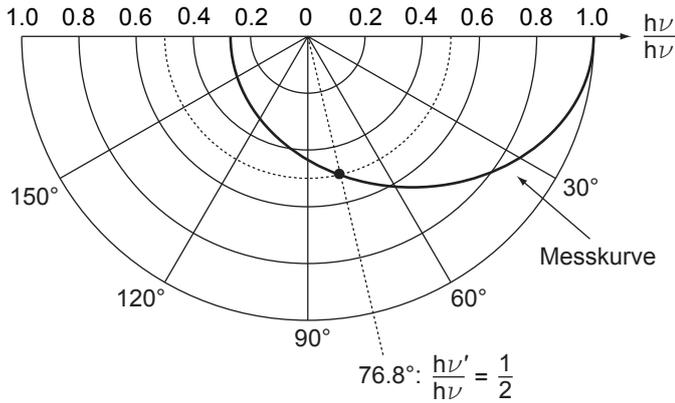


Abb. 4.5: Verhältnis der gestreuten Photonenenergie zur einfallenden Energie in Abhängigkeit vom Streuwinkel dargestellt in einem Polardiagramm.

und dem Impuls $h\nu/c$ stösst elastisch mit einem Elektron des Streukörpers zusammen (siehe Abb. 4.6). Dabei gilt für das Gesamtsystem aus Photon und Elektron Energie- und Impulserhaltung. Wir nehmen an, dass das vom Photon angestossene Elektron ungebunden ist und ursprünglich in Ruhe war. Dies ist in guter Näherung in einem Metall erfüllt, da die Leitungselektronen im Vergleich zur Energie der einfallenden Photonen nur schwach gebunden sind und einen kleinen Impuls tragen.

Aus der Energieerhaltung ergibt sich

$$\underbrace{h\nu}_{\text{Energie des einfallenden Photons}} + \underbrace{mc^2}_{\text{Ruheenergie des Elektrons}} = \underbrace{h\nu'}_{\text{Energie des gestreuten Photons}} + \underbrace{\sqrt{m^2c^4 + p_e^2c^2}}_{\text{Energie des Elektrons nach dem Stoss}} \quad (4.18)$$

Aus der Impulserhaltung erhalten wir

$$\underbrace{\vec{p}}_{\text{Impuls des einfallenden Photons}} + \underbrace{0}_{\text{Impuls des Elektrons vor dem Stoss}} = \underbrace{\vec{p}'}_{\text{Impuls des gestreuten Photons}} + \underbrace{\vec{p}_e}_{\text{Impuls des Elektrons nach dem Stoss}} \quad (4.19)$$

mit

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \text{und} \quad p' = \frac{h\nu'}{c} = \frac{h}{\lambda'} \quad (4.20)$$

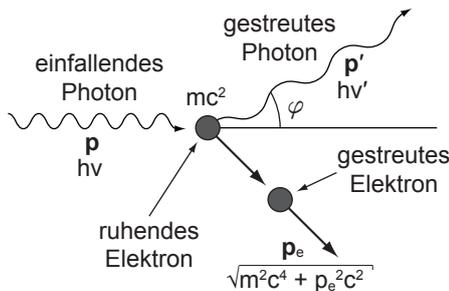


Abb. 4.6: Diagramm zur Energie- und Impulserhaltung beim Compton-Effekt.

Aus (4.18) erhalten wir durch Quadrieren

$$(h\nu - h\nu' + mc^2)^2 = m^2c^4 + p_e^2c^2. \quad (4.21)$$

Division durch c^2 ergibt

$$\begin{aligned} p_e^2 &= \frac{1}{c^2}(h\nu - h\nu' + mc^2)^2 - m^2c^2 \\ &= (p - p' + mc)^2 - m^2c^2 \\ &= p^2 + p'^2 + m^2c^2 - 2pp' + 2pmc - 2p'mc - m^2c^2 \\ &= p^2 + p'^2 - 2pp' + 2pmc - 2p'mc. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Aus (4.19) erhalten wir

$$(\vec{p}_e)^2 = (\vec{p} - \vec{p}')^2 = (\vec{p})^2 + (\vec{p}')^2 - 2\vec{p}\vec{p}' = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \varphi, \quad (4.23)$$

wobei φ den Winkel zwischen \vec{p} und \vec{p}' bezeichnet.

Gleichsetzen von (4.22) und (4.23) ergibt

$$p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \varphi = p^2 + p'^2 - 2pp' + 2pmc - 2p'mc. \quad (4.24)$$

Kürzen und Einsetzen von (4.20) liefert nach einigen Umformungen für die Compton-Verschiebung

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \varphi). \quad (4.25)$$

Bemerkungen:

- $\lambda_c = \frac{h}{mc} = 2,426 \cdot 10^{-12}$ m wird *Compton-Wellenlänge des Elektrons* genannt. Diese Compton-Wellenlänge des Elektrons entspricht der Compton-Verschiebung bei $\varphi = 90^\circ$. Sie hängt nur von der Masse des Streupartners des Photons und von Naturkonstanten ab.
- Die Compton-Verschiebung ist unabhängig von der Wellenlänge der einfallenden Strahlung. Die Compton-Verschiebung äussert sich also umso stärker, je kleiner die Wellenlänge der einfallenden Strahlung ist. Daher ist der Compton-Effekt auch kaum messbar für sichtbares Licht, jedoch wird der Effekt gross für Röntgen- oder Gammastrahlung.

4.2.4 Compton-Streuung und kohärente Streuung

Wie im Abschnitt 4.2.2 erwähnt, beobachtet man bei verfeinerten Experimenten im Streuspektrum ein Maximum nicht nur bei der verschobenen Wellenlänge λ' , sondern auch bei der Wellenlänge λ der direkten Strahlung. D.h. es findet neben der Compton-Streuung auch kohärente Streuung statt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Elektronen im Streukörper unterschiedlich stark gebunden sind oder genauer gesagt: Der Streukörper enthält verschiedene Typen von Elektronen:

- Quasifreie Elektronen (Leitungselektronen),
- schwach gebundene Elektronen (in den äusseren Schalen der Atome),
- stark gebundene Elektronen (in den inneren Schalen der Atome).

Ist nun das vom Photon angestossene Elektron so stark an ein Atom gebunden, dass die Energie, die ihm das Photon überträgt, nicht reicht, um es aus dem Atom zu reissen, findet keine Compton-Streuung, sondern im Wesentlichen kohärente Streuung statt. Oder in anderen Worten: Je grösser die Zahl der stark gebundenen Elektronen gegenüber der Zahl der schwach gebundenen Elektronen, desto dominanter die kohärente Streuung gegenüber der Compton-Streuung und umgekehrt.

Genauere Untersuchungen zeigen, dass man für das Verhältnis der Intensität der verschobenen Strahlung (Compton-Streuung) zur Intensität der unverschobenen Strahlung (kohärente Streuung) folgende Regel findet: Das Verhältnis nimmt zu mit

- a) abnehmendem Atomgewicht des Streukörpers,
- b) abnehmender Wellenlänge der einfallenden Strahlung,
- c) zunehmendem Streuwinkel.

Qualitativ lassen sich diese drei Beobachtungen folgendermassen erklären:

- a) Je kleiner das Atomgewicht ist, umso grösser ist der Bruchteil der Zahl der Elektronen, die schwach gebunden sind und beim Zusammenstoss als frei betrachtet werden können.
- b) Je höher die Wellenlänge und damit auch die Energie des einfallenden Photons ist, umso eher kann das gestossene Elektron als frei gelten.
- c) Je grösser der Streuwinkel ist, umso grösser ist die auf das Elektron übertragene Energie und umso eher kann die Bindung vernachlässigt werden.

4.2.5 Unterschied zwischen Photoeffekt und Compton-Effekt

Beim Compton-Effekt führt ein Photon einen vollelastischen Stoss mit einem quasifreien Elektron durch. Dabei gibt es einen Teil seiner Energie an das Elektron ab. Das gestreute Photon hat nach dem Stoss eine geringere Energie und damit auch geringere Frequenz als vor dem Stoss. Im Gegensatz dazu gibt beim Photoeffekt (siehe Kapitel 2) ein Photon seine ganze Energie an ein Elektron ab und verschwindet dabei. Der Impuls des Gesamtsystems aus Photon und Elektron kann unter diesen Umständen nicht erhalten bleiben und es muss demzufolge ein dritter Stosspartner (meist ein Atomkern) vorhanden sein, auf den ein Impuls übertragen werden kann. Der Photoeffekt kann nur bei gebundenen Elektronen auftreten.

4.3 Zusammenfassung

- Trifft eine elektromagnetische Welle auf einen Spiegel und wird von diesem absorbiert oder an ihm reflektiert, so übt die Welle auf den Spiegel einen Druck aus, den sogenannten Strahlungsdruck. Bei der Absorption entspricht der Strahlungsdruck der Energiedichte der elektromagnetischen Welle. Bei der Reflexion erhalten wir den doppelten Wert.

Mit dem Strahlungsdruck ist ein Impulsübertrag von der elektromagnetischen Welle an den Spiegel verbunden, was zur Erkenntnis führt, dass Lichtteilchen (Photonen) einen Impuls besitzen, welcher gegeben ist durch

$$p_\nu = \frac{h\nu}{c}. \quad (4.26)$$

Zwischen dem Impuls p_ν und der Energie $E_\nu = h\nu$ des Photons gilt der folgende Zusammenhang

$$E_\nu = cp_\nu. \quad (4.27)$$

- Bei der Streuung von Licht an einem Streukörper (z.B. Graphit oder Kupfer) erkennt man, dass das Spektrum der gestreuten Strahlung gegenüber der direkten (ungestreuten) Strahlung zu längeren Wellenlängen verschoben ist. Dieses Phänomen hat Arthur Holly Compton um 1922 entdeckt und wird deshalb Compton-Effekt genannt. Nach Compton rührte die auftretende Wellenlängenverschiebung (Compton-Verschiebung) daher, dass ein einfallendes Photon mit der Energie $h\nu$ und dem Impuls $h\nu/c$ elastisch mit einem Elektron des Streukörpers zusammenstößt und dabei einen Teil seiner Energie und seines Impulses verliert. Historisch gesehen war die Beobachtung des Compton-Effekts der erste experimentelle Nachweis des Impulses eines Photons. Mit Hilfe der Energie- und Impulserhaltung ergibt sich für die Compton-Verschiebung

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \varphi), \quad (4.28)$$

wobei λ die einfallende und λ' die gestreute Wellenlänge, m die Elektronenmasse und φ den Streuwinkel bezeichnen.

- Beim Compton-Effekt erfolgt ein vollelastischer Stoß zwischen einem Photon und einem quasifreien Elektron. Im Vergleich dazu gibt beim Photoeffekt ein Photon seine ganze Energie an ein gebundenes Elektron ab und verschwindet dabei. Aufgrund der Impulserhaltung muss demzufolge auch ein dritter Stoßpartner (meist ein Atomkern) vorhanden sein.

Kapitel 5

Wärmestrahlung

Jeder Körper bei einer endlichen Temperatur T emittiert elektromagnetische Strahlung. Typische Beispiele dafür sind heiße Körper, bei einigen 1000 K, wie die Sonne oder die Glühwendel einer Glühbirne, die Strahlung im sichtbaren Frequenzbereich emittieren. Aber auch kältere Objekte emittieren Strahlung: Zum Beispiel bei Raumtemperatur (300 K) vornehmlich Infrarotstrahlung oder nahe dem absoluten Nullpunkt der Temperaturskala (~ 4 K) Mikrowellenstrahlung. Daher spielt die allgegenwärtige thermische Strahlung eine wichtige Rolle in Wissenschaft und Technik.

Die elektromagnetische Strahlung entsteht dabei durch thermisch angeregte Schwingungen von Ladungen (Elektronen, Atomkerne, Ionen) im betrachteten Körper. In einem Festkörper sind die Schwingungen der vielen Freiheitsgrade (Größenordnung 10^{23}) sehr stark gekoppelt, was zu einem kontinuierlichen Strahlungsspektrum führt. Die Form des Strahlungsspektrums hängt, wie wir sehen werden, in guter Näherung nur von der Temperatur T und der Dimension (1D, 2D, 3D) des Körpers ab, nicht aber von seiner detaillierten Struktur oder seinen chemischen Eigenschaften. Um den Einfluss der Dimensionalität des Körpers auf das Spektrum zu untersuchen, werden wir zuerst relativ kalte eindimensionale (siehe Abschnitt 5.3) und dann heiße dreidimensionale Körper betrachten (siehe Abschnitt 5.4.7).

Zur Entwicklung der Quantenmechanik hat die Untersuchung der Wärmestrahlung wichtige Beiträge geliefert, da das charakteristische Spektrum der Strahlung mit klassischen Mitteln nicht korrekt beschrieben werden kann. Eine genaue Erklärung der Form des Spektrums wurde erst durch Max Planck um 1900 unter Beachtung der quantenmechanischen Eigenschaften des Lichts gefunden.

5.1 Hohlraumstrahlung - Strahlungsgleichgewicht

Wir betrachten einen Körper der Temperatur T in einem abgeschlossenen Hohlraum, dessen Wände elektromagnetische Strahlung jeder Frequenz unter jedem Winkel verlustfrei reflektieren (ideale Spiegel) (siehe Abb. 5.1 mit geschlossenem Shutter).

Trifft ein vom Körper emittierter Strahl nach einigen Reflexionen wieder auf

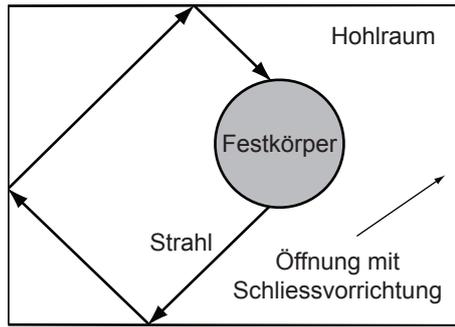


Abb. 5.1: Körper der Temperatur T in einem Hohlraum mit Vorrichtung zum Öffnen und Schliessen des Hohlraums.

den Körper und wird dort ganz oder teilweise absorbiert, so ist die emittierte gleich der absorbierten Strahlungsleistung und der Körper verändert seine Temperatur nicht. Dieser stationäre Zustand¹ wird als *Strahlungsgleichgewicht* bezeichnet. Dabei hat das elektromagnetische Feld im Hohlraum eine *spektrale Energiedichte*² $u(\nu)$, die nur von der Temperatur abhängt. Für die Strahlungsenergie pro Volumen im Frequenzbereich zwischen ν und $\nu + d\nu$ gilt (für genauere Ausführungen wird auf weiterführende Literatur [2] verwiesen)

$$u(\nu)d\nu = \frac{1}{2} \left(\vec{E}\vec{D} + \vec{H}\vec{B} \right) = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2}\frac{B^2}{\mu_0} = \epsilon_0 E^2, \quad (5.1)$$

wobei wir verwendet haben, dass für die elektrische Feldstärke \vec{E} , die elektrische Flussdichte \vec{D} , die magnetische Feldstärke \vec{H} und die magnetische Flussdichte \vec{B} (im Vakuum) die folgenden Zusammenhänge gelten $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$, $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ und $B/E = \sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$. Weiter erfüllt die Hohlraumstrahlung die folgenden Eigenschaften:

- Die Verteilung der Strahlungsenergie ist *homogen*, d.h. sie ist ortsunabhängig.
- Die Verteilung der Strahlungsenergie ist *isotrop*, d.h. sie hängt nicht von der betrachteten Raumrichtung ab.

Zusammenfassend können wir sagen:

Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ der Hohlraumstrahlung ist homogen und isotrop und hängt nur von der Frequenz ν und der Temperatur T ab.

5.2 Der schwarze Strahler

Ein idealer schwarzer Strahler ist ein Körper, der sämtliche auftreffende elektromagnetische Strahlung jeder Frequenz vollständig absorbiert (Absorptionskoeffizient $A(\nu) = 1$) und nichts reflektiert (Reflexionskoeffizient $R(\nu) = 0$).

¹Ein von der zeitlichen Änderung unabhängiger Zustand wird als stationär bezeichnet.

²Unter der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ eines elektromagnetischen Feldes versteht man die Strahlungsenergie pro Volumen V und Frequenzintervall $d\nu$ oder in anderen Worten: $u(\nu)d\nu$ ist die Strahlungsenergie pro Volumen im Frequenzbereich zwischen ν und $\nu + d\nu$.

Diese idealisierte Betrachtung ist in der Natur nur näherungsweise realisiert, da bei realen Körpern die Absorption und Reflexion typischerweise eine merkbare Frequenzabhängigkeit zeigt. Trotzdem lassen sich die charakteristischen Eigenschaften von thermischen Strahlern unter dieser Näherung gut beschreiben.

Unter der Annahme, dass ein idealer schwarzer Strahler realisiert ist, gehen Materialeigenschaften nicht in dessen spektrale Energiedichte $u(\nu)$ ein und $u(\nu)$ hängt nur von der Temperatur ab und ist zudem homogen und isotrop.

Ein weitgehend idealer schwarzer Körper lässt sich gut durch den in Abschnitt 5.1 besprochenen Hohlraum realisieren. Wenn wir den Hohlraum mit einer kleinen Öffnung versehen (siehe Abb. 5.1), können wir die austretende Strahlung nutzen, um die Energiedichte der Strahlung innerhalb des Körpers zu charakterisieren. Dabei soll die Öffnung so klein sein, dass sich die Energiedichte im Hohlraum nicht oder nur sehr langsam ändert. Gleichzeitig kann von aussen eintretende Strahlung die Energie im Hohlraum nur geringfügig ändern.

5.3 Der eindimensionale schwarze Strahler

Zunächst berechnen wir die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ eines eindimensionalen schwarzen Strahlers. Dieser Fall ist besonders einfach und lässt uns erste Einsichten in die Eigenschaften der thermischen Strahlung gewinnen.

Wir betrachten ein Rohr der Länge $L \gg \lambda$ mit Durchmesser $D \ll \lambda$ bei einer festen Temperatur T (siehe Abb. 5.2). Alle Berechnungen, die wir im folgenden anstellen werden, sind nur solange korrekt, als dass die betrachteten Wellenlängen λ diese Bedingungen erfüllen. Ein solcher eindimensionaler schwarzer Strahler ist zum Beispiel realisiert, wenn man ein typisches Koaxialkabel mit $D = 2.2 \text{ mm}$ und einigen Metern Länge auf Temperaturen von flüssigem Helium $T \sim 4.2 \text{ K}$ abkühlt. Am Ende eines solchen Kabels lässt sich dann das Schwarzkörperspektrum der thermischen Strahlung messen.

Die Energie innerhalb des eindimensionalen schwarzen Strahlers wird in elektromagnetischen Eigenschwingungen (Moden) gespeichert. Zur Berechnung der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ werden wir nun folgendermassen vorgehen: Wir bestimmen die Form der Eigenschwingungen (Moden), ihre Anzahl und die Energie pro Mode und daraus die spektrale Energiedichte.

5.3.1 Modenstruktur (Eigenschwingungen) eines 1D Körpers

Zur Bestimmung der Eigenschwingungen ist die Wellengleichung für die elektrische Feldstärke E in einer Dimension zu lösen

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} E(x, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E(x, t)}{\partial t^2}. \quad (5.2)$$

Wir setzen für die elektrische Feldstärke $E(x, t)$ stehende, harmonische Wellen an $E(x, t) = E(x) e^{i\omega t}$ und erhalten daraus Lösungen der Form $E(x) \propto \sin(kx)$

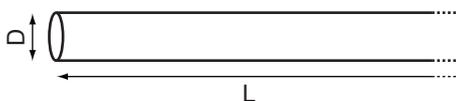


Abb. 5.2: Rohr der Länge L mit Durchmesser $D \ll \lambda$.

mit der Dispersionsrelation $k = \omega/c$, wobei k der Wellenzahl entspricht. Mit den Randbedingungen $E(0) = 0$ und $E(L) = 0$ erhalten wir die Resonanzbedingung

$$kL = j \cdot \pi \text{ mit Modenindex } j \in \mathbb{N} \ (\Delta j = 1). \quad (5.3)$$

Mit Hilfe der Dispersionsrelation $k = \omega/c$ und den Beziehungen $\omega = 2\pi\nu$ und $\lambda\nu = c$ ergibt sich

$$j \frac{\lambda_j}{2} = L \text{ mit } j \in \mathbb{N} \ (\Delta j = 1), \quad (5.4)$$

wobei die Wellenlänge mit dem Index j versehen wird, um darauf hinzuweisen, dass die Wellenlänge vom Modenindex abhängt. Entsprechend erhalten wir für die j -abhängige Frequenz ν_j

$$\nu_j = \frac{c}{2L} j \text{ mit } j \in \mathbb{N}. \quad (5.5)$$

Dabei ist der Frequenzabstand zwischen benachbarten Moden konstant

$$\Delta\nu = \nu_{j+1} - \nu_j = \frac{c}{2L}. \quad (5.6)$$

Das *Modenspektrum* (siehe Abb. 5.3(b)) besteht also aus einer unendlichen Folge von äquidistanten Moden.

5.3.2 Anzahl der möglichen Moden

Die Anzahl der Moden $G(\nu)$ im Frequenzbereich zwischen zwischen 0 und der maximalen Frequenz ν ergibt sich durch Division von ν durch den Frequenzabstand der Moden (5.6)

$$G(\nu) = \frac{\nu}{\Delta\nu} = \frac{2L}{c} \nu. \quad (5.7)$$

Die Anzahl der Moden $G(\nu)$ ist also linear in der Frequenz ν . Daraus erhalten wir für die spektrale Modendichte $g(\nu)$ ($g(\nu)d\nu$ ist die Anzahl der Moden im Frequenzbereich zwischen ν und $\nu + d\nu$)

$$g(\nu) = \frac{\partial G(\nu)}{\partial \nu} = \frac{2L}{c}. \quad (5.8)$$

Wir erhalten also in einer Dimension eine konstante spektrale Modendichte, d.h. gleich viele Moden in jedem Frequenzintervall.

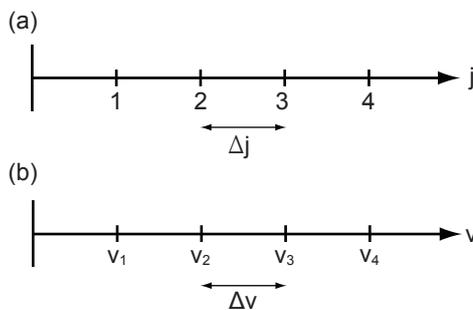


Abb. 5.3: (a) Modenindex j . (b) Modenspektrum.

5.3.3 Spektrale Energiedichte

Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ lässt sich nun berechnen, indem die spektrale Modendichte $g(\nu)$ mit der Energie pro Mode ϵ multipliziert und durch die Länge des Rohrs L dividiert wird.

Klassische Energie pro Mode

Klassisch ist die Energie pro Mode ϵ statistisch durch das *Äquipartitionsprinzip* bestimmt, das besagt, dass im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T im Mittel jeder Freiheitsgrad die Energie $1/2k_{\text{B}}T$ besitzt. Wenn wir pro Mode 2 Freiheitsgrade (horizontale und vertikale Polarisation der elektromagnetischen Strahlung) betrachten, ergibt sich pro Mode eine Energie von

$$\epsilon = k_{\text{B}}T. \quad (5.9)$$

Rayleigh-Jeans-Gesetz und die Ultraviolett katastrophe

Somit ergibt sich mit (5.8) und (5.9) eine konstante frequenzunabhängige Energiedichte

$$u(\nu) = \frac{g(\nu) \cdot \epsilon}{L} = \frac{\frac{2L}{c} \cdot k_{\text{B}}T}{L} = \frac{2}{c} k_{\text{B}}T. \quad (5.10)$$

Dies ist das *Rayleigh-Jeans-Gesetz* in einer Dimension. Es steht jedoch im Widerspruch mit den experimentellen Beobachtungen: Das Integral $\int_0^\infty u(\nu) d\nu$ über das gesamte Spektrum, d.h. die Gesamtenergiedichte, divergiert. Dieses theoretische Phänomen wurde von Paul Ehrenfest als *Ultraviolett katastrophe* bezeichnet. Man kann zeigen, dass die Ultraviolett katastrophe nicht eine spezifische Eigenschaft des Modells ist, das wir hier betrachtet haben. Der Grund der Ultraviolett katastrophe liegt vielmehr in der Annahme der Äquipartition, die aus der klassischen Mechanik folgt und zum Beispiel für die Moleküle eines Gases im thermischen Gleichgewicht gilt.

Experimentell bestimmte spektrale Energiedichte

Schon um 1896 herum existierten genaue Messungen der spektralen Energiedichte, die von heißen Körpern emittiert wird (Otto Lummer und Wilhelm Wien). Das Rayleigh-Jeans-Gesetz stimmt mit den Resultaten für sehr tiefe Frequenzen gut überein, versagt aber für hohe Frequenzen.

5.3.4 Bestimmung der spektralen Energiedichte nach Planck

In den Jahren unmittelbar vor der Jahrhundertwende gelangte Planck zu einer Theorie, welche die von Lummer gemessene spektrale Energiedichte erklären konnte. Sie beruht auf zwei grundlegenden Erkenntnissen:

1. Jede elektromagnetische Welle kann Energie nur in festen Quanten der Energie $\epsilon_{\text{photon}} = h\nu$ aufnehmen, wobei $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js das Planck'sche Wirkungsquantum ist.

2. Die Besetzungswahrscheinlichkeit einer Mode mit Photonen, den Quanten des Lichts, ist durch die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion (siehe Abb. 5.4(a)) gegeben

$$f(\nu) = \frac{1}{e^{h\nu/k_{\text{B}}T} - 1}. \quad (5.11)$$

Die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion gilt, wie wir später erklären werden, für Bosonen, d.h. Teilchen mit ganzzahligem Spin, zu denen das Photon gehört.

Für die quantenmechanische Energie pro Mode erhalten wir daher

$$\epsilon_{\text{QM}} = \epsilon_{\text{Photon}} \cdot f(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_{\text{B}}T} - 1}. \quad (5.12)$$

Daraus ergibt sich nun die spektrale Energiedichte $u(\nu)$, das *Plancksche Strahlungsgesetz in einer Dimension* (siehe Abb. 5.4(b))

$$u(\nu) = \frac{g(\nu) \cdot \epsilon_{\text{QM}}}{L} = \frac{\frac{2L}{c} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_{\text{B}}T} - 1}}{L} = \frac{2}{c} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_{\text{B}}T} - 1}. \quad (5.13)$$

Grenzfälle der spektralen Energiedichte

Als nächstes betrachten wir Grenzfälle der spektralen Energiedichte bei kleinen Frequenzen bzw. hohen Temperaturen ($h\nu \ll k_{\text{B}}T$) und bei hohen Frequenzen bzw. kleinen Temperaturen ($h\nu \gg k_{\text{B}}T$).

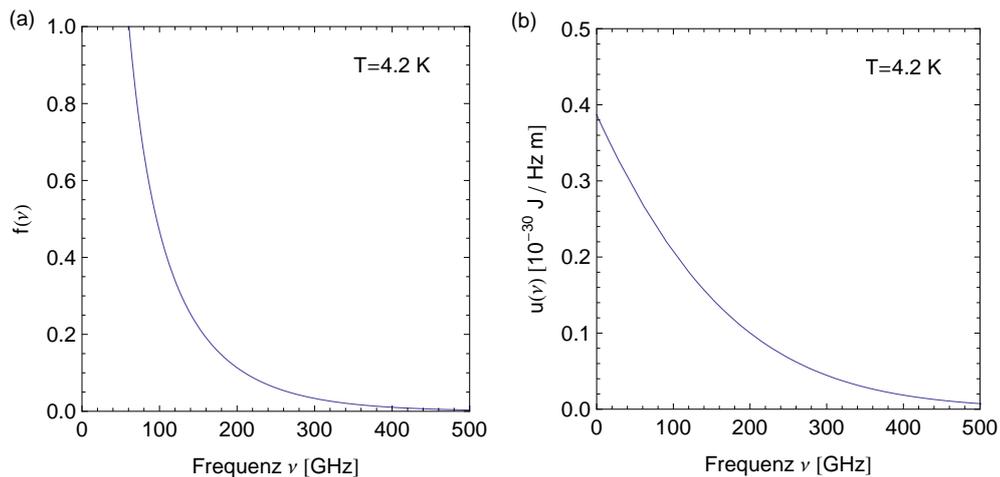


Abb. 5.4: (a) Die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion $f(\nu)$ als Funktion der Frequenz ν bei einer festen Temperatur von 4.2 K. (b) Das Plancksche Strahlungsgesetz in einer Dimension: Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ als Funktion der Frequenz ν bei einer festen Temperatur von 4.2 K.

Spektrale Energiedichte bei kleinen Frequenzen bzw. hohen Temperaturen ($h\nu \ll k_B T$)

Unter der Bedingung $h\nu \ll k_B T$ lässt sich die Exponentialfunktion in eine Taylorreihe entwickeln

$$e^{h\nu/k_B T} \sim 1 + \frac{h\nu}{k_B T} + \dots \quad (5.14)$$

Daraus erhalten wir die für eindimensionale Körper charakteristische konstante Energiedichte

$$u(\nu) = \frac{2}{c} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \sim \frac{2}{c} \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1} = \frac{2}{c} k_B T. \quad (5.15)$$

Wir erhalten also für kleine Frequenzen bzw. hohe Temperaturen aus dem Planckschen Strahlungsgesetz das bekannte Rayleigh-Jeans-Gesetz (1D) zurück. Offenbar ist die klassische Theorie als Grenzfall in der Planckschen Theorie enthalten.

Spektrale Energiedichte bei hohen Frequenzen bzw. kleinen Temperaturen ($h\nu \gg k_B T$)

Für $h\nu \gg k_B T$ gilt $e^{h\nu/k_B T} \gg 1$, was zur folgenden Näherung führt (Wiensches Strahlungsgesetz (1D))

$$u(\nu) = \frac{2}{c} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \sim \frac{2}{c} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T}} = \frac{2}{c} h\nu e^{-h\nu/k_B T}. \quad (5.16)$$

D.h. die Energiedichte fällt exponentiell mit steigender Frequenz. Dieser Effekt ist durch die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion begründet, die die Besetzung von Moden bei hohen Frequenzen exponentiell unterdrückt, was insbesondere das Auftreten der Ultraviolett Katastrophe verhindert.

In Abb. 5.5(a) ist das Plancksche Strahlungsgesetz zusammen mit den Grenzfällen Rayleigh-Jeans-Gesetz und Wiensches Strahlungsgesetz für einen eindimensionalen schwarzen Strahler dargestellt.

5.3.5 Das Stefan-Boltzmann-Gesetz (1D)

Die Gesamtenergiedichte des schwarzen Strahlers pro Länge u erhalten wir durch Integration der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ über das Spektrum, d.h. über den gesamten Frequenzbereich. Mit (5.13) ergibt sich:

$$\begin{aligned} u &= \int_0^\infty u(\nu) d\nu = \int_0^\infty \frac{2}{c} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu \\ &= \frac{2}{c} (k_B T)^2 \frac{1}{h} \int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{hc} T^2, \end{aligned} \quad (5.17)$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass $\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \pi^2/6$. Wir erhalten somit für die Gesamtenergiedichte u ein Ergebnis, das nur von der

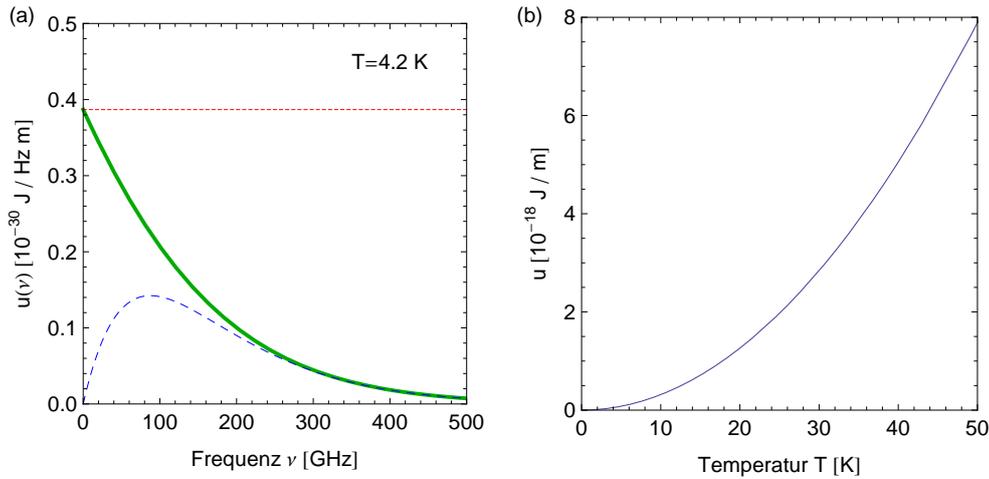


Abb. 5.5: (a) Das Plancksche Strahlungsgesetz (grüne Linie) zusammen mit den Grenzfällen Rayleigh-Jeans-Gesetz (rote feingestrichelte Linie) und Wiensches Strahlungsgesetz (blaue grobestrichelte Linie) in einer Dimension: Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ als Funktion der Frequenz ν bei einer festen Temperatur von 4.2 K. (b) Das Stefan-Boltzmann-Gesetz in einer Dimension: Die Gesamtenergiedichte u als Funktion der Temperatur T .

Temperatur T abhängt. Dieses Gesetz wird *Stefan-Boltzmann-Gesetz (1D)* genannt. In Abb. 5.5(b) ist die charakteristische quadratische Abhängigkeit der Gesamtstrahlungsleistung von der Temperatur des Körpers dargestellt. Man bemerke, dass die Gesamtstrahlungsleistung ausser von der Temperatur nur von Naturkonstanten abhängt.

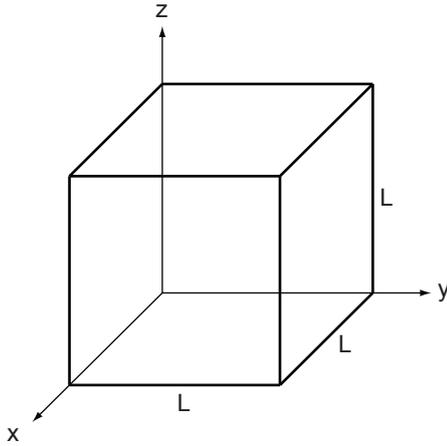
5.4 Der dreidimensionale schwarze Strahler

Analog zum eindimensionalen schwarzen Strahler (siehe Abschnitt 5.3) berechnen wir nun die spektrale Energiedichte für den dreidimensionalen Fall. Der dreidimensionale Fall beschreibt alle Körper deren Abmessungen in allen drei Raumrichtungen viel grösser sind als die betrachteten Wellenlängen. Dieser Fall ist bei Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur quasi für alle Objekte erfüllt. Insbesondere beschreiben die in diesem Abschnitt berechneten Eigenschaften des dreidimensionalen schwarzen Strahlers das Spektrum der Sonne und anderer heisser Objekte.

Wir betrachten einen würfelförmigen Hohlraum der Kantenlänge L (siehe Abb. 5.6). Die Vorgehensweise ist analog zu der im eindimensionalen, weshalb wir auf einige Herleitungen verzichten werden.

5.4.1 Moden des 3D Körpers

Analog zum eindimensionalen Fall erhalten wir als Resonanzbedingung für eine stehende Welle entlang einer der drei Raumrichtungen $k_i L = j_i \cdot \pi$ mit Moden-

Abb. 5.6: Würfelförmiger Hohlraum der Kantenlänge L .

index $j_i \in \mathbb{N}$ ($\Delta j_i = 1$) und $i = x, y, z$, wobei k_i der Wellenzahl entlang einer Dimension entspricht. Für eine stehende Welle entlang einer beliebigen Richtung ergibt sich die Resonanzbedingung³

$$j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 k^2 = \left(\frac{2L}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{2\nu L}{c}\right)^2, \quad (5.18)$$

wobei $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ der Wellenvektor ist und wir analog zum eindimensionalen Fall zur Umformung die Beziehungen $\omega = ck$ (Dispersionsrelation), $\omega = 2\pi\nu$ und $\lambda\nu = c$ verwendet haben.

5.4.2 Anzahl der möglichen Moden

Zur Berechnung der Anzahl der möglichen Moden betrachten wir den Raum der ganzen positiven Zahlen $\{j_x, j_y, j_z\}$ (siehe Abb. 5.7). Der Abstand des Gitterpunktes (j_x, j_y, j_z) vom Ursprung beträgt unter Verwendung von (5.18)

$$j = (j_x^2 + j_y^2 + j_z^2)^{1/2} = \frac{2\nu L}{c}. \quad (5.19)$$

Die Anzahl Moden deren Frequenz zwischen 0 und ν liegt, entspricht somit der doppelten⁴ Anzahl der Gitterpunkte innerhalb eines Kugeloktanten⁵ vom Radius $2\nu L/c$. Für den grössten Teil der von einem schwarzen Körper emittierten Strahlung sind die Frequenzen ν sehr gross im Vergleich zur Kantenlänge L , d.h. $2\nu L/c \gg 1$.

³Für eine genaue Herleitung der Resonanzbedingung in drei Dimensionen entlang einer beliebigen Richtung ist (analog zum eindimensionalen Fall) die Wellengleichung für die elektrische Feldstärke in drei Dimensionen unter entsprechenden Randbedingungen zu lösen.

⁴Zu jedem Zahlentripel (j_x, j_y, j_z) gehört ein Wellenvektor \vec{k} . Die elektrische Feldstärke \vec{E} liegt in einer Normalebene zu \vec{k} und hat somit bei gegebenem \vec{k} zwei unabhängige Komponenten, d.h. zu jedem Zahlentripel (j_x, j_y, j_z) gehören zwei unabhängige stehende Wellen (Moden), die den in 3 Dimensionen möglichen zwei Polarisationen der Strahlung entsprechen.

⁵Ein Kugeloktant entspricht einem 1/8 einer Kugel. Dieser Faktor ergibt sich aus der Tatsache, dass j_x, j_y, j_z nur positive Werte annehmen können.

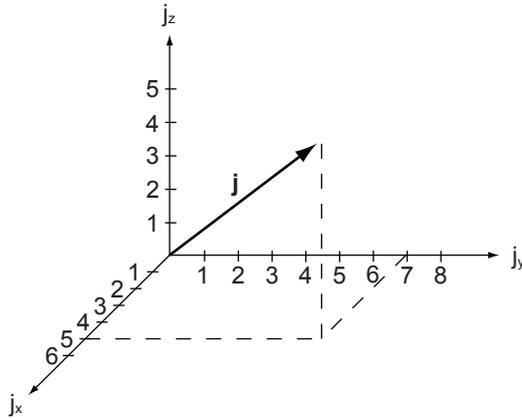


Abb. 5.7: Raum der ganzen positiven Zahlen $\{j_x, j_y, j_z\}$.

Die Zahlen j_x, j_y, j_z sind damit so gross, dass das Zahlengitter als Kontinuum betrachtet werden kann. Damit erhalten wir für die Anzahl der Moden $G(\nu)$ im Frequenzbereich zwischen 0 und ν

$$G(\nu) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \underbrace{\frac{4\pi}{3} j^3}_{\text{Kugelvolumen}} = \frac{\pi}{3} \left(\frac{2L}{c} \right)^3 \nu^3. \quad (5.20)$$

Daraus ergibt sich für die spektrale Modendichte $g(\nu)$ ($g(\nu)d\nu$ ist die Anzahl der Moden im Frequenzbereich zwischen ν und $\nu + d\nu$)

$$g(\nu) = \frac{\partial G(\nu)}{\partial \nu} = 8\pi \frac{L^3}{c^3} \nu^2. \quad (5.21)$$

Wir erhalten somit in drei Dimensionen eine spektrale Modendichte, die quadratisch von der Frequenz abhängt (siehe Abb. 5.8(a)). Je höher die betrachtete Frequenz wird, desto grösser wird die Anzahl der Moden. Die zusätzlichen Moden liegen im Raum der Modenindizes auf eine Kugelschale deren Oberfläche quadratisch mit der Frequenz steigt und so die charakteristisch anwachsende Modenzahl bestimmt.

5.4.3 Spektrale Energiedichte

Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$, d.h. das *Plancksche Strahlungsgesetz in drei Dimensionen*, ergibt sich nun aus der Multiplikation der spektralen Modendichte $g(\nu)$ mit der Energie pro Mode ϵ_{QM} dividiert durch das Volumen des Körpers L^3 . Unter Verwendung von (5.12) und (5.21) ergibt sich (siehe Abb. 5.8(b))

$$u(\nu) = \frac{g(\nu) \cdot \epsilon_{\text{QM}}}{L^3} = \frac{8\pi L^3 \nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (5.22)$$

Grenzfälle der spektralen Energiedichte

Wie im eindimensionalen Fall untersuchen wir das Grenzverhalten der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ bei kleinen Frequenzen bzw. hohen Temperaturen ($h\nu \ll k_B T$) und bei hohen Frequenzen bzw. kleinen Temperaturen ($h\nu \gg k_B T$).

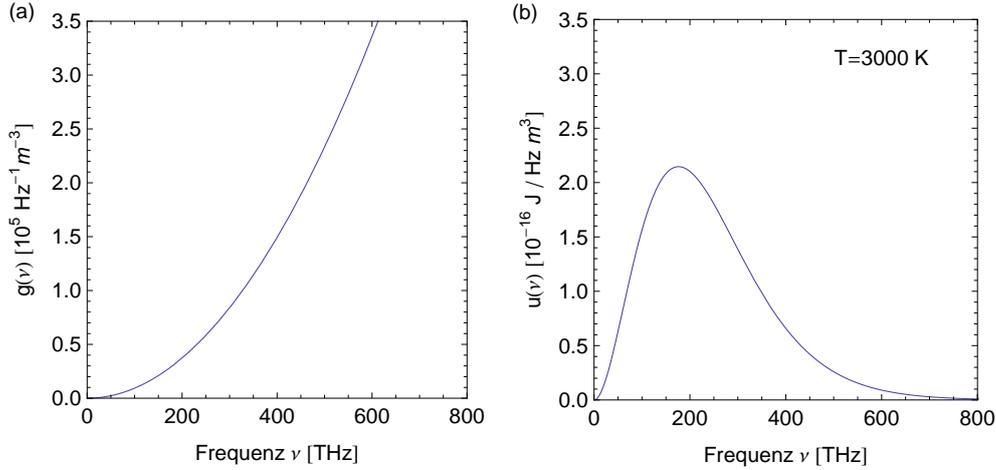


Abb. 5.8: (a) Spektrale Modendichte in drei Dimensionen. (b) Das Plancksche Strahlungsgesetz in drei Dimensionen: Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ als Funktion der Frequenz ν bei einer festen Temperatur von 3000 K.

Kleine Frequenzen bzw. hohe Temperaturen ($h\nu \ll k_B T$)

Mit der Entwicklung (5.14) erhalten wir aus (5.22) das Rayleigh-Jeans-Gesetz (3D)

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \sim \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1} = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T. \quad (5.23)$$

Hier zeigt sich der charakteristische quadratische Anstieg der Energiedichte mit ν bei niedrigen Frequenzen.

Hohe Frequenzen bzw. kleine Temperaturen ($h\nu \gg k_B T$)

Mit $e^{h\nu/k_B T} \gg 1$ ergibt sich aus (5.22) das Wiensche Strahlungsgesetz (3D)

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \sim \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}, \quad (5.24)$$

das auch in diesem Fall auf Grund der Bose-Einstein-Verteilung eine für hohe Frequenzen exponentiell abfallende Energiedichte zeigt.

In Abb. 5.9(a) ist das Plancksche Strahlungsgesetz zusammen mit den Grenzfällen Rayleigh-Jeans-Gesetz und Wiensches Strahlungsgesetz für einen dreidimensionalen schwarzen Strahler dargestellt.

5.4.4 Das Stefan-Boltzmann-Gesetz (3D)

Nun berechnen wir wie im eindimensionalen Fall aus der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ das Stefan-Boltzmann-Gesetz in drei Dimensionen. Die Gesamtenergiedichte u des schwarzen Strahlers pro Volumen erhalten wir dabei wieder durch

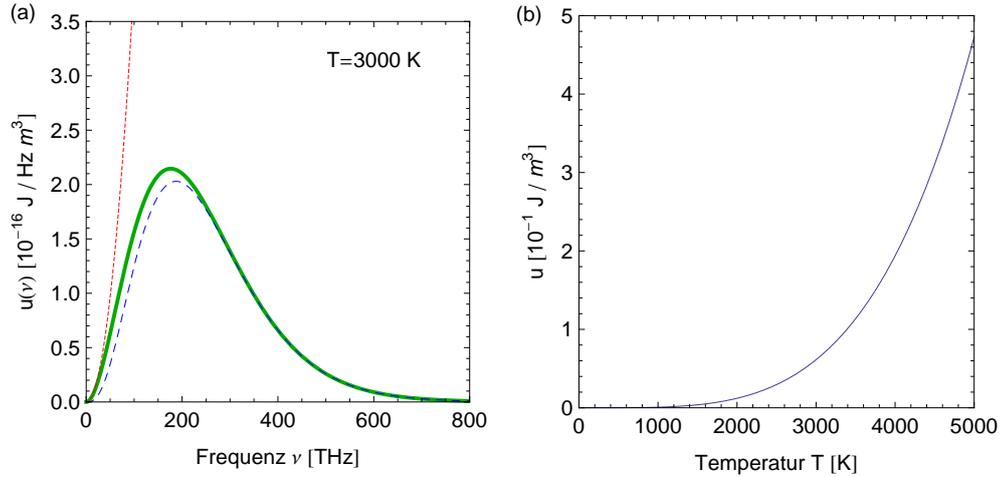


Abb. 5.9: (a) Das Plancksche Strahlungsgesetz (grüne Linie) zusammen mit den Grenzfällen Rayleigh-Jeans-Gesetz (rote feingestrichelte Linie) und Wiensches Strahlungsgesetz (blaue grobestrichelte Linie) in drei Dimensionen: Die spektrale Energiedichte $u(\nu)$ als Funktion der Frequenz ν bei einer festen Temperatur von 3000 K. (b) Das Stefan-Boltzmann-Gesetz in drei Dimensionen: Die Gesamtenergiedichte u als Funktion der Temperatur T .

Integration der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ über das Spektrum, d.h. über den gesamten Frequenzbereich. Mit (5.22) ergibt sich (siehe Abb. 5.9(b))

$$\begin{aligned} u &= \int_0^\infty u(\nu) d\nu = \int_0^\infty \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu \\ &= \frac{8\pi k_B^4}{c^3 h^3} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = aT^4 \quad \text{mit } a = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \pi^4/15$. Somit erhalten wir, dass die Gesamtenergiedichte u eines dreidimensionalen schwarzen Strahlers proportional zu T^4 ist und wie bereits diskutiert von keinen weiteren Eigenschaften des Körpers abhängt.

5.4.5 Das Wiensche Verschiebungsgesetz

Das Wiensche Verschiebungsgesetz gibt an bei welcher Wellenlänge λ_{\max} ein nach dem Planckschen Strahlungsgesetz (5.22) strahlender schwarzer Körper in Abhängigkeit seiner Temperatur T die maximale Strahlung emittiert. Wir haben bisher die Energiedichte $u(\nu)d\nu$ eines schwarzen Strahlers als Funktion der Frequenz betrachtet. Zur Bestimmung von λ_{\max} benötigen wir die Energiedichte als Funktion der Wellenlänge. Zur Umschreibung nutzen wir die Beziehung $\lambda\nu = c$ und erhalten aus (5.22) für die Energiedichte $u(\lambda)d\lambda$, d.h. die Strahlungsenergie pro Volumen V im Wellenlängenbereich zwischen λ und $\lambda + d\lambda$

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu \rightarrow u(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/k_B T\lambda} - 1} d\lambda. \quad (5.26)$$

Das Maximum erhalten wir nun aus der Bedingung

$$\frac{du(\lambda)}{d\lambda} = 0. \quad (5.27)$$

Für die Ableitung nach der Wellenlänge erhalten wir

$$\frac{du(\lambda)}{d\lambda} = 8\pi hc \left(\frac{-5}{\lambda^6} \frac{1}{e^{hc/k_B T \lambda} - 1} + \frac{1}{\lambda^5} \frac{e^{hc/k_B T \lambda} \frac{hc}{k_B T \lambda^2}}{(e^{hc/k_B T \lambda} - 1)^2} \right). \quad (5.28)$$

Nullsetzen und Multiplikation mit $\left(\frac{8\pi hc}{\lambda^6} \frac{1}{e^{hc/k_B T \lambda} - 1} \right)^{-1}$ ergibt

$$-5 + \frac{e^{hc/k_B T \lambda} \frac{hc}{k_B T \lambda}}{e^{hc/k_B T \lambda} - 1} = 0. \quad (5.29)$$

Mit der Abkürzung $x = \frac{hc}{k_B T \lambda}$ folgt

$$x = 5(1 - e^{-x}). \quad (5.30)$$

Diese transzendente Gleichung hat neben der Lösung $x = 0$ die für uns interessante Lösung $x = 4.965$. Daraus ergibt sich das *Wiensche Verschiebungsgesetz*

$$\frac{hc}{k_B T \lambda_{\max}} = 4.965 \rightarrow \lambda_{\max} T = \frac{hc}{4.965 k_B} = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}. \quad (5.31)$$

In analoger Weise kann man das Wiensche Verschiebungsgesetz auch für die Frequenz berechnen, d.h. die Frequenz ν_{\max} bestimmen für die ein nach dem Planckschen Strahlungsgesetz (5.22) strahlender schwarzer Körper in Abhängigkeit seiner Temperatur T die maximale Strahlung emittiert

$$\frac{h\nu_{\max}}{k_B T} = 2.8214 \rightarrow \frac{\nu_{\max}}{T} = \frac{2.8214 k_B}{h} = 5.88 \cdot 10^{10} \text{ Hz/K}. \quad (5.32)$$

In Abb. 5.10 ist das Plancksche Strahlungsgesetz gemeinsam mit seinen Grenzfällen (Rayleigh-Jeans-Gesetz und Wiensches Strahlungsgesetz) aufgetragen (siehe Abb. 5.9) und zusätzlich dazu das Wiensche Verschiebungsgesetz, das das Maximum des Planckschen Strahlungsgesetzes angibt.

5.4.6 Emittierte Strahlungsleistung eines schwarzen Körpers

Bisher haben wir die spektrale Energiedichte des elektromagnetischen Feldes in einem schwarzen Strahler betrachtet und dafür das Plancksche Strahlungsgesetz (5.22) erhalten. Das Ziel ist es nun die gesamte von einem schwarzen Strahler emittierte Strahlungsleistung P zu bestimmen. Dazu repetieren wir kurz die Definition der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ und definieren darauf aufbauend weitere Begriffe und schlussendlich die Strahlungsleistung P .

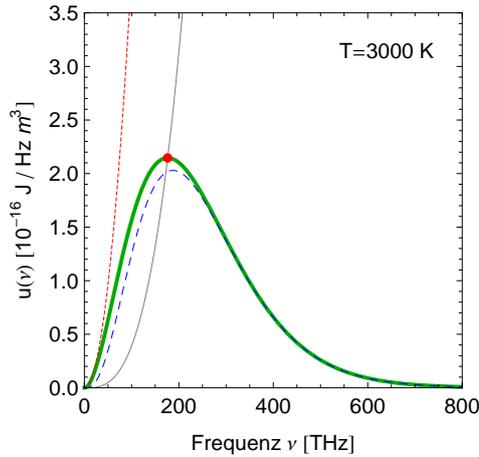


Abb. 5.10: Das Plancksche Strahlungsgesetz (grüne dicke Linie) zusammen mit den Grenzfällen Rayleigh-Jeans-Gesetz (rote feingestrichelte Linie) und Wiensches Strahlungsgesetz (blaue grobgestrichelte Linie), sowie dem Wienschen Verschiebungsgesetz (roter Punkt) in drei Dimensionen. Die graue feine Linie zeigt den Maximumsverlauf des Planckschen Strahlungsgesetzes für verschiedene Temperaturen nach dem Wienschen Verschiebungsgesetz.

Definitionen (siehe Abb. 5.11).

1. *Spektrale Energiedichte* $u(\nu)$ ($[u(\nu)] = \text{Js}/\text{m}^3$)
Strahlungsenergie pro Volumen V und Frequenzintervall $d\nu$.
2. *Energiedichte* $u(\nu)d\nu$ ($[u(\nu)d\nu] = \text{J}/\text{m}^3$)
Strahlungsenergie pro Volumen V im Frequenzbereich zwischen ν und $\nu + d\nu$.
3. *Gesamtenergiedichte* u ($[u] = \text{J}/\text{m}^3$)
Energiedichte $u(\nu)d\nu$ integriert über den gesamten Frequenzbereich.
4. *Emittierte Energie* $E_{d\nu d\Omega dA dt}(\nu)$ ($[E_{d\nu d\Omega dA dt}(\nu)] = \text{J}$)
Die von einem Flächenelement dA eines schwarzen Strahlers in einem Zeitintervall dt in das Raumwinkelelement $d\Omega$ unter einem Winkel ϑ zur Flächennormalen im Frequenzbereich zwischen ν und $\nu + d\nu$ emittierte Energie.
5. *Emittierte Leistung* $P_{d\nu d\Omega dA}(\nu)$ ($[P_{d\nu d\Omega dA}(\nu)] = \text{W}$)
Emittierte Energie $E_{d\nu d\Omega dA dt}(\nu)$ pro Zeitintervall dt .
6. *Gesamte Strahlungsleistung* P_{dA} eines Flächenelements dA ($[P_{dA}] = \text{W}$)
Emittierte Leistung $P_{d\nu d\Omega dA}(\nu)$ integriert über den gesamten Frequenzbereich und den Raumwinkel.
7. *Gesamte Strahlungsleistung eines schwarzen Strahlers* P ($[P] = \text{W}$)
Gesamte Strahlungsleistung P_{dA} eines Flächenelements dA integriert über die Fläche des schwarzen Strahlers.

Als erstes berechnen wir die emittierte Energie $E_{d\nu d\Omega dA dt}(\nu)$ aus der Ener-

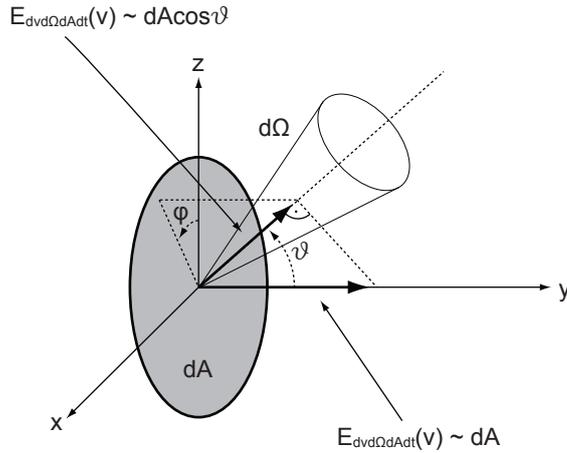


Abb. 5.11: Illustration zu den Definitionen und zum Lambert'schen Gesetz.

giedichte $u(\nu)d\nu$. Der Zusammenhang ist der folgende

$$E_{d\nu d\Omega dA dt}(\nu) = \underbrace{u(\nu)d\nu}_{\text{Energiedichte}} \cdot \underbrace{c}_{\text{Ausbreitungsgeschwindigkeit}} \cdot \underbrace{dt}_{\text{Zeitintervall}} \cdot \underbrace{\frac{d\Omega}{4\pi}}_{\text{Raumwinkelanteil}} \cdot \underbrace{dA_{\perp}}_{\text{„projizierte Fläche“}}, \quad (5.33)$$

wobei für das projizierende Flächenelement dA_{\perp} gilt

$$dA_{\perp} = dA \cos \vartheta. \quad (5.34)$$

Dies folgt aus dem Lambert'schen Gesetz, das besagt, dass die unter einem Winkel ϑ von einem Flächenelement dA emittierte Energie proportional zu $\cos \vartheta$ ist oder in anderen Worten ausgedrückt: Nur die zur Ausbreitungsrichtung senkrechte Komponente des Flächenelements dA ist relevant (siehe Abb. 5.11). Daraus ergibt sich für die emittierte Leistung $P_{d\nu d\Omega dA}(\nu)$

$$P_{d\nu d\Omega dA}(\nu) = \frac{E_{d\nu d\Omega dA dt}(\nu)}{dt} = u(\nu)d\nu c \frac{d\Omega}{4\pi} dA \cos \vartheta. \quad (5.35)$$

Um nun die gesamte Strahlungsleistung eines Flächenelement dA zu berechnen, integrieren wir über den gesamten Frequenzbereich und den Raumwinkel. Ein Flächenelement kann nicht in den vollen, sondern nur in den halben Raumwinkel strahlen, weshalb nur über den halben Raum integriert wird. Dabei verwenden wir, dass der Raumwinkel gegeben ist durch $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$.

$$\begin{aligned} P_{dA} &= \int_{\nu} \int_{\vartheta} \int_{\varphi} P_{d\nu d\Omega dA}(\nu) \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} u(\nu) c \cos \vartheta \frac{\sin \vartheta d\varphi d\vartheta}{4\pi} d\nu dA \\ &= \underbrace{\int_0^{\infty} u(\nu)d\nu}_{=aT^4} c \underbrace{\int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \cos \vartheta \frac{\sin \vartheta d\varphi d\vartheta}{4\pi}}_{=1/4} dA \\ &= \frac{ac}{4} T^4 dA. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Somit haben wir aus der Energiedichte die totale pro Flächenelement des schwarzen Strahlers abgestrahlte Leistung erhalten. Diese ergibt sich im Wesentlichen durch Multiplikation des Stefan-Boltzmann-Gesetzes (5.25) mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts c und einem Geometriefaktor $1/4$.

5.4.7 Die Sonne als Beispiel eines kugelsymmetrischen schwarzen Strahlers

Wir berechnen nun die gesamte Strahlungsleistung P der Sonne und daraus die Strahlungsintensität⁶ I , die wir auf der Erde wahrnehmen. Dabei nehmen wir an, dass die Sonne näherungsweise einem kugelsymmetrischen schwarzen Strahler entspricht. Dass diese Annahme gut erfüllt ist, ist aus dem Vergleich aus dem gemessenen Strahlungsspektrum der Sonne mit dem berechneten Strahlungsspektrum eines schwarzen Strahlers derselben Temperatur zu entnehmen (siehe Abb. 5.12). Hier zeigt sich, dass das auf der Erde wahrgenommene Spektrum im Wesentlichen durch die in der Atmosphäre vorkommende Reflexion und Absorption des Lichts verändert ist.

Wir erhalten mit (5.36) für die gesamte von einem kugelsymmetrischen schwarzen Strahler mit Radius r_S ausgesandte Strahlungsleistung P

$$P = \int P_{dA} = \int \frac{ac}{4} T^4 dA = \frac{ac}{4} T^4 4\pi r_S^2. \quad (5.37)$$

Nun berechnen wir daraus die Strahlungsintensität I , die wir auf der Erde wahr-

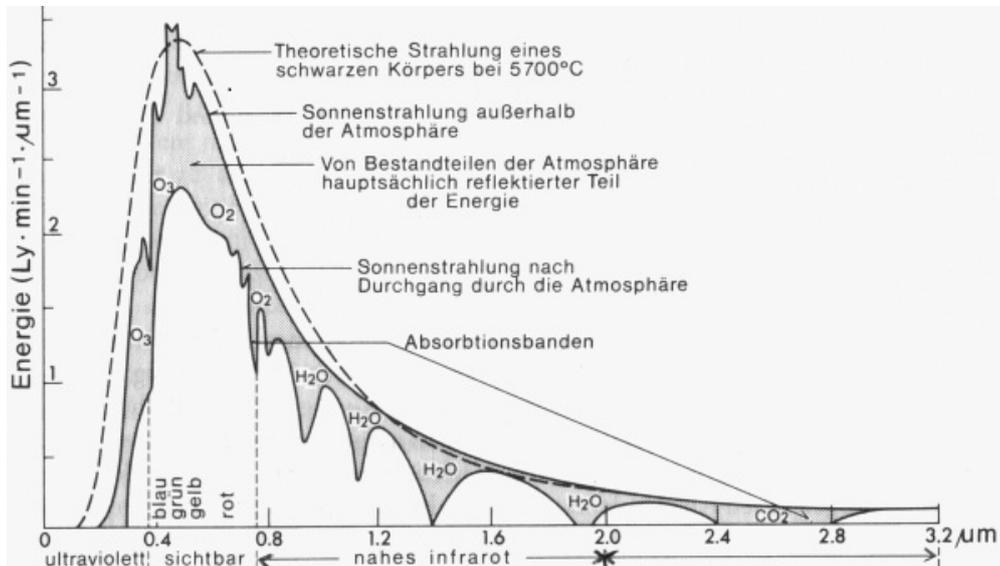


Abb. 5.12: Das Strahlungsspektrum der Sonne im Vergleich mit dem Strahlungsspektrum eines schwarzen Strahlers derselben Temperatur. [4]

⁶Unter der Strahlungsintensität versteht man die Strahlungsleistung pro Fläche.

nehmen. Mit (5.37) ergibt sich

$$I = \frac{P}{4\pi r_{\text{SE}}^2} = \frac{ac}{4} T^4 \frac{r_{\text{S}}^2}{r_{\text{SE}}^2}, \quad (5.38)$$

wobei r_{SE} dem Abstand zwischen der Sonne und der Erde entspricht. Mit den in Tab. 5.1 aufgelisteten Daten zur Sonne, erhalten wir für die Gesamtstrahlungsleistung P der Sonne und für die Intensität I der Sonne auf der Erde mit (5.37) und (5.38)

$$P = 3.84 \cdot 10^{26} \text{ W}, \quad (5.39)$$

$$I = 1367 \text{ W/m}^2. \quad (5.40)$$

Sonnentemperatur T	5778 K
Mittlerer Sonnenradius r_{S}	$6.957 \cdot 10^8 \text{ m}$
Mittlerer Abstand Sonne - Erde r_{SE}	$149.6 \cdot 10^9 \text{ m}$

Tab. 5.1: Daten zur Sonne. [5] [6]

5.4.8 Emittierte Strahlungsleistung für reale Strahler

Die in Abschnitt 5.4.6 hergeleitete Formel (5.36) für die Strahlungsleistung P eines Körpers gilt nur für schwarze Strahler. In der Realität besitzen jedoch die wenigsten Materialien die Eigenschaften eines schwarzen Strahlers. Für einen realen Strahler gilt für die emittierte Strahlungsleistung P

$$P = \varepsilon(T) \cdot \sigma \cdot A \cdot T^4, \quad (5.41)$$

wobei $\varepsilon(T)$ die Emissivität ist und Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann (für einen schwarzen Strahler gilt $\varepsilon(T) = 1$). $\sigma = ac/4 = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$ ist die Stefan-Boltzmann-Konstante und A die Fläche des Strahlers.

Typische Werte der Emissivität $\varepsilon(T)$ für verschiedene Materialien sind in Tab. 5.2 zusammengestellt.

Material	Temperatur T [°C]	Emissivität $\varepsilon(T)$
Buchenholz	70	0.91
Wasser	10 - 50	0.91
Eis	-9.6	0.918
Papier	95	0.89
Eisen (poliert)	-73 - 727	0.06 - 0.25
Gold (oxidiert)	-173 - 827	0.013 - 0.070
Kupfer (oxidiert)	130	0.725

Tab. 5.2: Typische Werte für die Emissivität $\varepsilon(T)$ verschiedener Materialien. [7]

5.5 Zusammenfassung

Wir haben gesehen, dass bei der Berechnung der spektralen Energiedichte für einen schwarzen Strahler die klassische Physik versagt (Ultraviolett Katastrophe) und die quantenmechanischen Eigenschaften des Lichts benötigt werden, was zum Planckschen Strahlungsgesetz führt. Jedoch ist die klassische Theorie als Grenzfall (kleine Frequenzen) in der Planckschen Theorie enthalten (Rayleigh-Jeans-Gesetz). Zum Abschluss des Kapitels hier nochmals die wichtigsten Resultate:

Eindimensionaler schwarzer Strahler

1. Plancksches Strahlungsgesetz (1D)

$$u(\nu) = \frac{2}{c} \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (5.42)$$

2. Rayleigh-Jeans-Gesetz (1D) (klassischer Grenzfall)

$$u(\nu) = \frac{2}{c} k_B T. \quad (5.43)$$

3. Wiensches Strahlungsgesetz (1D) (Grenzfall für hohe Frequenzen)

$$u(\nu) = \frac{2}{c} h\nu e^{-h\nu/k_B T}. \quad (5.44)$$

4. Stefan-Boltzmann-Gesetz (1D)

$$u = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B^2}{hc} T^2. \quad (5.45)$$

Dreidimensionaler schwarzer Strahler

1. Plancksches Strahlungsgesetz (3D)

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}. \quad (5.46)$$

2. Rayleigh-Jeans-Gesetz (3D) (Grenzfall für kleine Frequenzen)

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T. \quad (5.47)$$

3. Wiensches Strahlungsgesetz (3D) (Grenzfall für hohe Frequenzen)

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}. \quad (5.48)$$

4. Stefan-Boltzmann-Gesetz (3D)

$$u = aT^4 \quad \text{mit} \quad a = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3}. \quad (5.49)$$

5. Wiensches Verschiebungsgesetz

$$\lambda_{\max} T = \frac{hc}{4.965k_{\text{B}}} = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}. \quad (5.50)$$

$$\frac{\nu_{\max}}{T} = \frac{2.8214k_{\text{B}}}{h} = 5.88 \cdot 10^{10} \text{ Hz/K}. \quad (5.51)$$

6. Strahlungsleistung eines Flächenelements dA eines schwarzen Strahlers

$$P_{\text{dA}} = \frac{ac}{4} T^4 dA. \quad (5.52)$$

7. Strahlungsleistung für nichtschwarze Strahler der Fläche A

$$P = \varepsilon(T) \sigma AT^4 \text{ mit } \sigma = \frac{ac}{4}. \quad (5.53)$$

Kapitel 6

Materiewellen

In den letzten Kapiteln haben wir gelernt, dass elektromagnetische Strahlung sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften zeigt. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit an einem gegebenen Ort ein Photon anzutreffen proportional zum Quadrat der Amplitude der klassischen elektromagnetischen Welle.

In diesem Kapitel diskutieren wir, wie sich auch bei massebehafteten Teilchen, wie z.B. Elektronen, Protonen, Neutronen, Atomkernen, ganzen Atomen oder auch Molekülen, nicht nur Teilcheneigenschaften sondern auch Welleneigenschaften beobachten lassen. Dabei werden wir in Analogie zum Photon experimentelle Beobachtungen erklären, indem wir annehmen, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit materieller Teilchen proportional zum Quadrat der Amplitude einer Welle, der sogenannten *Materiewelle*, ist.

Im Gegensatz zur elektromagnetischen Welle, die dem Photon zugeordnet ist, kann die Materiewelle jedoch nicht mit der klassischen Theorie gedeutet werden. Die Materiewelle ist ein mathematisches Konzept zur Berechnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines massebehafteten Teilchens.

Materiewellen wurden 1923 von Louis de Broglie postuliert. Experimentelle Hinweise dafür, dass sich Teilchen wie Wellen verhalten können, gab es zu dieser Zeit aber noch nicht. De Broglies Idee entstand aus der Analogie zu den Photonen. Aufgrund dieser Analogie konnte er die Wellenlänge für Materiewellen angeben.

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (6.1)$$

Diese Beziehung wird *de Broglie-Beziehung* genannt, wobei p den Impuls des durch die Materiewelle beschriebenen Teilchens bezeichnet und h das Plancksche Wirkungsquantum ist.

Für Photonen gilt wie bereits bekannt

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{h}{h\nu/c} = \frac{h}{p}, \quad (6.2)$$

wobei p der Impuls des Photons ist. Dabei ist zu bedenken, dass Photonen sich immer mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten und keine Ruhemasse haben. Aus

diesem Grund ist die Ruheenergie des Photons gleich null. Auch dieser Aspekt unterscheidet Photonen von massebehafteten Teilchen.

Im folgenden Abschnitt gehen wir nun auf experimentelle Situationen ein unter denen sich die Welleneigenschaften von Materie beobachten lassen.

6.1 Experimenteller Nachweis der Materiewellen

Obwohl die Materiewelle kein klassisches Pendant hat und wir sie als mathematisches Konzept bezeichnet haben, zeigt sich die Realität der Materiewelle im Experiment.

6.1.1 Beugung von Elektronenwellen

Das erste Experiment, das den Wellencharakter bewegter Materieteilchen zum Vorschein brachte, wurde in den Jahren 1923 - 1927 (anfänglich ohne Kenntnis des de Broglieschen Postulats) von Clinton Davisson und Lester Germer in einem Industrielabor (Bell Telephone Laboratories) durchgeführt. Die beiden Experimentatoren arbeiteten am Problem der Sekundärelektronenemission, das für die Technik von Radoröhren von Bedeutung war.

Davisson und Germer schossen in ihrem Experiment (siehe Abb. 6.1) Elektronen auf die Oberfläche von Ni-Kristallen und beobachteten die vom Kristall ausgehenden Elektronen als Funktion des Winkels ϑ und als Funktion der Beschleunigungsspannung U im Bereich zwischen 30 und 200 V.

Bei Beschleunigungsspannungen in diesem Bereich handelt es sich um relativ langsame Elektronen. Diese werden von den Atomen sehr stark gestreut, da sie sich aufgrund ihrer niedrigen Geschwindigkeit beim Streuprozess lange im Kraftfeld des streuenden Atoms befinden. Folglich dringen sie nicht in den Kristall ein, sondern werden von den Atomen an der Oberfläche gestreut. Die Beugung findet also in diesem Fall an einem Flächengitter und nicht an einem Raumgitter statt und unterscheidet sich deshalb von der Bragg-Reflexion (siehe Abschnitt 3.4.2), die restriktiver¹ ist.

Wir betrachten die Beugung des Elektronenstrahls an den Atomreihen der Oberfläche, die ein Reflexionsgitter bilden (siehe Abb. 6.2). Wenn nun die einfallende Strahlung Wellennatur hat und an diesem Gitter gebeugt wird, dann tre-

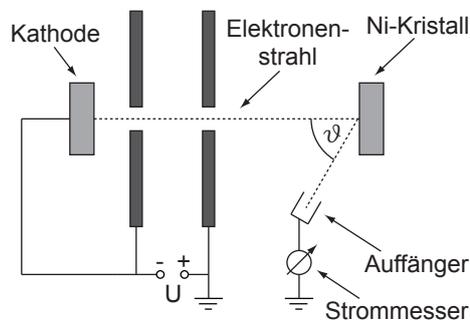


Abb. 6.1: Experimentaufbau von Davisson und Germer: Elektronen werden beschleunigt und treffen auf einen Ni-Kristall. Ein Auffänger und ein Strommesser dienen zur Messung der gebeugten Elektronen in Abhängigkeit des Winkels ϑ und der Beschleunigungsspannung U .

¹Bei der Bragg-Reflexion kann nur unter bestimmten Winkeln (Bragg-Bedingung: $\sin \vartheta_{\max} = n\lambda/2a$) Reflexion beobachtet werden.

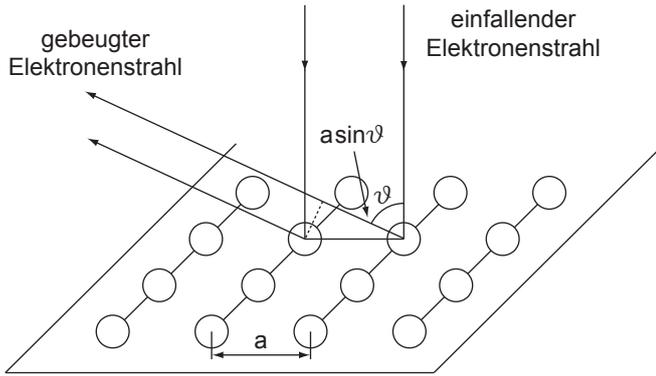


Abb. 6.2: Beugung des Elektronenstrahls an den Atomreihen der Oberfläche des Ni-Kristalls mit Gitterkonstante $a = 2.15 \text{ \AA}$. Der Gangunterschied zwischen zwei an benachbarten Atomen gebeugten Elektronenstrahlen beträgt $a \sin \vartheta$.

ten Maxima der reflektierten Strahlung auf, wenn die von den einzelnen Atomreihen gestreuten Wellen konstruktiv interferieren, d.h. wenn gilt

$$a \sin \vartheta = n\lambda. \quad (6.3)$$

Bei einer Beschleunigungsspannung von $U = 54 \text{ V}$ beobachteten Davisson und Germer bei senkrechtem Elektroneneinfall auf eine Kristallfläche, deren Orientierung in Bezug auf das Kristallgitter bekannt war, ein erstes Maximum ($n = 1$) des Auffängerstroms bei der Winkelstellung $\vartheta = 50^\circ$. Der Abstand der Atomreihen a war aus Röntgen-Untersuchungen der Struktur bekannt. Für die spezielle Kristallfläche des Experiments ist $a = 2.15 \text{ \AA}$. Wenn man das Maximum als Beugungsmaximum interpretiert, erhält man für den Elektronenstrahl folgende Wellenlänge

$$\lambda = a \sin \theta = 1.65 \text{ \AA}. \quad (6.4)$$

Wir überprüfen nun, ob diese Wellenlänge mit der de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$ übereinstimmt. Der Impuls der Elektronen ergibt sich aus der Beschleunigungsspannung U . Wir können dabei von nicht-relativistischen Teilchen ausgehen, da bei den Experimenten von Davisson und Germer U ausreichend niedrig war, so dass die Geschwindigkeit der Elektronen klein war im Vergleich zur Lichtgeschwindigkeit (v/c war von der Größenordnung 10^{-3}). Unter Vernachlässigung der Austrittsarbeit aus der Kathode folgt aus der Energieerhaltung

$$\underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{\text{kinetische Energie}} = \underbrace{eU}_{\text{potentielle Energie}}. \quad (6.5)$$

Daraus erhalten wir für den Impuls p die Beziehung

$$p = mv = \sqrt{2meU}. \quad (6.6)$$

Einsetzen in die de Broglie-Beziehung ergibt für die Wellenlänge λ

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = 1.67 \text{ \AA}, \quad (6.7)$$

was mit dem Wert für die Wellenlänge aus dem Winkel für das Beugungsmaximum in guter Näherung übereinstimmt.

Bei der Streuung von Elektronen an Kristalloberflächen ist es wichtig Adsorption² von Gas auf der Oberfläche zu vermeiden, da sonst die Eigenschaften der Adsorbatschicht das Streuexperiment beeinflussen können. Adsorption kann vermieden werden, indem die Oberflächen im Ultrahochvakuum untersucht werden. In den historischen Experimenten von Davisson und Germer waren diese Bedingungen nur angenähert erfüllt.

In denselben Jahren wurde von George Paget Thomson (dem Sohn von Joseph John Thomson, dem Entdecker des Elektrons) und seinem Schüler A. Reid ein Experiment mit der Absicht durchgeführt, die de Broglie-Beziehung zu prüfen. Im Gegensatz zu Davisson und Germer benutzten diese Forscher nicht das Oberflächengitter, sondern das Raumgitter von Kristallen zur Beugung, d.h. Bragg-Reflexion. Dazu ist es aber notwendig, dass die Elektronen in das Gitter eindringen, d.h. man muss schnelle Elektronen verwenden, was Beschleunigungsspannungen von der Grössenordnung von 10^4 V entspricht. In diesem Experiment wird das Problem der Oberflächenadsorption vermieden.

George Paget Thomson und Reid durchstrahlten sehr dünne Schichten von regellos orientierten Mikrokristallen, wie sie sich zum Beispiel beim Aufdampfen von Metallen im Hochvakuum auf dünne, amorphe, organische Filme ergeben (siehe Abb. 6.3). In einer solchen polykristallinen Schicht finden sich immer Kristalle, für welche die Bragg-Bedingung bei der betreffenden durch die Beschleunigungsspannung gegebenen de Broglie-Wellenlänge erfüllt ist. Auf diesen Zusammenhang werden wir im Rahmen der Untersuchung des Debye-Scherrer-Verfahrens zur Strukturanalyse polykristalliner Materialien mit Röntgen-Strahlung im Abschnitt 7.2.2 nochmals eingehen.

Für eine bestimmte Ordnung n liegen die Maxima der gebeugten Strahlung auf einem Kreis. Da verschiedene Ordnungen n auftreten und da sich zudem die Atome im Raumgitter auf verschiedene Art und Weise zu Netzebenen zusammenfassen lassen, besteht das Beugungsbild aus vielen konzentrischen Kreisen.

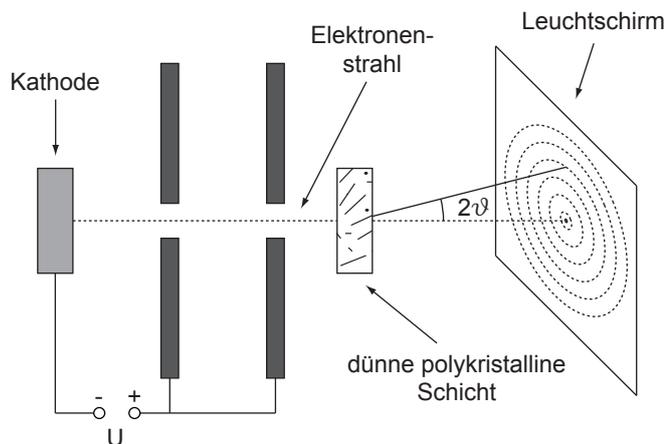


Abb. 6.3: Experimentaufbau von George Paget Thomson und Reid: Elektronen werden beschleunigt und treffen auf eine dünne polykristalline Schicht. Der gebeugte Strahl wird mittels Leuchtschirm sichtbar gemacht.

²Als Adsorption bezeichnet man die Anreicherung von Stoffen aus Gasen oder Flüssigkeiten an der Oberfläche eines Festkörpers.

Bei bekannter Kristallstruktur, d.h. Gitterkonstante a , kann man aus dem Bragg-Winkel ϑ für ein Beugungsmaximum auf die Wellenlänge der Materiewellen schliessen³.

Wiederum kann man auch in diesem Experiment die Wellenlänge mit Hilfe der de Broglie-Beziehung berechnen. Nur muss bei Beschleunigungsspannungen von 10^4 V und darüber der Impuls relativistisch berechnet werden. Unter Vernachlässigung der Austrittsarbeit aus der Kathode gilt aufgrund der Energieerhaltung

$$\underbrace{\underbrace{eU}_{\text{potentielle Energie}} + \underbrace{mc^2}_{\text{Ruheenergie}}}_{\substack{\text{Energie des Elektrons} \\ \text{vor dem Zurücklegen} \\ \text{der Beschleunigungsstrecke}}} = \underbrace{\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}}_{\substack{\text{Energie des Elektrons} \\ \text{nach dem Zurücklegen} \\ \text{der Beschleunigungsstrecke}}} \quad (6.8)$$

Diese Gleichung ist nach p aufzulösen und das Ergebnis in die de Broglie-Beziehung einzusetzen. George Paget Thomson und Reid erhielten befriedigende Übereinstimmung zwischen dem Resultat dieser Berechnung und der aus dem Beugungsbild bestimmten Wellenlänge.

Diese beiden Experimente bestätigen die These, dass Elektronen Wellencharakter zeigen.

6.1.2 Beugung von Neutronen

Beugung tritt immer auf, wenn zwischen den bewegten Materieteilchen und den Bausteinen des beugenden Objekts eine Wechselwirkung besteht. Im Fall der Elektronen, mit denen wir uns im letzten Abschnitt beschäftigt haben, ist in erster Linie die Coulomb-Wechselwirkung für die Streuung verantwortlich. Ebenfalls können magnetische Wechselwirkungen eine Rolle spielen, da das Elektron ein magnetisches Moment hat.

Am Beispiel der Neutronenbeugung zeigt sich, dass auch ungeladene Teilchen sich wie Wellen verhalten. Seit man in Kernreaktoren intensive Neutronenquellen zur Verfügung hat, ist die Neutronenbeugung zu einer der wichtigsten Methoden zur Untersuchung der Struktur von kondensierter⁴ Materie geworden.

Bei der Neutronenbeugung spielen zwei Wechselwirkungen, die von der gleichen Grössenordnung sein können, eine Rolle:

- a) Die Wechselwirkung mit den Atomkernen des beugenden Materials.
- b) Bei magnetischen Materialien die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Neutrons mit den magnetischen Momenten der Atome.

Wir untersuchen nun, welche Bedingung die Neutronen erfüllen müssen, damit Beugung (Bragg-Reflexion) möglich ist: Die Bragg-Bedingung $n\lambda = 2d \sin \theta$

³Die Bragg-Bedingung gilt sowohl für elektromagnetische Wellen als auch für Materiewellen.
⁴Unter kondensierter Materie versteht man Materie im gebundenen Zustand (Festkörper, Flüssigkeiten, Flüssigkristalle, ...).

ist nur erfüllbar, wenn die Wellenlänge kleiner ist als der doppelte Netzebenenabstand a , welcher von der Grössenordnung der Atom- bzw. Moleküldurchmesser ist. Eine nähere Betrachtung des Beugungsproblems, die auch die thermische Bewegung (Gitterschwingungen) einschliesst zeigt, dass es bei Strukturbestimmungen von Vorteil ist, wenn die Wellenlänge nicht sehr klein ist im Vergleich zu den Abständen der Netzebenen. Die sogenannten thermischen Neutronen aus einem Kernreaktor erfüllen diese Bedingung. Im Moderator⁵ des Reaktors, der aus Graphit oder (schwerem) Wasser besteht, werden die schnellen Neutronen, die in den Brennstoffelementen durch Kernspaltung entstehen, auf thermische Geschwindigkeiten⁶ gebracht. Bei Temperaturen von einigen 100 K erhalten wir mit Hilfe der Energieerhaltung aus dem Äquipartitionsprinzip $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T$ eine de Broglie-Wellenlänge von

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} \sim 1 \text{ \AA}. \quad (6.9)$$

Dies entspricht etwa einem Drittel typischer Atomabstände in Kristallen oder Flüssigkeiten.

Wir haben an einigen Beispielen gesehen, dass nicht nur Photonen Wellen- und Teilcheneigenschaften zeigen, sondern auch massebehaftete Teilchen, wie Elektronen und Neutronen. Für die Entdeckung des Elektrons als Teilchen erhielt Joseph John Thomson 1906 den Nobelpreis. Sein Sohn, Georg Paget Thomson, wurde (zusammen mit Davisson) im Jahre 1937 für den Nachweis, dass Elektronen ebenfalls Welleneigenschaften zeigen, mit dem Nobelpreis geehrt.

6.2 Materiewellen und der klassische Grenzfall

Wir haben im letzten Abschnitt die Beugung von Materiewellen an natürlichen Kristallgittern untersucht. Man kann Materiewellen (Elektronenstrahlen) aber auch an feinen, künstlich hergestellten Gittern und Spalten beugen.

Wir untersuchen dazu folgendes Gedankenexperiment. Wir betrachten einen Spalt, der nach klassischen Vorstellungen ideal sein soll, d.h. er soll Teilchen, die von links (senkrecht) auf die Spaltebene einfallen, ungestört passieren lassen. Nach der klassischen Mechanik wird ein Detektor auf der rechten Seite des Spaltes nur geradeauslaufende Teilchen messen (siehe Abb. 6.4): Die Teilchenhäufigkeit ist nur beim Winkel $\vartheta = 0^\circ$ von null verschieden.

Wie würde man diesen Sachverhalt mit dem Wellenbild interpretieren? Wir wissen, dass die Teilchenhäufigkeit P proportional zur Amplitude der gebeugten Materiewelle ist

$$P \propto \frac{\sin^2 \beta}{\beta^2} \text{ mit } \beta = \frac{\pi s}{\lambda} \sin \vartheta, \quad (6.10)$$

wobei s die Spaltbreite ist (siehe Abb. 6.5). Damit diese Häufigkeit bei $\vartheta = 0^\circ$

⁵Ein Moderator dient dazu, freie Neutronen, die bei ihrer Freisetzung meist relativ energiereich (also schnell) sind, abzubremesen.

⁶Thermische Geschwindigkeiten sind typische Geschwindigkeiten der thermischen Bewegung von Teilchen, die ein Gas oder eine Flüssigkeit ausmachen.

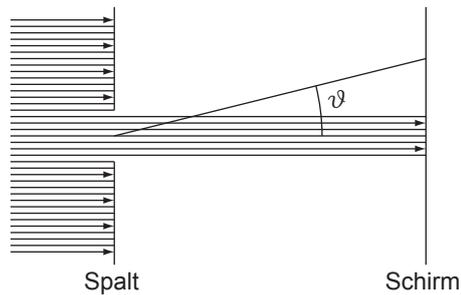


Abb. 6.4: Nach der klassischen Mechanik werden bei der Beugung von Teilchen am Spalt nur unter dem Winkel $\vartheta = 0^\circ$ Teilchen auf dem Schirm registriert.

zusammengedrängt wird, muss λ/s gegen null streben. Bei endlicher Spaltbreite muss also die de Broglie-Wellenlänge $\lambda = h/p$ gegen null streben, damit die nach der klassischen Mechanik erwartete Winkelverteilung resultiert. Mit

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \text{ mit } v/c < 1 \text{ und } v \neq 0 \quad (6.11)$$

bedeutet dies, dass die Masse m gross sein muss. Praktisch heisst das, dass sich makroskopische Körper nach den Gesetzen der klassischen Mechanik bewegen und erst bei kleinen Massen die Welleneigenschaften der Materieteilchen zum tragen kommen. Wir verdeutlichen dies an zwei Beispielen.

a) Makroskopische Verhältnisse:

Mit $m = 10^{-3}$ kg, $v = 10^{-2}$ m/s und $s = 10^{-2}$ m ergibt sich für die Winkelbreite $\Delta\vartheta$ des Hauptmaximums (Abstand zwischen den beiden ersten Minima)

$$\Delta\vartheta = \frac{2\lambda}{s} = \frac{2h}{mvs} = 1.3 \cdot 10^{-26} \sim 0. \quad (6.12)$$

Wir erhalten also einen vernachlässigbar kleinen Wert.

b) Atomare Dimensionen:

Wir betrachten Elektronen mit einer Energie von 54 eV, die einen Spalt passieren, dessen Breite von der Grössenordnung $s = 1000 \text{ \AA}$ ist. Die de Broglie-Wellenlänge beträgt nach (6.7) $\lambda = 1.67 \text{ \AA}$, sodass wir folgende Winkelbreite $\Delta\vartheta$ des Hauptmaximums erhalten

$$\Delta\vartheta = \frac{2\lambda}{s} = 3.3 \cdot 10^{-3} (\hat{=} 0.2^\circ). \quad (6.13)$$

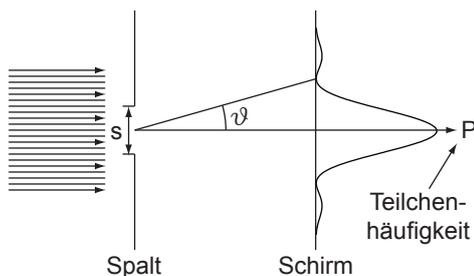


Abb. 6.5: Nach dem Wellenbild ergibt sich bei der Beugung von Teilchen am Spalt auf dem Schirm ein Beugungsmuster, d.h. Teilchen werden unter beliebigen Winkeln ϑ registriert.

Die Welleneigenschaften kommen also zum tragen: Obwohl alle Teilchen auf der linken Seite des Spalts gleich präpariert wurden, laufen sie auf der rechten Seite unter (messbar) verschiedenen Winkeln aus.

Betrachtet man nun einen so kleinen Teilchenstrom, dass sich zu jedem Zeitpunkt nur ein einziges Teilchen in der Apparatur aufhält, dann findet man (nach genügend langer Zeit) dieselbe Winkelverteilung $\sin^2 \beta / \beta^2$ wie im Fall eines starken Teilchenstroms, wo sich gleichzeitig viele Teilchen in der Apparatur befinden. Die Winkelverteilung kommt also nicht ausschliesslich durch Interferenz zwischen verschiedenen Teilchen zustande, sondern:

Die Materiewelle gibt auch bei einem einzelnen Teilchen die richtige Aufenthaltswahrscheinlichkeit und darf somit auch zur Beschreibung eines Einteilchensystems benützt werden.

6.3 Die Wellenfunktion

Wir haben bereits erkannt, dass Materie Welleneigenschaften zeigen kann und sich diese auch experimentell beobachten lassen. Zusätzlich wissen wir aus dem letzten Abschnitt unter welchen Bedingungen dieser Wellencharakter beobachtbar wird. Wir formulieren nun als nächstes eine solche Welle, die sogenannte *de Broglie-Welle*, mathematisch als sogenannte Wellenfunktion.

Als Ansatz für eine ebene harmonische Materiewelle $\psi(x, t)$, die sich längs der x-Achse fortpflanzt, schreiben wir

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (6.14)$$

mit der Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ und der Amplitude der Welle A . Mit der de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$ und mit $\hbar = h/2\pi$ erhalten wir $p = \hbar k$. Da sowohl p als auch k Vektoren sind, können wir auch schreiben

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}. \quad (6.15)$$

Dies ist eine andere Schreibweise der de Broglie-Beziehung. Damit ergibt sich für die ebene harmonische Materiewelle

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px/\hbar - \omega t)}. \quad (6.16)$$

Es ist zu bemerken, dass wir die Welle als komplexe Funktion schreiben. Dabei entspricht der Funktion $\psi(x, t)$ keine direkte physikalische Messgrösse. Daher kann diese sehr wohl komplexe Werte annehmen. Hingegen sind messbare Grössen, wie z.B. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Teilchenhäufigkeit), reell.

Ausgehend vom Wissen, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit materieller Teilchen proportional zum Quadrat der Amplitude der Materiewelle ist, postulieren wir:

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort x zur Zeit t anzutreffen, ist proportional zu $\psi(x, t)\psi^*(x, t)$, d.h. zum Quadrat des absoluten Betrags der Wellenfunktion $\psi(x, t)$.

In den folgenden Kapiteln werden wir uns noch detaillierter mit diesem Postulat auseinandersetzen.

Nachdem wir nun eine Form für die ebene harmonische Materiewelle gefunden haben und auch deren Definition, stellt sich noch die Frage, welche physikalische Grösse für ω zu verwenden ist. Es ist naheliegend, die für Photonen gültige Beziehung $E = \hbar\omega$ auf die Materiewellen anzuwenden, analog wie die Beziehung $\lambda = h/p$ von den Photonen übernommen wurde. Wir schreiben also für die totale Energie eines Materieteilchens $E = \hbar\omega$, wobei ω die Frequenz der de Broglie-Welle ist.

Damit kann die ebene harmonische Materiewelle, die *de Broglie-Welle*, wie folgt geschrieben werden

$$1\text{D: } \psi(x, t) = Ae^{i/h(px-Et)}, \quad (6.17)$$

$$3\text{D: } \psi(\vec{r}, t) = Ae^{i/h(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}. \quad (6.18)$$

6.4 Wellenpakete

Gehen wir von einer ebenen harmonischen Materiewelle $\psi(x, t) = Ae^{i/h(px-Et)}$ aus, die wir im letzten Abschnitt kennengelernt haben und berechnen die entsprechende Aufenthaltswahrscheinlichkeit, so erhalten wir den folgenden konstanten Wert $\psi(x, t)\psi^*(x, t) = A^2$. Das bedeutet, dass die ebene harmonische Welle ein Teilchen beschreibt, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit entlang der gesamten x-Achse konstant ist. Daher kann man einem durch eine solche Wellenfunktion beschriebenen Teilchen keine eindeutige Position im Raum zuweisen.

Um nun ein Teilchen zu beschreiben, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem bestimmten Bereich des Raums gross ist, verwendet man eine Superposition (Überlagerung) von harmonischen Wellen verschiedener Frequenzen. Die Überlagerung sollte so beschaffen sein, dass sich dabei eine *Wellengruppe* ausbildet (siehe Abb. 6.6). In der Quantenmechanik spricht man auch von einem *Wellenpaket*. Ein Wellenpaket ist also eine Welle, deren Amplitude nur in einem begrenzten Raumgebiet ungleich Null ist und deshalb ein Teilchen beschreibt, dessen Aufenthaltsbereich auf dieses Raumgebiet beschränkt ist.

Ein ähnlicher Zusammenhang ist bekannt aus der Beschreibung von elektromagnetischen Wellen. Bei ebenen Wellen ist die Intensität der Welle über den ganzen Raum gleichmässig verteilt. Um im Raum lokalisierte elektromagnetische Pulse zu beschreiben, betrachtet man Überlagerungen von Wellen verschiedener Frequenzen.

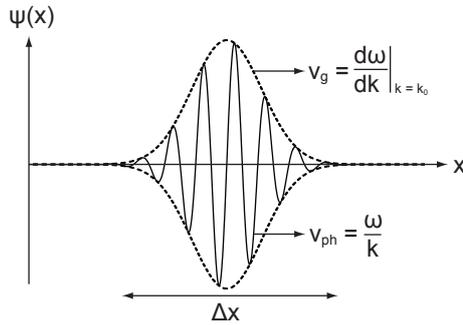


Abb. 6.6: Momentaufnahme eines Wellenpakets, das ein Teilchen darstellt, das sich im Raumgebiet Δx aufhält. Auf die Bedeutung der Gruppengeschwindigkeit v_g und Phasengeschwindigkeit v_{ph} wird im Text eingegangen.

6.4.1 Gruppen- und Phasengeschwindigkeit von Materiewellen

Als nächstes widmen wir uns der Frage, mit welcher Geschwindigkeit sich ein Teilchen fortbewegt, welches durch ein Wellenpaket beschrieben ist. Da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des betrachteten Teilchens nur innerhalb der Wellengruppe gross ist, interpretiert man die Gruppengeschwindigkeit v_g , d.h. die Geschwindigkeit, mit der sich ein Wellenpaket als Ganzes fortbewegt, als Geschwindigkeit des Teilchens.

Die Phasengeschwindigkeit $v_{ph} = \omega/k$ einer Materiewelle gibt an, mit welcher Geschwindigkeit sich Stellen konstanter Phase bewegen. Sie unterscheidet sich von der Gruppengeschwindigkeit v_g , wenn die Phasengeschwindigkeit einer Welle von der Frequenz abhängt. Dieses Phänomen nennt man *Dispersion*. Die Dispersion wird durch die Funktion $\omega(k)$ beschrieben (siehe Abb. 6.7). Ist $v_{ph} = \omega/k$ unabhängig von k so haben wir keine Dispersion. Hängt hingegen v_{ph} von k ab, so haben wir Dispersion. Auf die genauere Bedeutung der Phasengeschwindigkeit gehen wir im Abschnitt 6.5 ein.

Unser nächstes Ziel ist es einen Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeit v_g zu definieren. Sind die k -Werte der superponierten Wellen alle in der Nähe desselben Werts k_0 , dann ändert sich (zumindest bei stetigem Verlauf der Funktion $\omega(k)$) die Gestalt des Wellenpakets nur schwach im Laufe der Zeit (siehe Abb. 6.7). Das Wellenpaket bewegt sich dann mit der Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}. \quad (6.19)$$

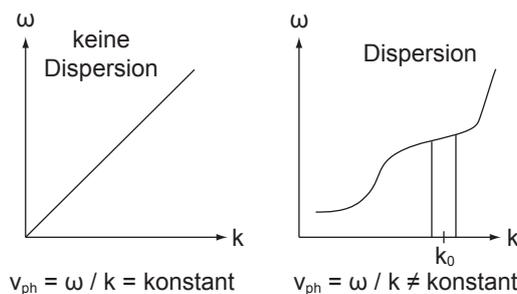


Abb. 6.7: Beschreibung der Dispersion durch die Funktion $\omega(k)$: Hängt ω linear von k ab, so liegt keine Dispersion vor, ansonsten spricht man von Dispersion.

Bemerkung:

Jedoch muss man auch Wellenpakete in Betracht ziehen, bei denen sich die k -Werte der superponierten Wellen über einen grösseren Bereich Δk erstrecken. Das Wellenpaket kann dann als Superposition von vielen „Subpaketen“ i , die sich mit der ihnen eigenen Gruppengeschwindigkeit $v_{g_i} = d\omega/dk|_{k=k_i}$ bewegen, aufgefasst werden. Das Gesamtpaket läuft also auseinander. Wenn die Breite des Wellenpakets bei $t = 0$ $\Delta x|_0$ beträgt, dann wächst sie in der Zeit t auf

$$\Delta x|_t \cong \Delta x|_0 + \Delta v_g t \text{ mit } \Delta v_g = \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right) \Delta k. \quad (6.20)$$

Immerhin kann man auch in diesem Fall einen „Schwerpunkt“ des Wellenpakets definieren und ihm eine Gruppengeschwindigkeit v_g zuschreiben

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=\bar{k}}. \quad (6.21)$$

6.5 Phasengeschwindigkeit und Brechung von Materiewellen

In diesem Abschnitt gehen wir genauer auf die Bedeutung der Phasengeschwindigkeit von Materiewellen ein und betrachten in diesem Zusammenhang das Phänomen der Brechung, welches auch aus der Optik bekannt ist.

Bei jeder (harmonischen) Welle ist die Phasengeschwindigkeit gegeben durch $v_{\text{ph}} = \lambda\nu = \omega/k$. Diese Beziehung gilt auch für Materiewellen. In diesem Fall ist $\lambda = h/p$ und $\nu = E/h$ einzusetzen, so dass $v_{\text{ph}} = E/p$. Bezeichnen wir die Teilchengeschwindigkeit mit v und die Ruhemasse mit m_0 , dann gilt für ein relativistisches Teilchen

$$p = \gamma m_0 v, \quad (6.22)$$

$$E = \gamma m_0 c^2 \quad (6.23)$$

mit $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Wir erkennen daher, dass die Phasengeschwindigkeit der Materiewellen umgekehrt proportional zur Teilchengeschwindigkeit ist

$$v_{\text{ph}} = \frac{c^2}{v}. \quad (6.24)$$

Da die Teilchengeschwindigkeit v die Lichtgeschwindigkeit c nicht überschreiten kann, ist die Phasengeschwindigkeit immer grösser als die Lichtgeschwindigkeit.

Trotzdem ist die Phasengeschwindigkeit der Materiewellen nicht ganz ohne physikalische Bedeutung. Da das Plancksche Wirkungsquantum im Ausdruck für v_{ph} nicht vorkommt, ist zu erwarten, dass man mit der Phasengeschwindigkeit Phänomene beschreiben kann, die auch aufgrund der klassischen Mechanik verständlich sind. Vom Wellenstandpunkt aus müssen es Phänomene sein, bei denen die Wellenlänge nicht eingeht, denn diese enthält das Plancksche Wirkungsquantum. Beugungserscheinungen kommen also nicht in Frage. Es gibt aber Wellenphänomene, die nur durch die Phasengeschwindigkeit bestimmt sind.

Ein einfaches Beispiel ist die Brechung an der Grenzfläche zweier Gebiete mit verschiedenen Phasengeschwindigkeiten auf das wir hier kurz eingehen.

Das Brechungsgesetz kann mit Hilfe des Huygens-Prinzips erklärt werden. Dieses ist ein rein kinematisches (um nicht gar zu sagen rein mathematisches) Prinzip und muss als solches für jede Welle gelten, insbesondere auch für Materiewellen. Für eine Grenzfläche zwischen zwei Gebieten I und II mit den Phasengeschwindigkeiten v_{ph}^{I} und $v_{\text{ph}}^{\text{II}}$ gilt allgemein (siehe Abb. 6.8)

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{v_{\text{ph}}^{\text{I}}}{v_{\text{ph}}^{\text{II}}}. \quad (6.25)$$

Im Fall von Schall- oder elektromagnetischen Wellen sind die Gebiete I und II verschiedene Materialien, deren physikalische Eigenschaften die Phasengeschwindigkeiten bestimmen. Für Schallwellen gilt

$$v_{\text{ph}} = \sqrt{\frac{E}{\rho}}, \quad (6.26)$$

wobei E das Elastizitätsmodul und ρ die Dichte des Materials bezeichnen. Für elektromagnetische Wellen gilt

$$v_{\text{ph}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon\mu}}, \quad (6.27)$$

wobei ϵ die Dielektrizitätskonstante und μ die magnetische Permeabilität des Materials bezeichnen.

An einem einfachen Beispiel illustrieren wir nun, dass die Brechung der Materiewellen durch das Kraftfeld bestimmt ist, in welchem sich die Teilchen bewegen und dass das Brechungsgesetz die Bahn des Teilchens liefert, die es aufgrund der klassischen Mechanik durchlaufen würde. Die klassische Bahn stimmt dann mit der Erfahrung überein, wenn keine Beugung auftritt, d.h. wenn die de Broglie-Wellenlänge sehr klein ist im Vergleich zur Breite der Spalte und im Vergleich zu den Liniendimensionen der Gebiete, in welchen das Kraftfeld eine Ablenkung des Teilchens bewirkt.

Das Experiment (siehe Abb. 6.9) findet in einem evakuierten Gefäß statt, damit die Teilchen (Elektronen) sich frei von Kollisionen ausbreiten können. Die aus einer Glühkathode K austretenden Elektronen werden durch ein zwischen K und A angelegtes elektrisches Feld beschleunigt und unter dem Winkel θ_1 bei

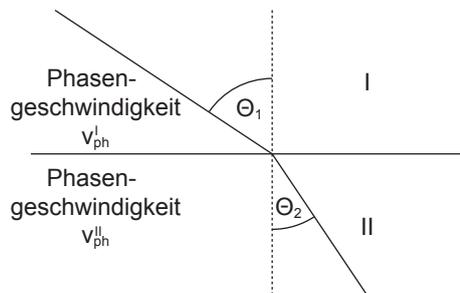


Abb. 6.8: Die Brechung von Materiewellen an der Grenzfläche zweier Gebiete mit verschiedenen Phasengeschwindigkeiten.

B in den Metallkasten I eingeschossen. Dabei ist schon bei niedrigen Beschleunigungsspannungen U_0 die de Broglie-Wellenlänge λ der Elektronen so klein, dass man Beugung an den Blenden der Apparatur vernachlässigen kann. Zum Beispiel erhalten wir für $U_0 = 54$ eV eine Wellenlänge von $\lambda = 1.67$ Å. Damit ist eine klassische Berechnung der Elektronenbahn gerechtfertigt.

Das Potential des Kastens I gegenüber der Erde sei $-U$. Im Innern des Kastens I herrscht kein elektrisches Feld, wenn wir von der sehr kleinen Ladung des Elektronenstrahls absehen. Wir können also davon ausgehen, dass sich die Elektronen mit einer konstanten Geschwindigkeit \vec{v}_I bewegen.

Bei C treten die Elektronen aus dem Kasten I durch ein Loch aus, um dann bei D in den leitenden Kasten II einzutreten, der geerdet ist. In diesem Kasten bewegen sie sich mit der konstanten Geschwindigkeit \vec{v}_{II} . Diese unterscheidet sich von \vec{v}_I , da zwischen den beiden Kästen durch den Potentialunterschied ein elektrisches Feld herrscht, in welchem die Elektronen noch einmal beschleunigt werden. Dieses Feld ist entlang der y-Achse gerichtet und beeinflusst daher nur die y-Komponente der Geschwindigkeit. Die x-Komponente ist in beiden Kästen gleich, d.h. es gilt

$$v_I \sin \theta_1 = v_{II} \sin \theta_2. \quad (6.28)$$

Somit erhalten wir aufgrund dieser auf der klassischen Mechanik und dem Elektromagnetismus aufbauenden Berechnung folgendes Resultat

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{v_{II}}{v_I}. \quad (6.29)$$

Dasselbe Ergebnis erhalten wir, wenn wir mit de Broglie-Wellen rechnen und in das Brechungsgesetz (6.25) für die Phasengeschwindigkeit (6.24), d.h. $v_{ph} = c^2/v$ einsetzen

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{v_{ph}^I}{v_{ph}^{II}} = \frac{c^2/v_I}{c^2/v_{II}} = \frac{v_{II}}{v_I}. \quad (6.30)$$

Diese Übereinstimmung ist ein Hinweis dafür, dass die de Brogliesche Wellenmechanik die klassische Mechanik als Grenzfall einschliesst, nämlich als Grenzfall vernachlässigbarer Beugung.

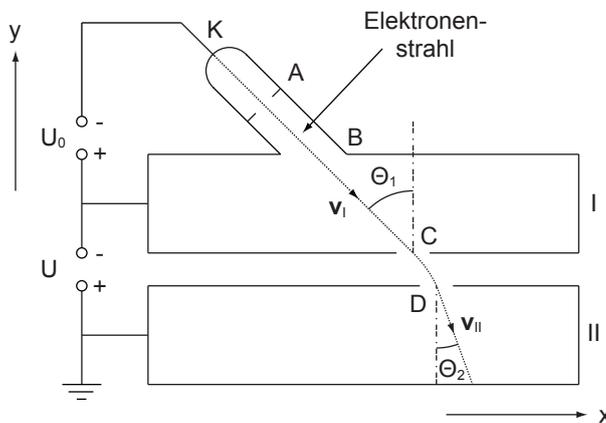


Abb. 6.9: Experimentaufbau zur Brechung von Materiewellen. Auf die einzelnen Bestandteile der Versuchsanordnung wird im Text eingegangen.

6.6 Die Dispersion von de Broglie-Wellen

Die Anwendung der ursprünglich für die Photonen betrachteten Beziehungen

$$p = \hbar k, \quad (6.31)$$

$$E = \hbar \omega \quad (6.32)$$

auf Materiewellen, was zur Form

$$\psi(x, t) = Ae^{i/\hbar(px - Et)} \quad (6.33)$$

für die de Broglie-Welle führte, war ein Schritt, den wir nun verifizieren bzw. motivieren möchten. Wir betrachten dazu ein Teilchen, welches durch ein Wellenpaket (superponierte de Broglie-Wellen) beschrieben wird. Wenn die de Broglie-Wellen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens liefern sollen, muss nach Abschnitt 6.4.1 eine Gruppengeschwindigkeit v_g resultieren, die gleich der klassischen Teilchengeschwindigkeit v ist. Dies überprüfen wir nun.

Aus (6.31) und (6.32) erhalten wir für die Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}. \quad (6.34)$$

Wir zeigen nun, dass dieser Ausdruck sowohl für nicht-relativistische als auch für relativistische Teilchen der Teilchengeschwindigkeit v entspricht:

a) Für **nicht-relativistische Teilchen** gilt

$$E = \frac{p^2}{2m} + V, \quad (6.35)$$

wobei die potentielle Energie V nicht vom Impuls p abhängen soll. Daraus ergibt sich für die Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \frac{p^2}{2m} = \frac{p}{m} = v. \quad (6.36)$$

b) Für **relativistische Teilchen** gilt

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (6.37)$$

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (6.38)$$

Aus (6.38) folgt

$$v = \frac{cp}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}}. \quad (6.39)$$

Einsetzen in (6.37) ergibt

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}. \quad (6.40)$$

Daraus erhalten wir für die Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{cp}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}} = v. \quad (6.41)$$

D.h. sowohl relativistisch als auch nicht-relativistisch ist die Gruppengeschwindigkeit v_g einer Materiewelle gleich der Teilchengeschwindigkeit v . Daher ist die Anwendung der für die Photonen gefundenen Beziehungen (6.31) und (6.32) auf Teilchen gerechtfertigt, d.h. die de Broglie-Wellenmechanik anwendbar.

Hier weisen wir noch einmal auf einen wichtigen Unterschied zwischen Photonen und Materieteilchen hin. Dazu ist es instruktiv, die Energie-Impuls-Beziehung (6.40) für Materieteilchen mit der entsprechenden Beziehung für Photonen $E = cp$ zu vergleichen (siehe Abb. 6.10). Dabei findet man, dass das Photon einem Teilchen im Grenzfall verschwindender Ruhemasse m_0 entspricht. Beim Photon im Vakuum zeigt sich keine Dispersion und es gilt $v_g = v_{ph} = c$. Daher haben Wellenpakete bei beliebigen Frequenzen im Vakuum dieselbe Gruppengeschwindigkeit. Im Gegensatz dazu zeigt ein massebehaftetes Teilchen Dispersion, d.h. verschiedene Frequenzkomponenten eines Wellenpakets haben verschiedene Ausbreitungsgeschwindigkeiten.

Um diese Tatsache nochmals zu verdeutlichen, betrachten wir den nicht-relativistischen Grenzfall ($v \ll c$) der Energie-Impuls-Beziehung (6.40). Wir erhalten

$$\begin{aligned}
 E &= \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} \\
 &= m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{c^2 p^2}{m_0^2 c^4}} \\
 &\sim m_0 c^2 \left(1 + \frac{c^2 p^2}{2 m_0^2 c^4} \right) \\
 &= m_0 c^2 + \frac{p^2}{2 m_0} \\
 &= \underbrace{m_0 c^2}_{\text{Ruheenergie}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_0}}_{\text{kinetische Energie}}, \tag{6.42}
 \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt die Beziehung $p = \hbar k$ verwendet haben. Mit $E = \hbar \omega$ erhalten wir

$$\omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2 m_0}. \tag{6.43}$$

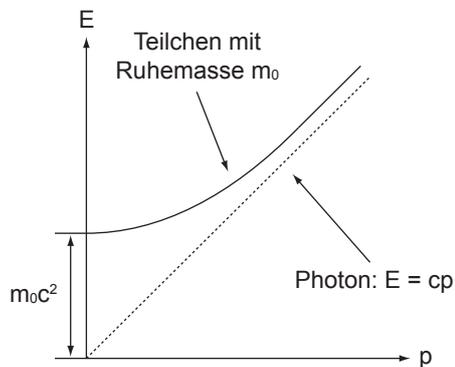


Abb. 6.10: Vergleich der Energie-Impuls-Beziehung eines Materieteilchens mit Ruhemasse m_0 mit der entsprechenden Beziehung für Photonen.

Somit gilt $\partial\omega/\partial k \propto k$ und wir haben Dispersion.

6.7 Zusammenfassung

- Massebehaftete Teilchen zeigen in geeigneten Experimenten neben Teilcheneigenschaften auch Welleneigenschaften. Nach dem Postulat von de Broglie (1923) kann ein Teilchen mit Impuls p eine Materiewelle mit Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (6.44)$$

zugeordnet werden, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum ist.

- Erste experimentelle Nachweise der Welleneigenschaften von Teilchen erfolgten in den Jahren 1923 - 1927 durch Davisson und Germer sowie George Paget Thomson und Reid mit Elektronen. Davisson und Thomson erhielten für diese Entdeckung 1937 den Nobelpreis in Physik.
- Die Welleneigenschaften von massebehafteten Teilchen kommen nur bei kleinen Massen zum Vorschein. Bei grossen Massen lassen sich Teilchen durch die klassischen Gesetze beschreiben.
- Die mathematische Beschreibung der Materiewelle erfolgt durch eine Wellenfunktion $\psi(x, t)$. Dieser Funktion $\psi(x, t)$ entspricht keine direkte Messgrösse. Jedoch gilt, dass die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen am Ort x zur Zeit t anzutreffen proportional zu $\psi(x, t)\psi^*(x, t)$ ist.

Die ebene harmonische Materiewelle, die de Broglie-Welle, ist gegeben durch

$$1\text{D: } \psi(x, t) = Ae^{i/h(px-Et)}, \quad (6.45)$$

$$3\text{D: } \psi(\vec{r}, t) = Ae^{i/h(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}, \quad (6.46)$$

wobei p den Impuls und E die Energie des Teilchens beschreiben.

- Die ebene harmonische Materiewelle (1D) beschreibt ein Teilchen, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit entlang der gesamten x-Achse konstant ist. Es ist also nicht möglich einem solchen Teilchen eine eindeutige Position im Raum zuzuweisen.

Ein Teilchen, dessen Aufenthaltsbereich auf ein Raumgebiet beschränkt ist, wird durch eine Überlagerung (Superposition) von ebenen harmonischen Wellen verschiedener Frequenz beschrieben, d.h. durch ein Wellenpaket. Die Geschwindigkeit des Teilchens ist dabei gegeben durch die Gruppengeschwindigkeit $v_g = d\omega/dk|_{k=k_0}$, d.h. durch die Geschwindigkeit, mit der sich das Wellenpaket als Ganzes fortbewegt. Im Gegensatz dazu gibt die Phasengeschwindigkeit $v_{ph} = \omega/k$ einer Materiewelle die Geschwindigkeit an, mit der sich Stellen konstanter Phase bewegen. Hängt die Phasengeschwindigkeit von der Frequenz ab, so spricht man von Dispersion. Bei Dispersion unterscheiden sich Phasen- und Gruppengeschwindigkeit.

- Die Phasengeschwindigkeit einer Materiewelle eines relativistischen Teilchens lässt sich schreiben in der Form $v_{\text{ph}} = c^2/v$, wobei v die Teilchengeschwindigkeit ist. Die Phasengeschwindigkeit ist also immer grösser als die Lichtgeschwindigkeit. Trotzdem ist sie aber nicht ganz ohne physikalische Bedeutung. Da das Plancksche Wirkungsquantum im Ausdruck nicht vorkommt, sind es aufgrund der klassischen Mechanik verständliche Phänomene wie die Brechung an der Grenzfläche zweier Gebiete, die durch die Phasengeschwindigkeit beschrieben werden können.
- Zur Aufstellung der de Broglie-Welle $\psi(x, t) = Ae^{i/h(px-Et)}$ dienten die ursprünglich für Photonen betrachteten Beziehungen $p = \hbar k$ und $E = \hbar\omega$. Dieses Vorgehen wird bestätigt durch das Ergebnis, dass die Gruppengeschwindigkeit v_g eines Wellenpakets aus superponierten de Broglie-Wellen, welches ein nicht-relativistisches oder ein relativistisches Teilchen beschreibt, gleich der Teilchengeschwindigkeit v ist.

Obwohl Photonen und Materieteilchen viele Gemeinsamkeiten haben, gibt es doch einen wichtigen Unterschied. Das Photon entspricht einem Teilchen verschwindender Ruhemasse und zeigt daher im Vakuum keine Dispersion. Ein massebehaftetes Teilchen zeigt hingegen Dispersion, d.h. verschiedene Frequenzkomponenten eines Wellenpakets haben verschiedene Ausbreitungsgeschwindigkeiten.

Kapitel 7

Das Atom

Das Wort Atom kommt aus dem Griechischen und bedeutet *unteilbar*. Als Atom wird dementsprechend der kleinste unveränderliche Bestandteil eines chemischen Elements bezeichnet. In diesem Kapitel untersuchen wir charakteristische Eigenschaften, wie Masse und Grösse, von Atomen, betrachten die Kategorisierung der Atome im Rahmen des Periodensystems der Elemente, beleuchten die Untersuchungsmethode Massenspektroskopie und lernen das Rutherfordsche Atommodell kennen, welches Ernest Rutherford aufgrund seiner Streuversuche von α -Teilchen an Atomen formulierte. Es dient insbesondere als Grundlage für das Bohrsche-Atommodell, das wir in Kapitel 8 besprechen werden.

7.1 Die Atommasse

Atommassen werden in sogenannten relativen Atommassen A_{rel} angegeben. Experimentell hat man festgestellt, dass alle Atome eine Masse haben, die ungefähr einem Vielfachen der Masse des Wasserstoffatoms entspricht. Deshalb wurde eine atomare Masseneinheit 1 u eingeführt, welche ungefähr der Masse eines Wasserstoffatoms entspricht. Dementsprechend wären zum Beispiel die relativen Atommassen A_{rel} für Stickstoff (N) und Sauerstoff (O) gegeben durch

$$A_{\text{rel}}(N) \sim 14 \text{ u}, \quad (7.1)$$

$$A_{\text{rel}}(O) \sim 16 \text{ u}. \quad (7.2)$$

Ab 1961 verwendete man aus experimentellen Gründen (präzisere Messungen von Atommassen) eine neue Definition der atomaren Masseneinheit

$$1 \text{ u} = 1/12 \text{ der Masse eines neutralen Kohlenstoffatoms } {}_6^{12}\text{C}, \quad (7.3)$$

wobei 12 die Massenzahl A und 6 die Kernladungszahl Z bezeichnen. Auf die Bedeutung von Massenzahl A und Kernladungszahl Z wird in Abschnitt 7.3 näher eingegangen.

Den Zusammenhang zwischen den relativen und den absoluten Atommassen ergibt sich aus dem Begriff des Mols. 1 mol ist die Stoffmenge, welche so viel Gramm wiegt, wie das relative Atomgewicht A_{rel} angibt. Demzufolge ergibt sich zum Beispiel für die Masse von 1 mol Kohlenstoff ${}_6^{12}\text{C}$ 12 g. Nach Lorenzo

Avogadro ist die Zahl der Atome oder Moleküle einer Substanz, welche in 1 mol enthalten sind immer gleich. Die Zahl wird mit N_A bezeichnet und heisst *Avogadro-Konstante*. Entsprechend der Definition für die atomare Masseneinheit 1 u, wird die Avogadro-Konstante N_A als die Anzahl Kohlenstoffatome in 12 g $^{12}_6\text{C}$ definiert. Sie ist gegeben durch

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}. \quad (7.4)$$

Damit ergibt sich für die absolute Atommasse m einer Substanz

$$m = \frac{A_{\text{rel}}}{N_A}. \quad (7.5)$$

Wir gehen nun kurz auf einige experimentelle Methoden zur Bestimmung der Avogadro-Konstante ein:

a) Elektrolyse

Bei der Elektrolyse wird ein Strom durch eine Flüssigkeit geleitet. Dazu werden zwei Elektroden (Kathode und Anode) in die Flüssigkeit eingeführt. Aufgrund des Stroms wird an den Elektroden eine Stoffmenge abgelagert, welche proportional zur Ladung ist, die in derselben Zeit durch die Flüssigkeit geflossen ist. Aufgrund dieses Gesetzes (Faraday-Gesetz) lässt sich aus einer Messung der abgeschiedenen Masse m , der Stromstärke I und der Zeit t die Avogadro-Konstante N_A bestimmen. Für eine einwertige Substanz gilt die Formel

$$N_A = \frac{A_{\text{rel}} I t}{m e}. \quad (7.6)$$

b) Gas- und Boltzmann-Konstante

Zwischen der Gaskonstante R , der Boltzmann-Konstante k_B und der Avogadro-Konstante N_A gilt der folgende Zusammenhang

$$N_A = R/k_B. \quad (7.7)$$

Demzufolge lässt sich die Avogadro-Konstante N_A aus der Gas- und Boltzmann-Konstante bestimmen.

c) Röntgen-Beugung

Wie in Abschnitt 3.4.2 besprochen, lässt sich mittels Röntgen-Licht bekannter Wellenlänge die Gitterkonstante a bzw. das Volumen V_{Atom} eines Atoms bestimmen. Die Avogadro-Konstante N_A ergibt sich dann aus folgender Formel

$$N_A = \frac{M}{\rho V_{\text{Atom}}}, \quad (7.8)$$

wobei M die Molmasse (entspricht bei Atomen dem relativen Atomgewicht A_{rel}) und ρ die Dichte bezeichnet.

7.2 Die Atomgrösse

Für die Bestimmung der Grösse von Atomen gibt es eine Vielzahl von Möglichkeiten. Weit verbreitet sind Streuexperimente, auf die wir als erstes näher eingehen werden.

7.2.1 Streuexperimente

Bei einem typischen Streuexperiment (siehe Abb. 7.1) trifft ein Teilchenstrahl (aus Atomen oder Molekülen) mit N_0 Teilchen, Strahlquerschnittsfläche A und Teilchenradius r_1 auf eine dünne Schicht der Dicke dx von Atomen mit Radius r_2 und Dichte n . Die Frage die nun untersucht wird ist: Wie viele Teilchen aus dem Strahl stossen mit Atomen aus der dünnen Schicht zusammen? Oder in anderen Worten: Welcher Anteil der Teilchen aus dem einfallenden Strahl kann die Schicht nicht ungestört passieren?

Um diese Frage zu beantworten, führen wir eine neue Grösse ein, den *Wirkungsquerschnitt*. Der Wirkungsquerschnitt σ ist eine Fläche, welche folgendermassen definiert ist: Begegnen sich einfallendes und ruhendes Teilchen innerhalb der Fläche σ , so kommt es zum Zusammenstoss (zu einer Wechselwirkung), ansonsten nicht. Daher ist in unserem Fall der Wirkungsquerschnitt σ gegeben durch (siehe Abb. 7.2)

$$\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2. \quad (7.9)$$

Mit Hilfe des Wirkungsquerschnitts können wir nun die Wahrscheinlichkeit W angeben, mit der ein einfallendes Teilchen innerhalb der Schicht einen Stoss erfährt. Sie ist gegeben durch die Anzahl der Fälle in denen ein Stoss auftritt geteilt durch die Gesamtzahl der Fälle

$$W = \frac{\text{Fläche aller Wirkungsquerschnitte im durchschossenen Volumen}}{\text{Querschnittsfläche des einfallenden Strahls } A} = \frac{\sum_i \sigma_i}{A}. \quad (7.10)$$

Dabei nehmen wir an, dass die Querschnittsflächen der Teilchen im durchschossenen Volumen nicht überlappen. Dies ist erfüllt, wenn die Dichte im betrachteten Volumen ausreichend gering ist.

Wir gehen einen Schritt weiter indem wir eine Schicht der Länge L (in Strahlrichtung) betrachten und die Anzahl der transmittierten Teilchen des einfallenden Teilchenstrahls bestimmen. Dabei gehen wir von der zuvor betrachteten Situation aus und zerlegen das Volumen in dünne Schichten der Dicke dx .

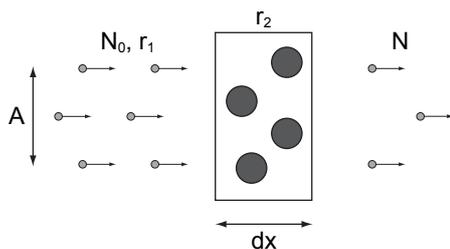


Abb. 7.1: Schematischer Aufbau eines typischen Streuexperimentes: Ein Teilchenstrahl mit N_0 Teilchen, Strahlquerschnittsfläche A und Teilchenradius r_1 trifft auf eine dünne Schicht der Dicke dx von Atomen mit Radius r_2 und Dichte n .

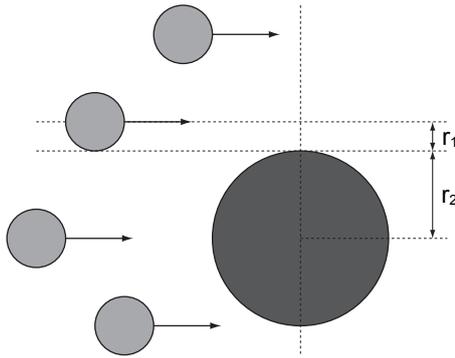


Abb. 7.2: Illustration zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts: Zusammenstoß zwischen einfallenden Teilchen mit Radius r_1 und ruhendem Teilchen mit Radius r_2 .

Treten in eine solche dünne Schicht N' Teilchen ein, so erleidet ein Bruchteil $dN' = -WN'$ einen Stoß und wird abgelenkt. Somit erhalten wir mit (7.10) für den Anteil der in der Schicht dx gestreuten Teilchen

$$\frac{dN'}{N'} = -\frac{WN'}{N'} = -\frac{nAdx\sigma}{A} = -n\sigma dx. \quad (7.11)$$

Den Anteil der transmittierten Atome auf der gesamten Länge L erhalten wir durch Integration

$$\int_{N_0}^N \frac{dN'}{N'} = -n\sigma \int_0^L dx. \quad (7.12)$$

Für die Zahl N der transmittierten Teilchen ergibt sich

$$N = N_0 e^{-n\sigma L} \quad (7.13)$$

und für die Zahl der abgelenkten Teilchen erhalten wir

$$N_0 - N = N_0 (1 - e^{-n\sigma L}). \quad (7.14)$$

Das Produkt $n\sigma = \alpha$ wird dabei als *makroskopischer Streukoeffizient* bezeichnet.

Um nun die Grösse eines Atoms zu bestimmen, geht man folgendermassen vor:

1. Man führt ein Streuexperiment durch und bestimmt die Anzahl der einfallenden Teilchen N_0 und der austretenden Teilchen N , sowie die Teilchendichte n und die Länge L des Streukörpers.
2. Mit Hilfe von (7.13) bestimmt man aus den experimentell bestimmten Grössen N_0 , N , n und L den Wirkungsquerschnitt σ .
3. Mit (7.9) erhält man die Summe der Radien der einfallenden Teilchen (Atome) und den Atomen des Streukörpers. Sind diese Atome identisch ($r_1 = r_2 \equiv r$), so ergibt sich der Atomradius r und somit die Grösse eines Atoms.

Atomgrößen werden experimentell oft nicht mittels dem Wirkungsquerschnitt σ sondern mittels der *mittleren freien Weglänge* ℓ bestimmt. Diese ist folgendermassen definiert: ℓ ist die Strecke, nach der nur noch ein Anteil von $1/e$ ($\sim 37\%$) der eintreffenden Teilchen N_0 nicht gestreut worden sind, d.h. es gilt

$$\frac{N}{N_0} = \frac{1}{e} = e^{-n\sigma\ell}. \quad (7.15)$$

Daraus ergibt sich für die mittlere freie Weglänge ℓ der folgende Ausdruck

$$\ell = \frac{1}{n\sigma}. \quad (7.16)$$

Unter der Annahme von $r_1 = r_2 \equiv r$ erhalten wir

$$\ell = \frac{1}{4\pi r^2 n}. \quad (7.17)$$

Würde man auch die Bewegung der gestossenen Teilchen, die wir bis jetzt vernachlässigt haben, berücksichtigen, so ändert sich die Form dieses Ausdrucks folgendermassen

$$\ell = \frac{1}{4\pi\sqrt{2}r^2 n}. \quad (7.18)$$

Betrachtet man anstelle von Teilchen Licht, so gilt für dessen Intensität I nach dem Durchgang durch eine absorbierende Schicht der Dicke x

$$I = I_0 e^{-\alpha x}. \quad (7.19)$$

Dieses Gesetz wird *Beersches Gesetz* genannt. Dabei entspricht I der durchgehenden Lichtintensität, I_0 der einfallenden Lichtintensität und α der Absorptionskonstante der absorbierenden Schicht.

7.2.2 Weitere Methoden zur Bestimmung der Atomgröße

a) Bestimmung der Atomgröße aus dem Kovolumen

Ein reales Gas kann näherungsweise mit der *Van der Waals-Gleichung*¹ beschrieben werden

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT, \quad (7.20)$$

wobei p der Druck, V das Volumen, R die Gaskonstante, T die Temperatur und a und b zwei Konstanten sind, welche folgende Bedeutung haben: Aufgrund der kurzreichweitigen Abstossung zwischen den Atomen in einem Gas steht dem Gas nur das reduzierte Volumen $V - b$ zur Verfügung und wegen der langreichweitigen Abstossung ergibt sich ein zusätzlicher Druck

¹Der Namensgeber Johannes van der Waals erhielt für seine Arbeiten über die Zustandsgleichung von Gasen und Flüssigkeiten und insbesondere für das Aufstellen dieser Gleichung 1910 den Nobelpreis in Physik.

a/V^2 . Die Konstante b lässt sich näherungsweise aus dem pV -Diagramm bestimmen und entspricht dem vierfachen Wert des Volumens aller Atome in 1 mol

$$b = 4 \frac{4\pi}{3} r^3 N_A, \quad (7.21)$$

wobei N_A die Avogadro-Konstante ist. Daraus lässt sich das Atomvolumen bzw. den Atomradius bestimmen.

b) Bestimmung der Atomgröße mittels Röntgen-Beugung

Der zweiten Methode sind wir schon ein paar Mal begegnet. Wie in Abschnitt 3.4.2 besprochen, lässt sich die Gitterkonstante - und damit auch eine Abschätzung der Atomgröße - aus der Röntgen-Beugung (Bragg-Reflexion) gewinnen. Drei praktische Verfahren sind:

- **Laue-Verfahren:** Ein Einkristall² wird unter einem festen Einfallswinkel mit Röntgen-Licht, welches ein kontinuierliches Spektrum aufweist, bestrahlt. Die Bragg-Bedingung ist dann jeweils für bestimmte Wellenlängen erfüllt.
- **Braggsches Drehkristall-Verfahren:** Ein Einkristall wird mit monochromatischem³ Röntgen-Licht bestrahlt und dabei gleichzeitig gedreht. Die Bragg-Bedingung ist dann jeweils für bestimmte Einfallswinkel erfüllt.
- **Debye-Scherrer-Verfahren:** Eine polykristalline⁴ Probe wird unter einem festen Einfallswinkel mit monochromatischem Licht bestrahlt. Da in der polykristallinen Probe alle möglichen Orientierungen vorkommen, ergeben sich Ringe auf dem Beobachtungsschirm.

7.2.3 Abbildungstechniken

Bei der Besprechung einiger Abbildungstechniken soll die Frage im Zentrum stehen, ob es möglich ist atomare Abmessungen aufzulösen, d.h. einzelne Atome „zu sehen“. Der zentrale Begriff dabei ist das Auflösungsvermögen. Darunter versteht man den kleinsten Abstand d zwischen Strukturen, die noch als getrennt abgebildet werden können. Bekannte Abbildungstechniken sind:

- a) **Lichtmikroskop.** Das zu untersuchende Objekt wird durch verschiedene Linsen betrachtet. Das Auflösungsvermögen ist dabei durch die Wellenlänge des verwendeten Lichts begrenzt. Für sichtbares Licht erreicht man eine Auflösung von $d \sim 500$ nm und für Röntgen-Strahlung eine Auflösung von einigen 100 Å.

²Unter einem Einkristall versteht man einen Festkörper, dessen Atome ein einheitliches homogenes Kristallgitter bilden.

³Monochromatisches Licht ist Licht mit einer bestimmten Frequenz bzw. Wellenlänge.

⁴Eine polykristalline Probe besteht aus vielen verschiedenen Einkristallen.

- b) **Elektronenmikroskop.** Durch die Verwendung von Elektronen zur Abbildung von Strukturen lässt sich aufgrund der kleineren Wellenlänge im Vergleich zu Licht das Auflösungsvermögen verbessern. Man erreicht eine Auflösung von $d \sim 0.1$ nm, was erlaubt einzelne Atome räumlich aufzulösen.
- c) **Rastertunnelmikroskop (STM).** Mit einem STM erreicht man ein ähnliches Auflösungsvermögen wie mit einem Elektronenmikroskop. Beim STM wird die Oberfläche einer Probe mit einer elektrisch leitenden Spitze abgerastert. Die Spitze ist jedoch nicht in direktem Kontakt mit der Oberfläche. Legt man eine kleine Spannung V zwischen Spitze und Oberfläche an, so ist es möglich, dass Elektronen von der Spitze auf die Probe und umgekehrt gelangen können. Es fließt daher ein Strom. Dieser Effekt wird Tunneleffekt genannt und der Strom wird dementsprechend Tunnelstrom genannt. Mit dieser Methode, die wir in einem späteren Kapitel genauer kennen lernen werden, erhält man eine Abbildung der elektronischen Struktur einer Oberfläche.
- d) **Ionenfalle.** In einer Ionenfalle können einzelne Ionen eingefangen und einzeln untersucht werden. Die Ionen werden dabei durch elektromagnetische Felder in der Falle festgehalten. Mit dieser Methode ist es möglich einzelne einige Mikrometer auseinanderliegende Ionen abzubilden. Das Auflösungsvermögen ist optisch begrenzt und beträgt $d \sim 500$ nm.

In Tab. 7.1 sind die Auflösungsvermögen d für die verschiedenen Abbildungstechniken zusammengefasst.

Abbildungstechnik	Auflösungsvermögen d [nm]
Lichtmikroskop (sichtbares Licht)	~ 500
Lichtmikroskop (Röntgen-Licht)	einige 10
Elektronenmikroskop	~ 0.1
Rastertunnelmikroskop (STM)	~ 0.1
Ionenfalle	~ 500

Tab. 7.1: Auflösungsvermögen verschiedener Abbildungstechniken.

7.3 Das Periodensystem der Elemente

Das Periodensystem der Elemente (siehe Abb. 7.3) wurde von den beiden Chemikern Dmitri Iwanowitsch Mendelejew und Lothar Meyer im Jahr 1869 unabhängig voneinander aufgestellt und ist eine Anordnung der Atome nach ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften.

Das Periodensystem besteht aus acht vertikalen Gruppen mit Nebengruppen und sieben horizontalen Perioden. Diese Einteilung kommt aufgrund der chemischen und physikalischen Eigenschaften der Atome zustande. Sie spiegelt insbesondere den Aufbau der Atome und die dabei geltenden Gesetzmäßigkeiten wider.

Das Periodensystem der Elemente



Ordnungszahl		Masse (u)		Symbol		Vorkommen	
1	1	1.0079	H	x fest	o natürlich		
				x flüssig	o nat. radioaktiv		
				x gasförmig	o synthetisch		

Serie		Alkalimetall		Erdalkalimetall		Lanthanoid		Actinoid		Übergangsmetall		Halbmetall		Metalloid		Nichtmetall		Halogen		Edelgas	

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18														
1 H 1.0079	2 He 4.0026	3 Li 6.941	4 Be 9.0122	5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.18	11 Na 22.99	12 Mg 24.305	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948														
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798														
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.96	43 Tc [97.90]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.29														
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [144.9]	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.5	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.05	71 Lu 174.97	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [208.9]	85 At [209.9]	86 Rn [222.0]
87 Fr [223.0]	88 Ra [226.0]	89 Ac [227.0]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np [237.0]	94 Pu [244.0]	95 Am [243.0]	96 Cm [247.0]	97 Bk [247.0]	98 Cf [251.0]	99 Es [252.0]	100 Fm [257.0]	101 Md [258.0]	102 No [259.1]	103 Lr [262.1]	104 Rf [263.1]	105 Db [262.1]	106 Sg [266.1]	107 Bh [264.1]	108 Hs [269.1]	109 Mt [268.1]	110 Ds [272.1]	111 Rg [272.1]	112 Uub [277]	113 Uut [284]	114 Uuq [289]	115 Uup [288]	116 Uuh [292]	117 Uus [292]	118 Uuo [294]

Innere Übergangsmetalle (Lanthanoide und Actinoide)

57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [144.9]	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.5	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.05	71 Lu 174.97
89 Ac [227.0]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np [237.0]	94 Pu [244.0]	95 Am [243.0]	96 Cm [247.0]	97 Bk [247.0]	98 Cf [251.0]	99 Es [252.0]	100 Fm [257.0]	101 Md [258.0]	102 No [259.1]	103 Lr [262.1]

(c) Copyright 2008 Periodensystem.info - Alle Rechte vorbehalten. Vervielfältigung nur mit Genehmigung.

Abb. 7.3: Das Periodensystem der Elemente. [8]

Die Atome werden mit einem Symbol abgekürzt, z.B. steht H für Wasserstoff, He für Helium, Die Reihenfolge und Nummerierung der Atome kommt folgendermassen zustande: Wie wir in späteren Abschnitten sehen werden, sind Atome aus Elektronen, Protonen und Neutronen aufgebaut. Die Protonen und Neutronen bilden den Atomkern, der im Zentrum einer Elektronenwolke sitzt, die die Kernladung kompensiert. Ein Atom besteht aus gleich vielen Protonen und Elektronen. Im Periodensystem werden die Atome nun nach steigender *Kernladungszahl* Z (auch *Ordnungszahl* genannt) aufgeführt. Sie ist oberhalb jedes Atoms aufgeführt und entspricht der Anzahl der Protonen und somit auch der Anzahl der Elektronen im Atom. Unterhalb jedes Atoms ist die relative Atommasse A_{rel} angegeben. In diesem Zusammenhang führen wir noch den Begriff der Massenzahl A ein. Sie ist die der relativen Atommasse A_{rel} nächstgelegene ganze Zahl und entspricht der Summe der Anzahl Protonen und Neutronen, d.h. es gilt

$$A = Z + N, \quad (7.22)$$

wobei N für die Anzahl der Neutronen steht.

Zum Abschluss dieses kurzen Überblicks ein paar Bemerkungen zum Begriff der *Isotopie*: Zwei Atome, welche gleiche Kernladungszahl Z , aber unterschiedliche Massenzahl A haben werden als *Isotope* bezeichnet. Der Unterschied in der Massenzahl A kommt durch die unterschiedliche Anzahl Neutronen N im Kern der Atome zustande. Dieses Phänomen wurde mittels der Massenspektroskopie entdeckt, die wir im nächsten Abschnitt besprechen werden.

7.4 Massenspektroskopie

Die Massenspektroskopie dient zur Trennung von Atomsorten, welche unterschiedliche Ladungs-Massenverhältnisse q/m aufweisen und wie im vorangehenden Abschnitt erwähnt, stand sie damit auch am Ursprung der Entdeckung der Isotopie.

7.4.1 Parabelmethode nach Joseph John Thomson

Die Parabelmethode ist eine der ersten Methoden der Massenspektroskopie. Sie wurde 1913 von Joseph John Thomson entwickelt. Bei der verwendeten Versuchsanordnung (siehe Abb. 7.4) wird ein Ionenstrahl bzw. ein Strahl geladener Teilchen mit unterschiedlichen Ladungs-Massenverhältnissen q/m durch ein elektrisches Feld $vec{E}$ eines Kondensators und einem dazu parallelen Magnetfeld $vec{B}$ räumlich getrennt. Auf dem Beobachtungsschirm ordnen sich die Teilchen mit gleichem Ladungs-Massenverhältnis q/m , aber unterschiedlicher Geschwindigkeit v entlang einer Parabel an, daher auch der Name Parabelmethode. So entsteht schlussendlich auf dem Beobachtungsschirm eine Schar unterschiedlicher Parabeln, die jeweils einem bestimmten Ladungs-Massenverhältnis q/m zuzuordnen sind.

Wir geben nun eine kurze Herleitung dieses Sachverhalts, wobei wir in einem ersten Schritt den Einfluss von elektrischem Feld E und Magnetfeld B getrennt betrachten:

- a) Das **elektrische Feld** E ist homogen entlang der y -Richtung. Dadurch erfährt ein geladenes Teilchen eine Ablenkung entlang dieser Richtung.

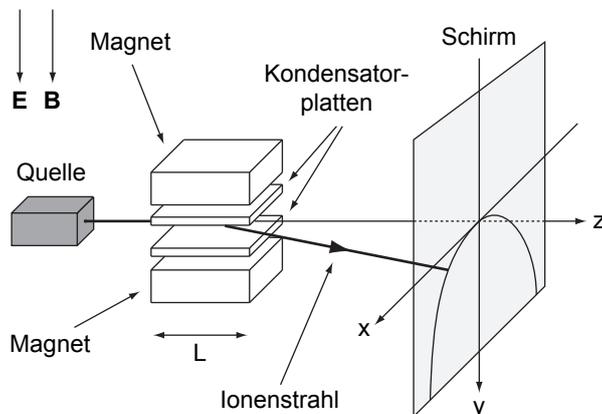


Abb. 7.4: Versuchsanordnung für die Massenspektroskopie nach der Parabelmethode von Joseph John Thomson. Auf die einzelnen Bestandteile des Experiments wird im Text eingegangen.

Für die y-Koordinate y eines geladenen Teilchens der Ladung q gilt die Bewegungsgleichung

$$\ddot{y} = \frac{q}{m} E. \quad (7.23)$$

Daraus folgt für die y-Koordinate

$$y = \frac{1}{2} \frac{qE}{m} t^2 = \frac{q}{2m} E \frac{L^2}{v^2}, \quad (7.24)$$

wobei wir im zweiten Schritt die Verweilzeit t des Teilchens im Kondensator durch seine Geschwindigkeit v und die Kondensatorlänge L ausgedrückt haben. Dabei haben wir angenommen, dass das Magnetfeld klein und der Bahnradius des Teilchens gross ist.

- b) Das **magnetische Feld** B ist wie das elektrische Feld E homogen entlang der y-Richtung. Dadurch erfährt das geladene Teilchen eine Lorentz-Kraft F_L , welche es auf eine Kreisbahn in der Ebene senkrecht zur Feldrichtung (xz-Ebene) zwingt. Dabei nimmt die Lorentz-Kraft F_L die Funktion einer Zentripetalkraft F_Z ein

$$F_L = F_Z \Rightarrow evB = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow r = \frac{mv}{qB}, \quad (7.25)$$

wobei r dem Bahnradius entspricht und allgemein als *Zyklotronradius* bezeichnet wird. Daraus ergibt sich für die Zentripetalbeschleunigung a_Z

$$a_Z = \frac{eBv}{m}. \quad (7.26)$$

Das geladene Teilchen befindet sich nur eine relativ kurze Zeit unter dem Einfluss des Magnetfeld und daher können wir annehmen, dass die Bewegung entlang der x-Richtung eine gleichmässig beschleunigte Bewegung mit der Beschleunigung a_Z ist. In der Zeit t kommt es damit zu folgender Ablenkung x in x-Richtung

$$x = \frac{1}{2} a_Z t^2. \quad (7.27)$$

Wiederum ersetzen wir die Verweilzeit t durch den Quotienten L/v . Wir erhalten mit (7.26)

$$x = \frac{qBL^2}{2mv}. \quad (7.28)$$

Auflösen von (7.28) nach v und einsetzen in (7.24) ergibt

$$y = \frac{2E}{L^2 B^2} \frac{m}{q} x^2. \quad (7.29)$$

Diese Gleichung ist die Gleichung einer Parabel. Die Form hängt dabei von den bekannten Grössen E , B und L , sowie dem Ladungs-Massenverhältnis

q/m ab. Somit ist die zu Beginn getätigte Aussage bestätigt: Auf dem Beobachtungsschirm entsteht eine Schar unterschiedlicher Parabeln, die jeweils einem bestimmten Ladungs-Massenverhältnis q/m zuzuordnen sind. Damit ist wie bereits erwähnt eine räumliche Trennung von Isotopen - oder ganz allgemein die Trennung von geladenen Teilchen mit unterschiedlichen Ladungs-Massenverhältnissen q/m - möglich. Zusätzlich kann bei bekannter Ladung q aus der Form einer Parabel die Teilchenmasse m bestimmt werden.

7.4.2 Verbesserungen der Parabelmethode

In den Jahren nach der Erfindung der Parabelmethode durch Joseph John Thomson wurden diverse Verbesserungen angebracht, die zu hochauflösenden Massenspektrometern führten:

- a) 1918 führte Arthur Jeffrey Dempster die **Richtungsfokussierung** ein. Damit wurde erreicht, dass Teilchen mit den identischen physikalischen Eigenschaften (Geschwindigkeit und Ladungs-Massenverhältnis) aber unterschiedlicher Einschussrichtung trotzdem am selben Ort auf dem Beobachtungsschirm auftreffen.
- b) 1919 entwickelte Francis William Aston⁵ die **Geschwindigkeitsfokussierung**. Der Effekt war, dass die geladenen Teilchen mit unterschiedlichen Ladungs-Massenverhältnissen q/m sich neu in einem einzelnen Punkt und nicht mehr verteilt auf einer Parabel sammeln. Im Wesentlichen werden dazu gekreuzte anstatt parallele elektrische und magnetische Felder verwendet. Das Massenaufklärungsvermögen $m/\Delta m$ beträgt für diese Methode

$$\frac{m}{\Delta m} \sim 130, \quad (7.30)$$

wobei Δm die kleinste noch unterscheidbare Massendifferenz ist.

- c) Die Kombination der Richtungs- und Geschwindigkeitsfokussierung wird **Doppelfokussierung** genannt. Man erreicht heute Auflösungen von

$$\frac{m}{\Delta m} > 100000. \quad (7.31)$$

7.4.3 Anwendungen der Massenspektroskopie

Neben der bereits erwähnten Verwendung in der Atomphysik zur Analyse und Trennung von Zusammensetzungen verschiedener Isotope findet die Massenspektroskopie in diversen Gebieten der Chemie und Physik ihre Anwendung:

- a) Analyse und Identifizierung von Stoffen in der Chemie.
- b) Restgas-Analyse in Vakuumsystemen in der Physik, Chemie und Technik.
- c) Erzeugung von isotopenreinen Atom- und Molekülstrahlen.

⁵Aston erhielt 1922 für seine Arbeiten im Bereich der Massenspektroskopie den Nobelpreis in Chemie.

Es sei hier noch die Bemerkung angefügt, dass zur Trennung von Zusammensetzungen verschiedener Isotope neben der Massenspektroskopie diverse andere Methoden zur Verfügung stehen und eingesetzt werden. Eine Übersicht gibt zum Beispiel das Buch *Atom- und Quantenphysik* von Hermann Haken und Hans Wolf [9].

7.5 Die Kernstruktur des Atoms

Ein erster Schritt in Richtung dem Atommodell, das wir heute kennen, lieferten Erkenntnisse aus Streuexperimenten mit Elektronen an Materie (Atomen) sowie die durch Rutherford durchgeführten Streuexperimenten mit α -Teilchen an Goldfolien.

7.5.1 Elektronen-Streuung

Erste Untersuchungen von Atomen durch Elektronen-Streuung gehen etwa auf das Jahr 1890 zurück. Sie wurden vom deutschen Physiker Philipp Lenard durchgeführt (siehe Abb. 7.5): (1) Mittels Thermoemission werden Elektronen erzeugt, die dann (2) beschleunigt werden und (3) mit Atomen wechselwirken. Die Elektronen, die durchgehen, werden (4) in einem Elektronen-Detektor aufgefangen und gezählt.

Bei der Wechselwirkung der Elektronen mit den Atomen können verschiedene Streuprozesse auftreten:

- a) Es kommt zur **inelastischen Streuung**, d.h. die Elektronen verlieren beim Zusammenstoß mit den Atomen ihre Energie. Dies kann durch Anregung oder Ionisation von Atomen zustande kommen.
- b) Es kommt zur **elastischen Streuung**, d.h. die Elektronen behalten ihre Energie bei, ändern aber ihre Richtung.

Führt man das beschriebene Experiment durch, so beobachtet man, dass bei ausreichend hohen Beschleunigungsspannungen U Elektronen einige cm Gas (bei Normaldruck 1 bar) bzw. einige μm dicke Metallplatten ($\sim 10^4$ Atomlagen) durchdringen können. Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Atomen ist folglich viel kleiner als die Wechselwirkung zwischen Atomen. Insbesondere zeigt dieses Resultat, dass Atome für Elektronen durchdringbar sind. Wäre dem nicht

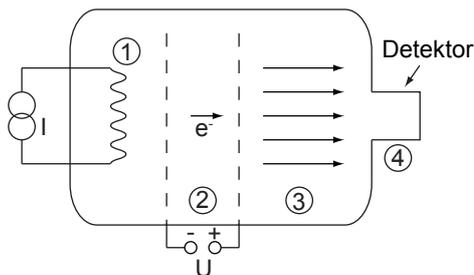


Abb. 7.5: Schematischer Aufbau zur Untersuchung der Atomstruktur durch Elektronen-Streuung. Auf die einzelnen Teile der Versuchsanordnung wird im Text eingegangen.

so, so würde eine Streuung der Elektronen innerhalb der mittleren gaskinetischen freien Weglänge (10^{-7} m) stattfinden.

Wir kommen nun zur quantitativen Messung des Wirkungsquerschnitts σ . Der Aufbau eines möglichen Experiments entspricht im Wesentlichen dem in Abb. 7.5. Dabei wird die einfallende und die durchgelassene Elektronen-Intensität I_0 bzw. I , sowie die Dichte n der Streuatome bestimmt. Diese Messungen erfolgen für verschiedene Beschleunigungsspannungen U . Der Wirkungsquerschnitt σ ergibt sich aus der Formel (7.19)

$$I = I_0 e^{-\alpha x}. \quad (7.32)$$

wobei x der Länge der Wechselwirkungszone zwischen Elektronen und Atomen und α dem makroskopischer Streukoeffizient entsprechen. Unter der Annahme von gleichen Streuatomen gilt

$$\alpha = n\sigma = n\pi(r_1 + r_2)^2. \quad (7.33)$$

Die Summe $r_1 + r_2$ bezeichnen wir mit R . R entspricht dem sogenannten Stossradius. Das Resultat einer Messung des Stossradius R in Abhängigkeit der Elektronengeschwindigkeit v (siehe Abb. 7.6) zeigt, dass nur ein kleiner Bruchteil eines Atoms für Elektronen (insbesondere schnelle Elektronen) undurchlässig ist. Nach Lenard ist das Innere eines Atoms so leer wie das Weltall. Daraus wurde geschlossen, dass Masse und Ladung ungleichmässig (körnig) im Atom verteilt sind.

Die Vorstellung eines Atomkerns, der die gesamte positive Ladung und beinahe die gesamte Masse des Atoms enthält, entstand durch die Versuche von Rutherford mit denen wir uns im nächsten Abschnitt beschäftigen.

7.5.2 Rutherford-Streuung und das Rutherfordsche Atommodell

Rutherford untersuchte in seinen Versuchen nicht die Streuung von Elektronen, sondern die Streuung von α -Teilchen an einer Folie. α -Teilchen sind doppelt ionisierte Helium-Kerne ${}^4_2\text{He}^{++}$ mit einer hohen kinetischen Energie $E_{\text{kin}} \sim 5$ MeV. Sie entstehen bei einem radioaktiven Zerfall. Für α -Teilchen ist es möglich viele Atomschichten zu passieren bis sie alle ihre kinetische Energie an die Atome abgegeben haben. Z.B. kommen α -Teilchen in Luft unter Normalbedingungen erst nach einer Strecke von 3.5 cm zum Stillstand.

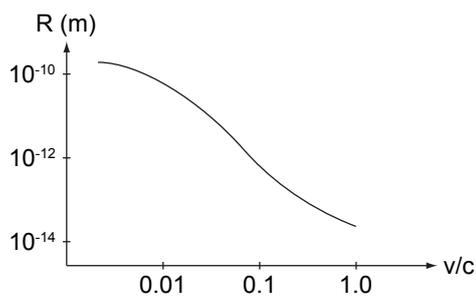


Abb. 7.6: Stossradius R in Abhängigkeit der Elektronengeschwindigkeit v (ausgedrückt in Einheiten der Lichtgeschwindigkeit c).

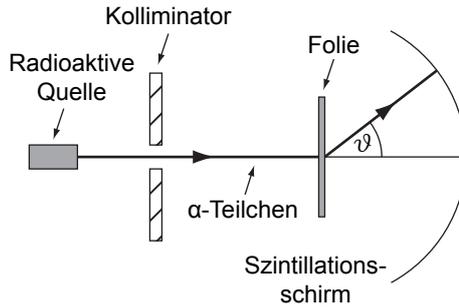


Abb. 7.7: Versuchsaufbau des Rutherford-Streuexperimentes: Mittels radioaktiver Quelle erzeugter α -Teilchen werden an einer Folie gestreut und anschliessend auf einem Szintillationsschirm registriert.

Beim Rutherford-Streuexperiment (siehe Abb. 7.7) werden α -Teilchen durch den Zerfall eines radioaktiven Materials erzeugt. Der Strahl wird durch einen Kollimator gebündelt und trifft auf eine Metallfolie. Als Detektor dient ein Szintillationsschirm, welcher durch die α -Teilchen angeregt wird und Licht ausstrahlt, welches beobachtet werden kann.

In diesem Experiment interessiert uns nicht wie bisher die ungestört durchgelassenen Intensität der α -Teilchen, sondern die Intensität der gestreuten α -Teilchen in Abhängigkeit des Streuwinkels ϑ . Die Messung liefert folgendes Ergebnis:

- a) Die Streuintensität zeigt eine starke Abhängigkeit vom Streuwinkel ϑ .
- b) Eine genaue Analyse liefert für die Streuintensität I

$$I \propto \frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)}. \quad (7.34)$$

- c) Es kommen sehr grosse Streuwinkel ϑ vor.

Rutherford deutete diese Resultate wie folgt (siehe Abb. 7.8):

Rutherford'sches Atommodell (1911)

- Ein Atom besitzt einen Kern mit Radius $R \sim 10^{-14}$ m, welcher beinahe die gesamte Masse des Atoms enthält. Die Streuung von α -Teilchen erfolgt fast ausschliesslich an diesen Kernen.
- Der Atomkern enthält die gesamte positive Ladung Ze . Dabei bezeichnet Z die Kernladungszahl.
- Der Atomkern ist aus Neutralitätsgründen von negativ geladenen Elektronen umgeben.
- Die Wechselwirkung zwischen α -Teilchen und Atomkern ist rein elektrostatisch und durch die Coulomb-Wechselwirkung bestimmt.

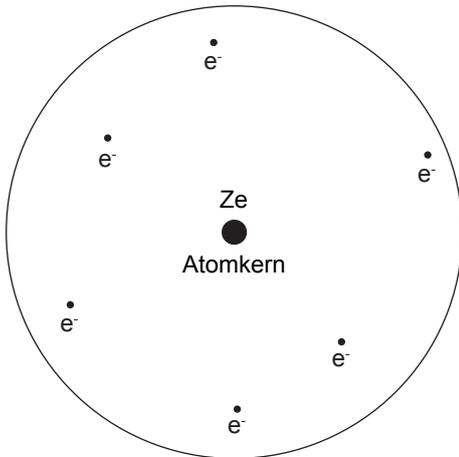


Abb. 7.8: Rutherford'sches Atommodell: Ein Atomkern der Ladung Ze ist von negativen Elektronen umgeben.

7.5.3 Rutherford'sche Streuformel

Wir kommen nun zurück zum ursprünglichen Streuexperiment und leiten eine Formel für die Streuintensität in Abhängigkeit des Streuwinkels ϑ her. Wir betrachten die Streuung von α -Teilchen an einem Atomkern der Ladung Ze (siehe Abb. 7.9).

Es gelten die folgenden **Annahmen**:

- Die α -Teilchen und der Atomkern sind punktförmig.
- Der Kern bleibt in Ruhe, was gleichbedeutend mit der Annahme ist, dass die Masse des Kerns viel grösser ist als die Masse eines α -Teilchen.
- Würden die α -Teilchen nicht abgelenkt, so würden sie in einem Abstand b am Kern vorbeifliegen. b wird *Stossparameter* genannt.
- Wie im Rutherford'schen Atommodell bereits erwähnt ist die Wechselwirkung zwischen α -Teilchen und Atomkern rein elektrostatisch und durch die Coulomb-Wechselwirkung bestimmt. Die Coulomb-Kraft \vec{F}_C zwischen einem α -Teilchen der Ladung $2e$ und dem Atomkern der Ladung Ze ist

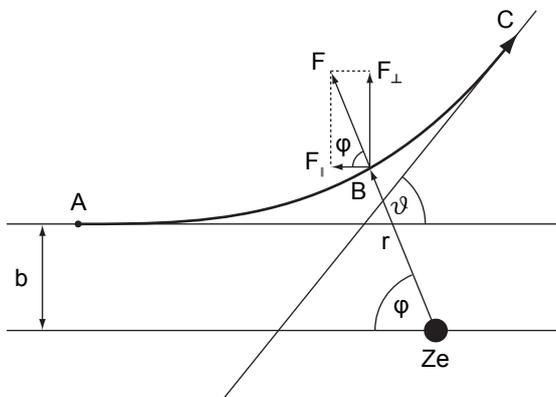


Abb. 7.9: Skizze der Rutherford-Streuung zur Herleitung der Rutherford'schen Streuformel.

gegeben durch

$$\vec{F}_C = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{r}, \quad (7.35)$$

wobei r der Abstand zwischen α -Teilchen und Kern bezeichnet.

- Aus der Mechanik wissen wir, dass ein $1/r$ -Zentralpotenzial als mögliche Bahnkurven Ellipsen, Hyperbeln oder Parabeln zulässt. Da die Coulomb-Kraft eine abstossende Wirkung hat, kommen als mögliche Bahnkurven jedoch nur Hyperbeln mit dem Atomkern im Brennpunkt in Frage.

Die **Vorgehensweise** ist nun die folgende:

1. In einem ersten Schritt betrachten wir die Streuung eines einzelnen α -Teilchens an einem einzelnen Atomkern und berechnen den Zusammenhang zwischen Stossparameter b und Streuwinkel ϑ .
2. In der Realität ist es nicht möglich die Streuung eines einzelnen α -Teilchens an einem einzelnen Atomkern zu betrachten. Wir erweitern daher in einem zweiten Schritt das Modell auf N α -Teilchen, welche an einer Folie (Dicke D , Fläche A und Dichte n) streuen und bestimmen die Zahl dN der Teilchen welche vom Detektor bei einem bestimmten Streuwinkel ϑ registriert werden.

Wir kommen zur **Herleitung** nach der oben aufgeführten Vorgehensweise:

1. Die Anfangsgeschwindigkeit des α -Teilchens im Punkt A sei v_0 . Wie bereits erwähnt bewegt sich das α -Teilchen entlang einer Hyperbel. Wir betrachten nun das α -Teilchen in einem beliebiger Punkt B mit den Polarkoordinaten (r, φ) auf dieser Hyperbel und zerlegen die dort wirkende Kraft F in eine senkrechte und eine horizontale Komponente F_\perp bzw. F_\parallel , d.h. es gilt

$$F_\perp = F \sin \varphi, \quad (7.36)$$

$$F_\parallel = F \cos \varphi. \quad (7.37)$$

Entlang der Hyperbel sind Kraft \vec{F} und Abstandsvektor \vec{r} immer parallel zueinander. Demzufolge verschwindet das Drehmoment $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F}$ und der Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ ist entlang der Hyperbel erhalten. Insbesondere können wir den Bahndrehimpuls in Punkt A mit demjenigen in Punkt B gleichsetzen

$$mv_0 b = mr^2 \dot{\varphi}. \quad (7.38)$$

Wir stellen nun die Bewegungsgleichung für die Bewegung senkrecht zur ursprünglichen Flugrichtung auf

$$m \frac{dv_\perp}{dt} = F_\perp = F \sin \varphi = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sin \varphi. \quad (7.39)$$

Integration über die Zeit von Punkt A nach C und ersetzen von $1/r^2$ mit Hilfe von (7.38) liefert

$$\int_{t_A}^{t_C} \frac{dv_{\perp}}{dt} dt = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0b} \int_{t_A}^{t_C} \sin\varphi \frac{d\varphi}{dt} dt. \quad (7.40)$$

Wir substituieren auf der linken Seite $t \rightarrow v_{\perp}$ und auf der rechten Seite $t \rightarrow \varphi$ und erhalten

$$\int_{v_{\perp,A}}^{v_{\perp,C}} dv_{\perp} = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0b} \int_{\varphi_A}^{\varphi_C} \sin\varphi d\varphi. \quad (7.41)$$

Zur Auswertung des Integrals betrachten wir die Grenzen etwas genauer. Wir nehmen an, dass der Punkt A soweit vom Kern entfernt ist (im Unendlichen), dass keine Coulomb-Kraft wirkt und daher $v_{\perp,A} = 0$ ist. Ausserdem gilt: $\varphi_A = 0$. Auch den Punkt C schieben wir ins Unendliche, sodass gilt $\varphi_C = \pi - \vartheta$. Die Geschwindigkeit entspricht aufgrund der Energieerhaltung derjenigen Geschwindigkeit im Punkt A. Folglich gilt $v_{\perp,C} = v_0 \sin\vartheta$. Einsetzen der Grenzen in (7.41) liefert

$$\int_0^{v_0 \sin\vartheta} dv_{\perp} = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0b} \int_0^{\pi-\vartheta} \sin\varphi d\varphi. \quad (7.42)$$

Somit erhalten wir

$$v_0 \sin\vartheta = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0b} (1 + \cos\vartheta). \quad (7.43)$$

Mit $(1 + \cos\vartheta)/\sin\vartheta = \cot\vartheta/2$ erhalten wir schlussendlich für den Stossparameter b in Abhängigkeit des Streuwinkels ϑ den folgenden Ausdruck

$$b = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0^2} \cot\vartheta/2. \quad (7.44)$$

2. In der Realität ist es für einen Detektor nicht möglich die Anzahl einfallender α -Teilchen bei einem festen Winkel ϑ zu messen, sondern nur in einem Winkelintervall $[\vartheta, \vartheta + d\vartheta]$ (siehe Abb. 7.10). Die entsprechenden Stossparameter liegen im Intervall $[b, b + db]$. Aus (7.44) folgt folgender Zusammenhang

$$db = -\frac{1}{2} \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv_0^2} \frac{1}{\sin^2\vartheta/2} d\vartheta. \quad (7.45)$$

Wir sehen, dass mit wachsendem Stossparameter b der Streuwinkel ϑ kleiner wird. D.h. α -Teilchen mit einem Stossparameter b im Intervall $[b, b+db]$ werden in das Winkelintervall $[\vartheta - |d\vartheta|, \vartheta]$ gestreut. Dabei gilt

$$d\vartheta = -|d\vartheta|. \quad (7.46)$$

Da unser Problem rotationssymmetrisch ist, entspricht einem Streuwinkelintervall $[\vartheta - |d\vartheta|, \vartheta]$ ein ganzer Kreisring. Entsprechend stammen die

zugehörigen Stossparameter auch aus einem Kreisring der Radien $r_1 = b$ und $r_2 = b + db$, siehe Abb. 7.10. Diese Stossparameter stammen aus einer Fläche df , der sogenannten aktiven Fläche für dieses Streuwinkelintervall $[\vartheta - |d\vartheta|, \vartheta]$. Es gilt

$$df = 2\pi b db. \quad (7.47)$$

Bisher haben wir nur ein Streuatom der Folie betrachtet. Wir erweitern nun das Modell indem wir uns die gesamte Folie (Dicke D , Fläche A und Dichte n) anschauen. Für die aktive Fläche dF aller Atome gilt

$$dF = df n D A = 2\pi b db n D A. \quad (7.48)$$

Dabei haben wir angenommen, dass sich die aktiven Flächen der einzelnen Streuatome nicht überlappen. Diese Annahme ist bei dünnen Folien (bis 10000 Atomlagen) gerechtfertigt.

Die Wahrscheinlichkeit W , dass ein α -Teilchen die aktiven Flächen dF der Folienatome trifft, beträgt

$$W = \frac{\text{aktive Fläche}}{\text{Gesamtfläche}} = \frac{dF}{A} = 2\pi n D b db. \quad (7.49)$$

Mit anderen Worten: W ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein einfallendes α -Teilchen ins Winkelintervall $[\vartheta - |d\vartheta|, \vartheta]$ gestreut wird. Nun erweitern wir das Modell von einem auf N einfallende α -Teilchen. Dann ist die Anzahl α -Teilchen dN' , welche in das Winkelintervall $[\vartheta - |d\vartheta|, \vartheta]$ gestreut werden, gegeben durch

$$dN' = N W = N 2\pi n D b db. \quad (7.50)$$

Ein Detektor misst schlussendlich nicht die Anzahl einfallender α -Teilchen dN' auf einem ganzen Kreisring, sondern die Anzahl einfallender α -Teilchen dN innerhalb eines kleinen Segments. Wir betrachten das Ganze auf der Einheitskugel: Sei dS die Fläche des Kreisrings und $d\Omega$ die Fläche des Segments (auch Raumwinkel genannt), dann gilt

$$dN = dN' \frac{d\Omega}{dS}. \quad (7.51)$$

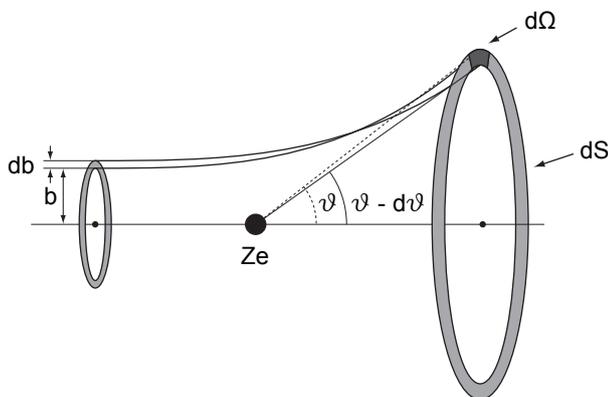


Abb. 7.10: Skizze der Rutherford-Streuung zur Herleitung der Rutherford'schen Streuformel.

Die Fläche dS des Kreisrings beträgt

$$dS = \int_0^{2\pi} \sin \vartheta |d\vartheta| d\varphi = 2\pi \sin \vartheta |d\vartheta| = 4\pi \sin \vartheta/2 \cos \vartheta/2 |d\vartheta|. \quad (7.52)$$

Einsetzen von (7.50) und (7.52) in (7.51) ergibt

$$dN = \frac{NnDbdbd\Omega}{2 \sin \vartheta/2 \cos \vartheta/2 |d\vartheta|}. \quad (7.53)$$

Mit (7.44), (7.45) und (7.46) erhalten wir für das Verhältnis dN/N , d.h. für die Anzahl in ein Raumwinkelelement $d\Omega$ um den Streuwinkel ϑ gestreuter α -Teilchen dN durch die Anzahl der einfallenden α -Teilchen N , das folgende Schlussresultat:

Rutherfordsche Streuformel

$$\frac{dN(\vartheta, d\Omega)}{N} = \frac{Z^2 e^4 D n d\Omega}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v_0^4 \sin^4 \vartheta/2}. \quad (7.54)$$

Bemerkungen zur Rutherfordschen Streuformel

- Der Grenzfall $\vartheta \rightarrow 0$ ist gleichbedeutend mit dem Grenzfall $b \rightarrow \infty$ und ist daher nicht sinnvoll. Der Stossparameter sollte den halben gegenseitigen Abstand der Streuatome nicht überschreiten. Für $\vartheta = \pi$, d.h. $b = 0$, erreicht dN/N ein Minimum.
- Die Rutherfordsche Streuformel stimmt für einen grossen Winkelbereich mit dem Experiment überein. Nur bei sehr grossen (kleinen) und sehr kleinen (grossen) Streuwinkeln ϑ (Stossparametern b) treten Abweichungen auf.
- Bei sehr grossen Stossparametern $b \geq 10^{-12}$ m sind Abschirmeffekte des Coulomb-Potentials des Atomkerns durch Atomelektronen für die Abweichungen zwischen Formel und Experiment verantwortlich.
- Für sehr kleine Stossparameter b beruhen die Abweichungen zwischen Formel und Experiment auf der Tatsache, dass die Modellannahme, dass nur die abstossende Coulomb-Kraft für die Ablenkung der α -Teilchen verantwortlich ist, nicht mehr gültig ist. Es kommen neu sogenannte anziehende Kernkräfte zum Tragen. Diese Abweichungen nennt man *anomale Rutherford-Streuung*.
- Aus diesen Resultaten ergeben sich Aussagen über den Kernradius R . Dieser ist definiert als der Abstand, bei dem die Wirkung der Coulomb-Kraft und der Kernkraft auf die α -Teilchen von der gleichen Grössenordnung sind. Man erhält aus solchen Messungen für den Kernradius R den folgenden Wert

$$R = (1.3 \pm 0.1) A^{1/3} \cdot 10^{-15} \text{ m}, \quad (7.55)$$

wobei A der Massenzahl entspricht.

- Aus diesen Beobachtungen ergab sich die Vorstellung eines Atomkerns, welcher von Elektronen umkreist wird und damit die Bestätigung des Rutherford'schen Atommodells (siehe Abschnitt 7.5.2).
- Die Resultate aus Streuexperimenten mit verschiedenen Folien können zur Bestimmung der Kernladungszahl Z benutzt werden.
- Streuprozesse nehmen in der Physik bis heute eine wichtige Rolle ein. Zum Beispiel erhielt Robert Hofstadter für Streuversuche von Elektronen an Atomkernen 1961 den Nobelpreis. Heute werden Streuversuche im grossen Stil am Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg oder von der Europäischen Organisation für Kernforschung (CERN) in Genf durchgeführt.

7.6 Zusammenfassung

- Als Atom (griechisch für unteilbar) wird der kleinste unveränderliche Bestandteil eines chemischen Elements bezeichnet.
- Die Atommasse wird in relativen Atommassen A_{rel} angegeben. Als Einheit dient die atomare Masseneinheit $1 \text{ u} = 1/12$ der Masse eines neutralen Kohlenstoffatoms. Der Zusammenhang zwischen der absoluten und relativen Atommasse ist gegeben durch $m = A_{\text{rel}}/N_{\text{A}}$, wobei N_{A} die Avogadro-Konstante bezeichnet.
- Die Grösse eines Atoms kann mittels Streuexperimenten, aus dem Kovolumen oder mittels Röntgen-Beugung bestimmt werden. Mit Abbildungstechniken wie dem Elektronenmikroskop oder Rastertunnelmikroskop können Atome sogar sichtbar gemacht werden.
- Im Periodensystem der Elemente sind Atome nach ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften angeordnet. Die Atome werden mit einem Symbol abgekürzt und nach steigender Kernladungszahl Z (auch Ordnungszahl genannt) aufgeführt. Sie ist oberhalb jedes Atomsymbols aufgeführt und entspricht der Anzahl Protonen (Elektronen). Die Massenzahl A ist unterhalb jedes Atomsymbols aufgeführt. Sie ist die der relativen Atommasse A_{rel} nächstgelegene ganze Zahl und entspricht der Summe der Anzahl Protonen Z und Anzahl Neutronen N .
- Die Massenspektroskopie dient zur Trennung von Atomsorten, welche unterschiedliche Ladungs-Massenverhältnisse q/m aufweisen. Sie stand am Ursprung der Entdeckung der Isotopie (zwei Atome mit gleicher Kernladungszahl Z aber unterschiedlicher Massenzahl A heissen Isotope). Das Grundprinzip dieser Methode besteht darin, dass ein Strahl geladener Teilchen mit unterschiedlichen Ladungs-Massenverhältnissen q/m ein elektrisches und magnetisches Feld passiert und dadurch räumlich getrennt wird.

Neben der Analyse und Trennung von Isotopen dient die Massenspektroskopie zur Analyse und Identifizierung von Stoffen in der Chemie und der Restgas-Analyse in Vakuumsystemen in der Physik, Chemie und Technik.

- Ein erster Schritt in Richtung dem Atommodell, das wir heute kennen, lieferten Erkenntnisse aus Streuexperimenten mit Elektronen an Materie (Atomen). Die Resultate zeigten, dass nur ein kleiner Bruchteil eines Atoms für (schnelle) Elektronen undurchlässig ist und motivierten den Physiker Lenard zur Aussage, dass das Innere eines Atoms so leer wie das Weltall sei.
- Rutherford präzierte diese Vorstellung aufgrund seiner Resultate aus Streuexperimenten mit α -Teilchen an Goldfolien und formulierte 1911 das nach ihm benannte Rutherfordsche Atommodell:
 - Ein Atom besitzt einen Kern mit Radius $R \sim 10^{-14}$ m, welcher beinahe die gesamte Masse des Atoms enthält. Die Streuung von α -Teilchen erfolgt fast ausschliesslich an diesen Kernen.
 - Der Atomkern enthält die gesamte positive Ladung Ze . Dabei bezeichnet Z die Kernladungszahl.
 - Der Atomkern ist aus Neutralitätsgründen von negativ geladenen Elektronen umgeben.
 - Die Wechselwirkung zwischen α -Teilchen und Atomkern ist rein elektrostatisch und durch die Coulomb-Wechselwirkung bestimmt.

Kapitel 8

Atomare Spektren - Bohrsches Atommodell

In Kapitel 7 haben wir bereits die Struktur des Atoms kennengelernt. Ein Atom besteht im Wesentlichen aus einem positiv geladenen Atomkern und den Atomkern umkreisenden Elektronen. In diesem Kapitel knüpfen wir nun daran an. Wir werden uns mit den Spektren der von Atomen ausgesandten elektromagnetischen Strahlung auseinandersetzen. Die beobachteten diskreten Linienspektren deuten darauf hin, dass Elektronen in einem Atom mit bestimmten diskreten Energiewerten an den Atomkern gebunden sind. Dieses Phänomen konnte nicht mit den Mitteln der klassischen Physik erklärt werden. Erst die Einführung der Quantenmechanik erlaubte es ein tieferes Verständnis der elektronischen Eigenschaften von Atomen zu gewinnen.

Als einfaches aber instruktives Beispiel zur Anwendung der Wellenmechanik von Teilchen und einer ersten Nutzung der Quantenmechanik werden wir das Bohrsche Atommodell zur Berechnung der grundlegenden Eigenschaften des Spektrums des Wasserstoffatoms kennenlernen. Trotz seiner Einfachheit erlaubt dieses Modell nicht nur die grundlegenden Eigenschaften von Wasserstoffatomen zu beschreiben, sondern auch die von anderen Systemen, in denen eine positive Ladung von einer negativen umkreist wird. Beispiele sind Rydberg-Atome oder Exzitonen in Halbleitern. Des Weiteren diskutieren wir das Franck-Hertz-Experiment, in welchem die diskrete Struktur der Bindungen von Elektronen im Atom in Stossexperimenten, im Einklang mit dem Bohrschen Atommodell, beobachtbar ist. Wir betrachten ebenfalls eine Erweiterung des Bohrschen Modells nach Arnold Sommerfeld und zeigen gleichzeitig die Grenzen des Bohr-Sommerfeld-Modells auf. Anschliessend setzen wir uns mit Rydberg-Atomen auseinander, die durch das Bohrsche Atommodell gut beschrieben werden und auch ein Thema in der aktuellen Forschung sind. Zum Abschluss des Kapitels folgt ein Exkurs zu den Einstein-Koeffizienten, die es erlauben die Absorption und Emission von elektromagnetischer Strahlung in Atomen zu beschreiben.

8.1 Atomare Spektren - Diskrete Energiewerte

Im Allgemeinen beschreiben die in Messungen aufgenommenen Spektren von atomaren oder molekularen Gasen die Frequenzabhängigkeit der Emission oder Absorption von elektromagnetischer Strahlung in Atomen oder Molekülen. Diese Spektren sind charakteristisch für die innere Struktur der Atome oder Moleküle. Spektren können auch zur Untersuchung der Eigenschaften von Festkörpern und Sternen aufgenommen werden. Optische Spektren sind eine wichtige Quelle für Informationen über die elektronische Struktur und den Aufbau von Atomen und daher ein wichtiges Hilfsmittel in der Atomphysik.

Zur Beobachtung von Emissionsspektren muss das zu untersuchende Objekt, bzw. die zu untersuchende Substanz, zuvor angeregt worden sein. Dann kann die Frequenzabhängigkeit der emittierten Strahlung untersucht werden. Absorptionsspektren können aufgenommen werden, indem ein Objekt mit einem kontinuierlichen Spektrum (z.B. dem eines schwarzen Strahlers) bestrahlt wird und seine Absorption bei charakteristischen Frequenzen beobachtet wird.

Häufig unterscheidet man drei verschiedene Typen von Spektren:

a) Kontinuierliche Spektren

Heisse und dichte Objekte, z.B. leuchtende Festkörper oder Gase mit hoher Dichte, zeigen ein kontinuierliches Spektrum. Solche Spektren, wie z.B. das Spektrum der Sonne, lassen sich oft durch die Schwarzkörperstrahlung annähern (siehe Kapitel 5).

b) Linienspektren

Linienspektren sind typisch für Objekte bei niedrigen Temperaturen und geringer Dichte, wie z.B. bei atomaren oder molekularen Gasen. Ein solches Spektrum besteht aus einzelnen gut experimentell auflösbaren diskreten Linien.

c) Bandspektren

Bandenspektren können als eine teilweise kontinuierliche Überlagerung von einer grossen Zahl von Linienspektren aufgefasst werden. Sie werden vorwiegend in molekularen Gasen beobachtet.

In experimentell aufgenommenen Spektren wird die von einer Substanz emittierte oder absorbierte Strahlungsleistung oder Intensität häufig gegen verschiedene für die Frequenz der Strahlung charakteristische Messgrössen aufgetragen. Welche dieser Grössen verwendet wird, hängt von den Gepflogenheiten der spezifischen Fachrichtung ab.

a) Wellenlänge λ

Die Wellenlänge wird in der Einheit m gemessen. Wellenlängenangaben beziehen sich im allgemeinen auf das Vakuum

$$\lambda_{\text{vac}} = \lambda_{\text{med}} \cdot n, \quad (8.1)$$

wobei der Brechungsindex n ebenfalls eine Funktion der Wellenlänge ist (Dispersion). Gemessen werden solche Spektren mit Hilfe von Beugungsgittern.

b) Frequenz ν

Die Frequenz, welche im Gegensatz zur Wellenlänge nicht vom betrachteten Medium abhängt, wird in der Einheit Hz gemessen. Der Zusammenhang zur Wellenlänge ist gegeben durch

$$\nu = \frac{c}{\lambda_{\text{vac}}} = \frac{c}{\lambda_{\text{med}} \cdot n}. \quad (8.2)$$

c) Wellenzahl $\bar{\nu}$

Die Wellenzahl wird in der Einheit 1/m gemessen und es gilt

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda_{\text{vac}}} = \frac{1}{n \cdot \lambda_{\text{med}}}. \quad (8.3)$$

d) Energie E

Die Energie $E = h\nu/c$ wird in der Einheit eV (Elektronenvolt) angegeben.

Spektren geben im gesamten Frequenzbereich elektromagnetischer Strahlung (siehe Abb. 8.1), von Radiowellen bis Gammastrahlung, Auskunft über die Eigenschaften von Substanzen.

8.1.1 Typische Spektren

Nach den allgemeinen Bemerkungen zu den Spektren schauen wir uns als nächstes ein paar Beispiele von Spektren an (siehe Abb. 8.2). Die Sonne als beinahe schwarzer Strahler (siehe Abschnitt 5.4.7) zeigt ein kontinuierliches Spektrum. Atome, wie z.B. Wasserstoff, Helium, Quecksilber oder Uran, zeigen wie für Atome typisch Linienspektren, die sowohl in Absorption oder in Emission beobachtet werden können.

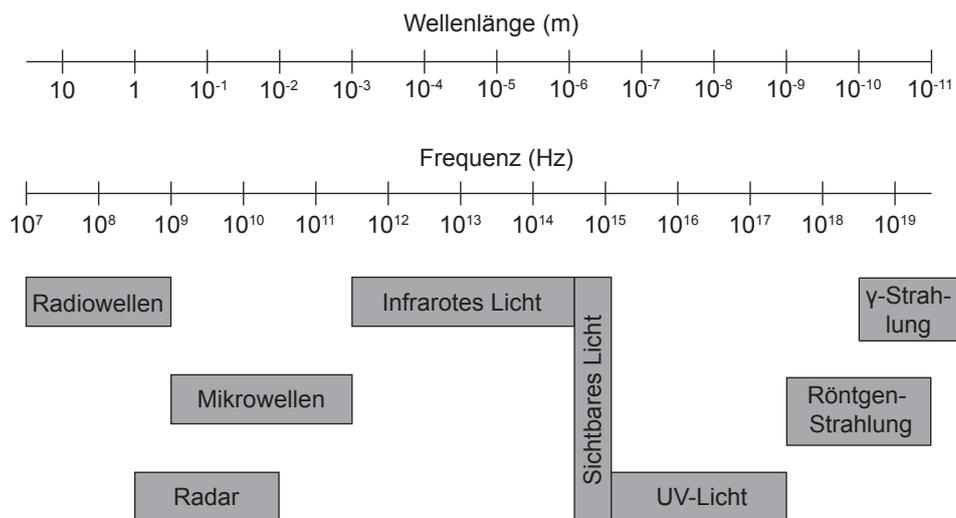


Abb. 8.1: Die Unterteilung des Spektrums in verschiedene Spektralbereiche beginnend mit Radiowellen bis zu Gammastrahlung.

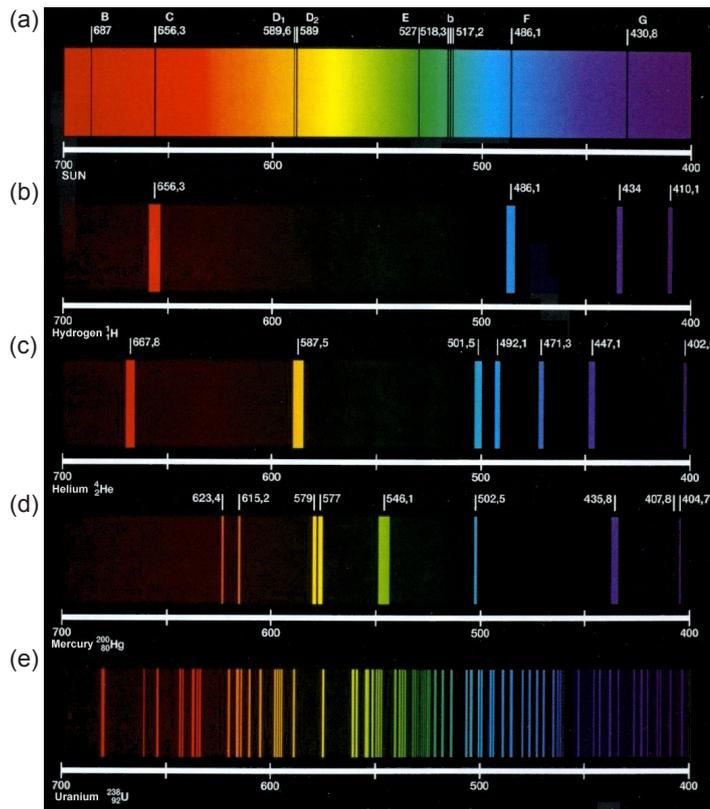


Abb. 8.2: Beispiele von atomaren Spektren: (a) Sonne, (b) Wasserstoff, (c) Helium, (d) Quecksilber und (e) Uran. Auf den Achsen ist die Wellenlänge in nm aufgetragen. [10]

8.1.2 Klassische Betrachtungen und die Stabilität von Atomen

Diskrete Emissions- und Absorptionsspektren von Atomen können nicht mit Methoden der klassischen Physik erklärt werden. Klassische Theorien würden beliebige Elektronenenergien und somit kontinuierliche Spektren vorhersagen.

Man könnte aus der Tatsache, dass ein Atom bestimmte Frequenzen (Spektrallinien) aussendet, schliessen, dass ein Atom als klassisches lineares Schwingensystem mit vielen Freiheitsgraden aufgefasst werden kann. Doch selbst einfache Atome mit wenigen Freiheitsgraden, wie z.B. das Wasserstoffatom, hat sehr viele Spektrallinien, die im Oszillatormodell schwer zu verstehen wären. Selbst die Annahme, dass das Atom durch ein anharmonisches Schwingensystem beschrieben sei, löst dieses Problem nicht. Denn bei solchen Systemen hängen die Schwingungsperioden von den Amplituden ab, so dass man keine scharfen Spektrallinien, sondern eher kontinuierliche Spektren erwarten würde.

Nicht einmal die Stabilität des Elektrons auf seiner Bahn um den Atomkern, und somit die Stabilität des Atoms selber, kann mit klassischen Methoden erklärt werden.

Wir betrachten hier als Beispiel das einfachste Atom, das Wasserstoffatom. Es besteht aus einem Proton, das von einem einzigen Elektron umkreist wird. Wir nehmen an, dass sich das Elektron auf einer Kreisbahn mit zunächst konstanter Winkelgeschwindigkeit bewegt. Für die zum Kern (Proton) gerichtete Zentralbeschleunigung ist die Coulomb-Kraft verantwortlich. Der Kern ist einige tausend Mal schwerer als das Elektron und kann daher als raumfest be-

trachtet werden. Dieses System aus Proton und Elektron lässt sich somit als ein rotierender elektrischer Dipol beschreiben. Die Kreisbewegung kann als Superposition einer harmonischen Schwingung längs der x-Achse mit einer harmonischen Schwingung längs der y-Achse aufgefasst werden (siehe Abb. 8.3). Ein oszillierender Dipol strahlt elektromagnetische Wellen ab. Demzufolge verliert das Elektron auf seiner Bahn und somit das Atom dauernd an Energie. Mit anderen Worten das Elektron verliert auf seiner Bahn kinetische Energie und würde somit auf einer Spiralbahn mit zunehmender Umlauffrequenz unaufhaltsam in den Kern stürzen. Wenn wir von einem Bahnradius ausgehen, der etwa einem Atomradius entspricht, d.h. 1 \AA , dann wäre die Lebensdauer des Atoms von der Grössenordnung von 10^{-8} s . Dies steht jedoch klar im Widerspruch mit der Tatsache, dass Atome (in ihrem Grundzustand) stabil sind und dass Atome Licht bei diskreten Frequenzen abstrahlen und kein kontinuierliches Spektrum haben (siehe Abschnitt 8.1.1).

Hier bemerken wir, dass das von einem heissen Körper emittierte kontinuierliche Spektrum auch von Atomen herrührt, die jedoch sehr stark miteinander gekoppelt sind. Einzelne Atome haben jedoch diskrete Spektren.

8.1.3 Spektrallinien und das Ritzsche Kombinationsprinzip

Im Jahre 1908 fand Walter Ritz (Schweizer Mathematiker und Physiker) bei der Betrachtung von Atomspektren eine Gesetzmässigkeit, die einen ersten Ansatzpunkt zur Erklärung der Spektren von Atomen liefert. Diese wird auch als *Ritzsches Kombinationsprinzip* bezeichnet:

Die Frequenz ν jeder Spektrallinie eines Atoms lässt sich darstellen als die Differenz zwischen zwei sogenannten *Spektraltermen* T_i und T_f

$$\nu_{if} = T_i - T_f. \quad (8.4)$$

Jede Atomsorte hat einen für sie charakteristischen Satz von Spektraltermen T_j .

Als formales Beispiel betrachten wir ein System mit drei Spektraltermen T_1 ,

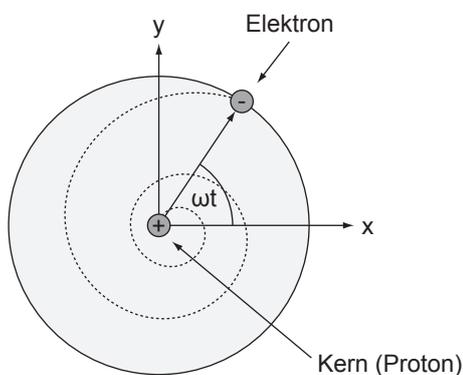


Abb. 8.3: Beim Wasserstoffatom umkreist ein Elektron den Kern (Proton) auf einer Kreisbahn mit Winkelgeschwindigkeit ω . Nach der klassischen Vorstellung würde das Elektron auf seiner Bahn kinetische Energie verlieren und auf einer Spiralbahn in den Kern stürzen.

T_2 und T_3 . Demzufolge lässt es folgende drei Frequenzen zu

$$\nu_{21} = T_2 - T_1, \quad (8.5)$$

$$\nu_{31} = T_3 - T_1, \quad (8.6)$$

$$\nu_{32} = T_3 - T_2. \quad (8.7)$$

Aus $T_2 - T_1 = (T_3 - T_1) - (T_3 - T_2)$ folgt, dass zwischen den drei Frequenzen die folgende Beziehung gelten muss

$$\nu_{21} = \nu_{31} - \nu_{32}. \quad (8.8)$$

Aus diesen Betrachtungen ergibt sich folgende Interpretation für das Kombinationsprinzip: Das System in unserem Beispiel hat drei diskrete Energieniveaus $E_1 = hT_1$, $E_2 = hT_2$ und $E_3 = hT_3$ und kann unter Emission eines Photons von einem Niveau in ein anderes übergehen, wobei die Energie $h\nu$ des Photons der Differenz zwischen den beiden Energieniveaus entspricht (siehe Abb. 8.4).

8.2 Das Wasserstoffatom

Bevor wir uns dem Bohrschen Atommodell zuwenden, welches die ersten Erklärungsansätze zum Verständnis des Spektrums des Wasserstoffatoms lieferte, setzen wir uns noch etwas genauer mit dem Wasserstoffatom auseinander. Das Wasserstoffatom bestehend aus einem Proton und einem Elektron ist das einfachste Atom. Es nahm daher während dem letzten Jahrhundert immer wieder eine zentrale Rolle bei der Entwicklung von Atommodellen ein.

Betrachten wir das Energieschema des Wasserstoffatoms (siehe Abb. 8.5) so entspricht jedem Übergang zwischen einem Paar von Energieniveaus einer Spektrallinie im Spektrum des Wasserstoffatoms. Im sichtbaren Wellenlängenbereich gibt es drei charakteristische Linien (Wellenlängen: 656.3 nm, 486.1 nm und 434.0 nm), welche zusammen mit einer ganzen Schar von Linien im nahen UV-Bereich eine sogenannte Serie von Spektrallinien bilden. Der Abstand der Linien dieser Serie nimmt zu kleineren Wellenlängen ab, bis die Linien schlussendlich gegen einen Grenzwert konvergieren. Diese Serie von Spektrallinien im Wasserstoffatom wird *Balmer-Serie* genannt und wurde historisch, da sie im sichtbaren Frequenzbereich liegt, als erste entdeckt. Der Namensgeber Johann Jakob Balmer (Schweizer Mathematiker und Physiker) fand 1885 eine Formel

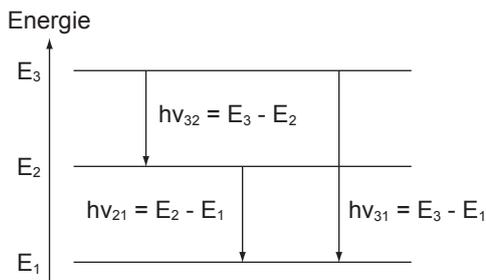


Abb. 8.4: Ritzsches Kombinationsprinzip: Energieschema eines Systems mit drei Spektraltermen.

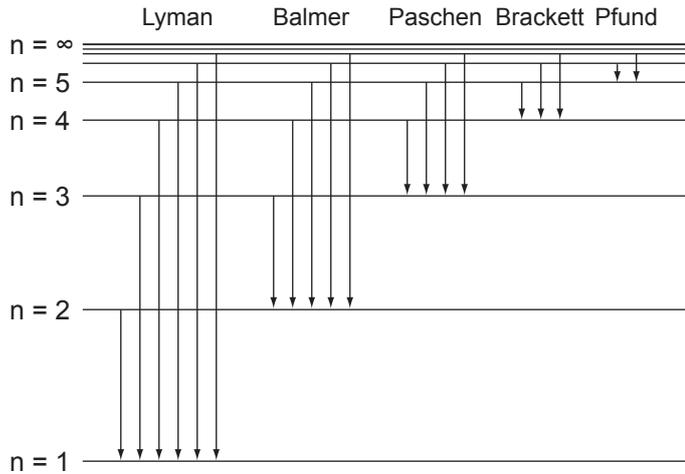


Abb. 8.5: Das Energieschema des Wasserstoffatoms: Die Übergänge zwischen den einzelnen Energieniveaus lassen sich in verschiedene Serie von Spektrallinien unterteilen.

für die Wellenlängen der Serie

$$\lambda = \frac{n_1^2}{n_1^2 - 4} G \quad \text{mit } n_1 = 3, 4, \dots, \quad (8.9)$$

wobei G ein empirisch gefundener Zahlenwert ist.

Weitere Untersuchungen zeigten, dass das Wasserstoffatom aus sehr vielen solchen Serien besteht. Dabei spielte vor allem die Beobachtung von Licht, das von astrophysikalischen Quellen ausgesandt wird, eine entscheidende Rolle, da es zum Zeitpunkt dieser Untersuchungen schwierig war, auf der Erde reinen Wasserstoff zu isolieren und experimentell zu untersuchen. Die Gesamtheit der beobachteten Serien wird durch die sogenannte *Rydberg-Formel*, welche aus rein empirischen Untersuchungen von Johannes Rydberg gefunden wurde, beschrieben

$$\nu_{if} = R_{\text{H}} c \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (8.10)$$

wobei die ganzen Zahlen n_i und n_f , die sogenannten *Hauptquantenzahlen*, den Anfangszustand bzw. den Endzustand bezeichnen und $R_{\text{H}} = 1.09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ die *Rydberg-Konstante* ist. Den Wert der Rydberg-Konstanten ermittelte Rydberg aus experimentellen Daten des Wasserstoffspektrums. Die Rydberg-Konstante wird auch häufig äquivalent in Einheiten von Energie, Wellenlänge oder Frequenz angegeben.

Die Balmer-Formel (8.9) ist ein Spezialfall der Rydberg-Formel (8.10) für $n_f = 2$. Die wichtigsten Serien beim Wasserstoffatom sind neben der Balmer-Serie die Lyman-, Paschen-, Brackett und Pfund-Serie (siehe Tab. 8.1).

Der Vergleich der Rydberg-Formel (8.10) mit dem Ritzschen Kombinationsprinzip aus Abschnitt 8.1.3 zeigt, dass der Ausdruck $R_{\text{H}} c / n_j^2$ gerade den Spektraltermen T_j entspricht. Die Terme hT_j können somit als mögliche Energieniveaus des Elektrons im Atom interpretiert werden für die das Bohrsche Atommodell eine erste Erklärung lieferte.

n_f	Name der Serie	Formel	Bereich im Spektrum
1	Lymann-Serie	$\nu_{if} = R_H c \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	UV
2	Balmer-Serie	$\nu_{if} = R_H c \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	sichtbar
3	Paschen-Serie	$\nu_{if} = R_H c \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	infrarot
4	Brackett-Serie	$\nu_{if} = R_H c \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	infrarot
5	Pfund-Serie	$\nu_{if} = R_H c \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$	infrarot

Tab. 8.1: Die Serien von Spektrallinien im Wasserstoffatom.

8.3 Bohrsches Atommodell des Wasserstoffatoms

Das Bohrsche Atommodell war das erste einfache Modell zur Erklärung des Spektrums des Wasserstoffatoms. Es wurde vom dänischen Physiker Niels Bohr um 1913 entwickelt. Einerseits ging er vom (klassischen) Rutherford'schen Atommodell (siehe Abschnitt 7.5.2) aus, indem er annahm, dass sich im Wasserstoffatom das negativ geladene Elektron auf einer Kreisbahn um den positiv geladenen Kern bewegt. Andererseits formulierte er ausgehend von den experimentellen Erkenntnissen über atomare Spektren drei Postulate. Das Modell wird daher auch oft als semiklassisches Atommodell bezeichnet.

Wir beginnen mit dem klassischen Modell für die Bahnbewegung des Elektrons im Wasserstoffatom. Das Elektron bewegt sich auf einer Kreisbahn um das Proton (siehe Abb. 8.3). Diese Kreisbahn ergibt sich aus dem Gleichgewicht zwischen der anziehenden Coulomb-Kraft F_C zwischen Elektron und Kern, und der Zentripetalkraft F_Z , die das Elektrons mit Masse m und Geschwindigkeit v auf seiner Bahn mit Radius r wahrnimmt

$$F_C = F_Z \Rightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r}. \quad (8.11)$$

Daraus ergibt sich die folgende Bedingung für die Geschwindigkeit v des Elektrons, um bei einem gegebenem Bahnradius r zu einer stabilen Kreisbahn zu führen

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}}. \quad (8.12)$$

Die Gesamtenergie des Elektrons auf einer solchen Bahn setzt sich aus kinetischer und potentieller Energie zusammen. Für die kinetische Energie erhalten wir mit (8.12)

$$E_{\text{kin}} = \frac{m}{2} v^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (8.13)$$

Die potentielle Energie E_{pot} entspricht der Arbeit, die man gewinnt, wenn man das Elektron aus dem Unendlichen unter Einwirkung der Coulomb-Kraft F_C zum Abstand r vom Kern bringt

$$E_{\text{pot}} = \int_{\infty}^r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r'^2} dr' = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (8.14)$$

Dies entspricht der Bindungsenergie¹ und nimmt dementsprechend einen negativen Wert an. Damit erhalten wir für die Gesamtenergie in diesem klassischen Modell

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (8.15)$$

Wie wir in Abschnitt 8.1.2 gesehen haben, ist es mit einem solchen Modell zusammen mit den Gesetzen aus der klassischen Elektrodynamik nicht möglich die Stabilität von Atomen und insbesondere die Charakteristiken von atomaren Spektren zu erklären. Um diese Lücke zwischen der klassischen Physik und den experimentellen Beobachtungen zu schliessen, formulierte Bohr drei Postulate:

1. Elektronen in Atomen erfüllen zwar die klassischen Bewegungsgleichungen, es sind aber nur ganz bestimmte diskrete Bahnen mit den Energien E_n , die Energieterme des Atoms, erlaubt. Wie bei Rydberg wird n Hauptquantenzahl genannt.
2. Die Bewegung der Elektronen auf diesen Bahnen erfolgt strahlungslos. Es ist jedoch für das Elektron möglich unter Emission von Strahlung (d.h. unter Aussendung von Photonen) von einer Bahn mit geringerer Bindungsenergie E_n (also grösserem r) auf eine Bahn mit grösserer Bindungsenergie $E_{n'}$ (kleinerem r) zu gelangen. Für das bei diesem Übergang emittierte Photon gilt der folgende Zusammenhang

$$E_n - E_{n'} = h\nu. \quad (8.16)$$

Bei der Absorption von Photonen erfolgt der umgekehrte Prozess. Aus dem Vergleich mit der Rydberg-Formel (8.10) schrieb Bohr für die Energieterme

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}, \quad (8.17)$$

$$E_{n'} = -\frac{Rhc}{n'^2}, \quad (8.18)$$

wobei R die Rydberg-Konstante bezeichnet. Das Minuszeichen zeigt an, dass es sich dabei um Bindungsenergien handelt.

3. Aus klassischer Sicht müsste die Umlauffrequenz der Elektronen auf den klassischen Kreisbahnen gleich der Frequenz der emittierten oder absorbierten Strahlung sein, was beim Wasserstoffatom insbesondere bei kleinen Bahnradien nicht zutrifft. Nach Bohr gilt aber: Mit wachsendem Bahnradius (d.h. mit wachsender Hauptquantenzahl n) stimmen diese beiden

¹Bindungsenergie wird freigesetzt, wenn zwei oder mehr Bestandteile durch Anziehungskräfte zusammengebracht werden und miteinander ein gebundenes System bilden.

Frequenzen überein oder allgemein ausgedrückt mit wachsendem Bahnradius (d.h. mit wachsender Hauptquantenzahl n) gehen die Gesetze der Quantenmechanik in diejenige der klassischen Mechanik über. Dieses Prinzip wird *Korrespondenzprinzip* genannt. Insbesondere lässt sich durch das Korrespondenzprinzip mit Hilfe der ersten beiden Postulate die Rydberg-Konstante R in (8.17) und (8.18) und damit auch die Energieniveaus E_n des Wasserstoffatoms durch atomare Grössen ausdrücken.

Ausgehend von diesen Postulaten berechnen wir nun die Rydberg-Konstante und drücken sie durch atomare Grössen aus. Wir betrachten den Übergang eines Elektrons zwischen benachbarten Bahnen, d.h. $n - n' = 1$, bei grossem n . Aus (8.16), (8.17) und (8.18) erhalten wir für die Frequenz der dabei emittierten Strahlung

$$\begin{aligned}\nu &= Rc \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &= Rc \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &= \frac{Rc}{n^2} \left(\frac{1}{(1-1/n)^2} - 1 \right) \sim \frac{2Rc}{n^3}.\end{aligned}\quad (8.19)$$

Als nächstes drücken wir den (klassischen) Ausdruck für die Energie E in (8.15) in Abhängigkeit der (klassischen) Frequenz ν_{kl} aus. Mit $r = v/2\pi\nu_{\text{kl}}$ und (8.12) erhalten wir

$$r = \frac{v}{2\pi\nu_{\text{kl}}} = \frac{e}{2\pi\nu_{\text{kl}}\sqrt{4\pi\epsilon_0mr}}\quad (8.20)$$

Auflösen nach dem Bahnradius r ergibt

$$r = \left(\frac{e^2}{16\pi^3\nu_{\text{kl}}^2\epsilon_0m} \right)^{1/3}.\quad (8.21)$$

Einsetzen in (8.15) liefert schliesslich für die Energie E den Ausdruck

$$\begin{aligned}E &= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0r} \\ &= -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left(\frac{16\pi^3\nu_{\text{kl}}^2\epsilon_0m}{e^2} \right)^{1/3} \\ &= -\frac{1}{2(2\epsilon_0)^{2/3}} (e^4m\nu_{\text{kl}}^2)^{1/3}.\end{aligned}\quad (8.22)$$

Nach Postulat 3 nehmen wir nun an, dass mit wachsender Hauptquantenzahl n die Gesetze der Quantenmechanik in diejenige der klassischen Mechanik übergehen und können deshalb ν_{kl} in (8.22) durch den Ausdruck in (8.19) ersetzen

$$E = -\frac{1}{2(2\epsilon_0)^{2/3}} \left(e^4m \left(\frac{2Rc}{n^3} \right)^2 \right)^{1/3}.\quad (8.23)$$

Gleichsetzen mit (8.17) ergibt

$$-\frac{Rhc}{n^2} = -\frac{1}{2(2\epsilon_0)^{2/3}} \left(e^4 m \left(\frac{2Rc}{n^3} \right)^2 \right)^{1/3}. \quad (8.24)$$

Daraus erhalten wir für die Rydberg-Konstante R den folgenden Ausdruck

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1.09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}. \quad (8.25)$$

Dieser Ausdruck ist in guter Übereinstimmung mit dem empirisch gemessenen Wert aus Abschnitt 8.2.

Ebenfalls erhalten wir einen Ausdruck für den n -ten Bahnradius r_n des Elektrons im Wasserstoffatom. Gleichsetzen von (8.15) und (8.17) ergibt

$$-\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Rhc}{n^2}. \quad (8.26)$$

Einsetzen von (8.25) liefert für den n -ten Bahnradius r_n

$$r_n = \frac{e^2 n^2}{8\pi\epsilon_0 Rhc} = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \cdot n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}, \quad (8.27)$$

wobei der kleinste Bahnradius $r_1 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ *Bohrscher Radius* genannt wird und üblicherweise mit a_0 bezeichnet wird.

Weiter ergibt sich mit (8.12) und (8.27) für den Betrag des Bahndrehimpulses \vec{L} des Elektrons

$$\begin{aligned} |\vec{L}| &= |\vec{r} \times \vec{p}| \\ &= r_n m v_n \\ &= r_n m \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r_n}} \\ &= \frac{me}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m}} \sqrt{r_n} \\ &= \frac{me}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m}} \sqrt{\frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m e^2}} \\ &= \frac{hn}{2\pi}. \end{aligned} \quad (8.28)$$

Mit $\hbar = h/(2\pi)$ ergibt sich

$$|\vec{L}| = n \cdot \hbar \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (8.29)$$

D.h. der Bahndrehimpuls ist ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar .

8.3.1 Alternative Formulierung des Bohrschen Atommodells

Als nächstes schauen wir uns zur besseren Veranschaulichung noch eine zweite gleichwertige Formulierung des Bohrschen Atommodells an. Wir betrachten die Bahnbewegung des Elektrons wiederum klassisch. Die Coulomb-Kraft ist verantwortlich für eine Kreisbewegung und die Bahngeschwindigkeit ist gegeben durch (8.12)

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m r}}. \quad (8.30)$$

Ebenfalls ist die Gesamtenergie des Elektrons gegeben durch (8.15)

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (8.31)$$

Als nächstes kommen wir zu den 3 Postulaten von Bohr. An den ersten beiden Postulaten wird im Wesentlichen festgehalten: Für das Elektron im Wasserstoffatom sind nur ganz bestimmte diskrete Bahnen mit den Energie E_n erlaubt, die Bewegung auf diesen Bahnen erfolgt strahlungslos, jedoch kann Strahlung beim Übergang eines Elektrons von einer Bahn auf eine andere emittiert oder absorbiert werden, für diesen Übergang gilt $E_n - E_{n'} = h\nu$ und die Energieniveaus sind nach Rydberg gegeben durch $E_n = -Rhc/n^2$.

In der vorherigen Betrachtung resultierten nun die charakteristischen Grössen für die Elektronenbahnen (Rydberg-Konstante (Energie), Radius, Bahndrehimpuls) aus der Annahme, dass mit wachsendem Bahnradius (wachsender Hauptquantenzahl n) die Gesetze der Quantenmechanik in diejenige der klassischen Mechanik übergehen und der daraus resultierenden Grenzbetrachtung: Gleichsetzen der Umlauffrequenz auf den klassischen Kreisbahnen mit der (quantenmechanischen) Frequenz der emittierten oder absorbierten Strahlung für hohe n .

Anstelle dieser Grenzbetrachtung tritt zur Bestimmung der Elektronenbahnen nun folgende gleichwertige Betrachtung: Wir betrachten die de Broglie-Wellenlänge λ des Elektrons auf seiner klassischen Bahn um den Atomkern

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (8.32)$$

Mit (8.30) erhalten wir

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m} \frac{\sqrt{4\pi\epsilon_0 r m}}{e}. \quad (8.33)$$

Für das Elektron im Wasserstoffatom sind nun nur die Bahnradien r_n erlaubt für die die Materiewelle des Elektrons mit sich selbst konstruktiv interferiert, d.h. die Länge der Umlaufbahn $2\pi r_n$ muss einem ganzzahligen Vielfachen der de Broglie-Wellenlänge λ des Elektrons entsprechen. Oder in anderen Worten ausgedrückt: Die Materiewelle muss nach einer Umdrehung wieder auf sich selber treffen. Demzufolge lautet die Gleichung zur Bestimmung der Bahnradien r_n (Interferenzbedingung)

$$n\lambda = 2\pi r_n. \quad (8.34)$$

Wenn die Länge der Umlaufbahn kein ganzzahliges Vielfaches der de Broglie-Wellenlänge ist, tritt destruktive Interferenz auf und die Bahn existiert nicht. Aus (8.34) erhalten wir mit (8.33) in Übereinstimmung mit (8.27) für den n -ten Bahnradius r_n des Elektrons

$$r_n = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2} \cdot n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (8.35)$$

Der Bahnradius r_n ist also quadratisch in der Hauptquantenzahl n des Elektrons im Wasserstoffatom.

Analog zu (8.28) und (8.29) ergibt sich auch die Quantisierung des Betrags des Bahndrehimpulses \vec{L} zu: $|\vec{L}| = n \cdot \hbar$.

Für die Gesamtenergie E_n des Elektrons im Wasserstoffatom ergibt sich mit (8.35) aus (8.31)

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m e^4}{8\hbar^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}. \quad (8.36)$$

Gleichsetzen mit der Rydberg-Formulierung (8.17) ergibt in Übereinstimmung mit (8.25) für die Rydberg-Konstante

$$R = \frac{m e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^3 c}. \quad (8.37)$$

Dabei ist zu beachten, dass die Energie des Elektrons E_n umgekehrt proportional ist zum Quadrat der Hauptquantenzahl n . Dieses Verhalten ist charakteristisch für die $1/r$ -Abhängigkeit des Coulomb-Potentials.

8.3.2 Bemerkungen zum Bohrschen Atommodell

- Strahlung wird von einem Atom emittiert oder absorbiert, wenn Elektronen ihre Bahn bzw. ihr Energieniveau wechseln.
- Bei Absorptionsübergängen gibt ein Photon seine Energie $h\nu$ an ein Elektron weiter, welches dadurch von einem tiefer liegenden Energieniveau in ein höher liegendes Energieniveau wechselt.
- Bei Emissionsübergängen fällt ein Elektron von einem höher liegenden Energieniveau unter Abgabe eines Photons der Energie $h\nu$ in ein tiefer liegendes Energieniveau. Das Elektron muss zuvor durch Energiezufuhr auf dieses höhere Energieniveau gebracht worden sein.
- Die eingezeichneten Elektronenübergänge im Energieschema des Wasserstoffatoms in Abb. 8.5 sind demzufolge ausschliesslich Emissionsübergänge.
- Bei Raumtemperatur (300 K) ist nur der Grundzustand des Wasserstoffatoms ($n = 1$) besetzt. Deshalb kann man bei normalen Temperaturen nur die Lyman-Serie in Absorption beobachten. Bei höheren Temperaturen, wie sie z.B. in der Atmosphäre von Sternen vorkommen, ist auch der erste angeregte Zustand des Wasserstoffs ($n = 2$) besetzt und weitere Spektrallinien können beobachtet werden.

8.4 Verallgemeinerung des Bohrschen Atommodells

8.4.1 Das Bohrsche Atommodell für Ionen

Wie bereits erwähnt lässt sich das Bohrsche Atommodell auch zur Erklärung der Spektren anderer wasserstoffähnlicher Systeme verwenden. Ein Beispiel sind Ionen mit einem einzigen verbleibenden Elektron, das sich mit einer Geschwindigkeit v_n auf einer Kreisbahn mit Radius r_n um einen positiv geladenen Kern mit Kernladungszahl Z bewegt (z.B. He^+ oder Li^{++} (siehe Abb. 8.6)). Aus dem Kräftegleichgewicht ergibt sich unter Beachtung der Kernladung Z

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{mv_n^2}{r_n} \quad (8.38)$$

für die Bahngeschwindigkeit v_n einer stabilen Bahn des Elektrons

$$v_n = \sqrt{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m r_n}}. \quad (8.39)$$

Die analoge Rechnung wie in Abschnitt 8.3 führt zu folgendem Ausdruck für die Bahnradien r_n des Elektrons

$$r_n = \frac{n^2 \epsilon_0 h^2}{Z \pi m e^2}. \quad (8.40)$$

Die Gesamtenergie E ist nach (8.13), (8.14) und (8.15) gegeben durch

$$E_n = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}. \quad (8.41)$$

Einsetzen von (8.39) und (8.40) ergibt

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{8 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (8.42)$$

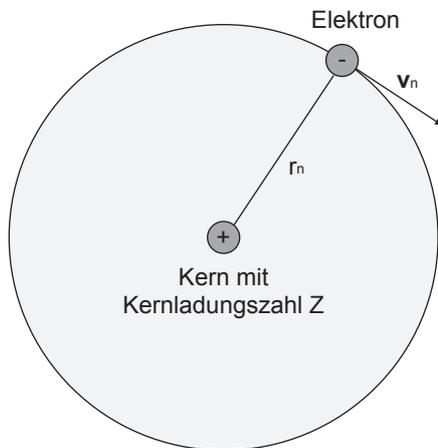


Abb. 8.6: Modell für Ionen mit einem Elektron, das den Kern (mit beliebiger Kernladungszahl Z) mit einer Geschwindigkeit v_n auf einer Kreisbahn mit Radius r_n umkreist.

Zum Abschluss geben wir noch die Frequenz ν der emittierten oder absorbierten Strahlung bei einem Elektronenübergang an. Mit (8.42) ergibt sich aus (8.16)

$$\begin{aligned}\nu &= \frac{1}{h} (E_n - E_{n'}) \\ &= \frac{Z^2 e^4 m}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &= Z^2 R c \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right),\end{aligned}\quad (8.43)$$

wobei $R = m e^4 / (8 \epsilon_0^2 h^3 c)$ die Rydberg-Konstante ist. Somit erkennen wir, dass die Bindungsenergie und auch die Energie der emittierten Photonen wie Z^2 mit der Kernladungszahl des ionisierten Atoms skaliert. Daher haben Ionen immer deutlich höhere Übergangsfrequenzen als neutrale Atome.

8.4.2 Berücksichtigung der Kernbewegung

Bisher haben wir idealisiert angenommen, dass der Kern, um den sich das Elektron bewegt in Ruhe ist. Dies ist nur der Fall, wenn der Kern unendlich schwer wäre. In der Realität hat der Kern aber eine endliche Masse und bewegt sich mit dem Elektron um einen gemeinsamen Schwerpunkt. Wir berücksichtigen diese Mitbewegung des Kerns im Bohrschen Atommodell. Die dadurch hervorgerufene Korrektur der Rydberg-Konstante kann den Unterschied zwischen dem gemessenen Wert für die Rydberg-Konstante $R_{\text{H}} = 1.09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ (siehe Abschnitt 8.2) und dem theoretischen Wert $R = 1.09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ aus (8.25) beim Wasserstoffatom erklären. Ausserdem erlaubt diese Betrachtung aus der genauen Vermessung des elektronischen Spektrums eines Atoms, Isotope mit unterschiedlichen Kernmassen experimentell nachzuweisen.

Die Bewegung des Kerns und des Elektrons mit den Massen M und m und Abstand r kann aufgefasst werden als die Bewegung eines fiktiven Teilchens, das den Schwerpunkt im Abstand r umläuft und die reduzierte Masse $\mu = Mm/(m+M)$ besitzt. Die Masse m des Elektrons muss also durch die reduzierte Masse μ ersetzt werden. Damit erhalten wir für die korrigierte Rydberg-Konstante, die wir mit R_{Kern} bezeichnen, folgenden Ausdruck

$$R_{\text{Kern}} = \frac{R}{1 + m/M}.\quad (8.44)$$

Für das Wasserstoffatom ist für M die Protonenmasse einzusetzen. Es ergibt sich der folgende Wert

$$R_{\text{Kern}} = 1.09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1},\quad (8.45)$$

was in dieser Genauigkeit mit dem gemessenen Wert R_{H} übereinstimmt.

Nach dieser Betrachtung können wir folgendes Fazit ziehen: Die Spektren aller Einelektronensysteme (Atome oder Ionen mit einem einzigen Elektron) stimmen bis auf den Faktor Z^2 und die Rydberg-Konstante R_{Kern} überein

$$\nu = Z^2 R_{\text{Kern}} c \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right).\quad (8.46)$$

Dies deckt sich mit den experimentellen Resultaten. Insbesondere wurden für He^+ diverse Serien von Spektrallinien gefunden die durch (8.46) beschrieben werden. Wie bereits erwähnt, können solche Bohrschen Atommodelle auch andere Phänomene erklären, z.B. wenn in einem Halbleiter ein einzelnes Elektron mit einem positiv geladenen Kern einen gebundenen Zustand bildet und damit ein sogenanntes *Exziton* formt.

8.5 Erweiterung des Bohrschen Atommodells

Betrachtet man die optischen Spektren von Atomen mit einer höheren Auflösung, so zeigt sich, dass einzelne Linien eine Substruktur aus mehreren Linien aufweisen, die sogenannte *Feinstruktur*. Aufgrund der Beobachtung solcher Feinstrukturen beim Wasserstoffatom und beim He^+ -Ion postulierte Sommerfeld um 1915 eine Erweiterung des Bohrschen Atommodells.

Im Bohrschen Atommodell haben wir angenommen, dass sich die Elektronen auf Kreisbahnen um den Kern bewegen. Aus der Betrachtung der mechanischen Gesetze folgte Sommerfeld, dass neben den Kreisbahnen auch Ellipsenbahnen möglich sind. Zur Beschreibung dieser Bahnen ist neben der Hauptquantenzahl n eine zweite Quantenzahl notwendig. Die Hauptquantenzahl bestimmt weiterhin die Gesamtenergie E_n nach der Formel

$$E_n = -\frac{RhcZ^2}{n^2}. \quad (8.47)$$

Zugleich bestimmt sie auch die grosse Hauptachse a_n der Ellipse. Zur Festlegung der kleinen Hauptachse $b_{n,k}$ ist nun die neue Quantenzahl k verantwortlich: Der Betrag des Bahndrehimpulses muss ein Vielfaches von \hbar sein

$$|\vec{L}| = k \cdot \hbar \text{ mit } k \leq n, k \in \mathbb{N}. \quad (8.48)$$

Der Vergleich mit (8.29) zeigt, dass wenn $k = n$ ist, die Ellipsenbahn zu einem Kreis wird. Zusammenfassend können wir sagen, dass zu jeder Hauptquantenzahl n (und damit zur Energie E_n) eine grosse Hauptachse a_n gehört, jedoch verschiedene kleine Hauptachsen $b_{n,k}$, welche durch die zweite Quantenzahl k festgelegt werden.

Wir wissen nun, dass zu jeder Energie E_n zwar verschiedene Bahnen gehören, jedoch ist die Zahl der beobachtbaren Linien im Spektrum gleich geblieben, d.h. das bisherige Modell liefert noch keine Erklärung für die anfangs erwähnte Feinstruktur in atomaren Spektren. Sommerfeld postulierte 1916 daher eine weitere Erweiterung: Die Berücksichtigung der bisher vernachlässigten Relativitätstheorie. Dadurch wird die Masse m zu einer Grösse die von der Geschwindigkeit abhängt. Ein qualitatives Verständnis liefert die Anwendung des 2. Keplerschen Gesetzes auf Atome: Zieht man eine Verbindungslinie zwischen Kern und Elektron so überstreicht diese in gleichen Zeiten gleich grosse Flächen. Folglich bewegen sich die Elektronen auf ihren Ellipsenbahnen näher am Kern schneller und sind daher auch schwerer. Dies führt zu einer Änderung der Bahnform und der Energie: Das Elektron führt eine Art Rosettenbewegung durch und

für die Energie E_n ergibt sich nach Sommerfeld

$$E_{n,k} = -Rhc \frac{Z^2}{n^2} \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) + \text{höhere Ordnungen} \right). \quad (8.49)$$

Dabei bezeichnet α die *Feinstrukturkonstante*, welche gegeben ist durch

$$\alpha = \frac{e^2}{2\epsilon_0 hc} = \frac{1}{137}. \quad (8.50)$$

Die Grössenordnung dieser relativistischen Korrekatur ist $\alpha^2 = 10^{-5}$ und daher eher klein.

Mit dem Bohrschen Atommodell inkl. den Erweiterungen durch Sommerfeld ist es möglich das Spektrum des Wasserstoffatoms zu beschreiben. Bei der Betrachtung von anderen Atomen kommen jedoch schnell die Grenzen dieses Modells zum Vorschein, auf die wir nun im nächsten Abschnitt eingehen.

8.6 Grenzen des Bohr-Sommerfeld-Modells

Das Bohr-Sommerfeld-Modell beschreibt einige grundlegende Eigenschaften des Wasserstoffatoms in guter Näherung. Das Modell erlaubt es aber nicht korrekte Vorhersagen für Atome mit mehreren Elektronen zu treffen.

Selbst beim Wasserstoffatom macht das Modell nur Aussagen über die Frequenz der emittierten oder absorbierten Strahlung. Angaben über relative Intensitäten der von verschiedenen Übergängen emittierten Strahlung können kaum gemacht werden. Bohr versuchte diese Schwachpunkte durch das Korrespondenzprinzip auszumerzen. Wie in Abschnitt 8.3 werden dazu Grössen wie Frequenz oder auch Strahlungsintensität klassisch berechnet und durch Grenzbeobachtungen in die Quantentheorie übertragen.

Ebenfalls ist die Beschreibung der Eigenschaften des Wasserstoffs in elektrischen oder magnetischen Feldern in diesem Modell nur begrenzt möglich. Abhilfe schafft nur eine Betrachtung eines Modells, das ausschliesslich auf der Quantenmechanik basiert (siehe Kapitel 9).

8.7 Rydberg-Atome

In diesem Abschnitt betrachten wir Atome bei denen sich ein Elektron in einem Zustand mit einer sehr grossen Hauptquantenzahl $n > 20$ befindet. Solche Atome werden *Rydberg-Atome* genannt und sind ein wichtiger Bestandteil der Grundlagenforschung über die Wechselwirkung einzelner Photonen mit einzelnen Atomen. Rydberg-Atome besitzen folgende Eigenschaften:

- Das Elektron mit der grossen Hauptquantenzahl bewegt sich auf einer Bahn mit sehr grossem Radius $r_n \sim n^2 a_0$. In Experimenten wurden bereits Rydberg-Atome mit einem Durchmesser von bis zu $0.1 \mu\text{m}$ erzeugt. Dadurch sind Rydberg-Atome im Vergleich zu einem Atom im Grundzustand bis 10^5 mal grösser.

- Dieses Elektron auf Bahnen mit grossen Radien befindet sich weit ausserhalb des Atomrumpfs und der anderen Elektronen. Es bewegt sich also im Feld des Kerns, welcher durch alle anderen Elektronen abgeschirmt wird und deshalb effektiv die Ladung e besitzt. Rydberg-Atome verhalten sich also wie Wasserstoffatome mit hoher Hauptquantenzahl n und können durch das Bohr-Sommerfeld-Modell annähernd gut beschrieben werden.
- Rydberg-Atome zeichnen sich durch hohe Dipolmomente $p \sim n^2ea_0$ aus und zeigen daher eine sehr starke Wechselwirkung mit Licht.
- Ändert das äusserste Elektron seine Bahn und emittiert Licht, so liegen die Übergangsfrequenzen im fernen Infrarot- oder Mikrowellenbereich. Zum Beispiel ergibt sich für ein Elektron mit Hauptquantenzahl $n = 100$ beim wechseln der Bahn (Verringerung der Hauptquantenzahl n um 1) nach (8.19) eine Übergangsfrequenz ν von

$$\nu \sim \frac{2Rc}{n^3} = 6.6 \text{ GHz.} \quad (8.51)$$

- Rydberg-Atome weisen lange Lebensdauern von bis zu einer Sekunde auf. Diese langen Lebensdauern sind auch durch die niedrigen Übergangsfrequenzen der Rydberg-Atome begründet und der daraus resultierenden geringeren spontanen Emissionsrate. Im Vergleich dazu leben niedrigere Anregungszustände von Atomen etwa 10^{-8} s.
- Rydberg-Atome können leicht ionisiert werden, da die Bindungsenergie $E_n \propto 1/n^2$ bei grossen n sehr klein wird.

In der Realität kann man Rydberg-Atome mit Hauptquantenzahlen n bis zu 350 beobachten. Mit Hilfe von Rydberg-Atome konnte man Grössen wie Energieniveaus oder Lebensdauern für Quantenzahlen experimentell bestimmen, die bis dahin nur theoretisch zugänglich waren.

8.8 Das Franck-Hertz-Experiment

Bisher haben wir in spektroskopischen Experimenten beobachtet, dass die Bindungsenergie von Elektronen in Atomen quantisiert ist. Wir betrachten nun ein Elektronenstoss-Versuch, mit welchem James Franck und Gustav Hertz 1914 (unabhängig von optischer Spektroskopie) die Existenz von diskreten Energieniveaus im Atom nachwiesen².

8.8.1 Aufbau und Messung

Beim Franck-Hertz-Experiment (siehe Abb. 8.7) werden in einer mit Quecksilberdampf (von kleinem Druck) gefüllten Röhre Elektronen von der Glühkathode K emittiert und im elektrischen Feld zwischen Kathode K und Gitter G beschleunigt. Weiter aussen befindet sich die Auffängerelektrode A, die gegen das Gitter eine negative Spannung von 0.5 V hat.

²Für dieses Experiment und den damit erlangten Resultaten wurde Franck und Hertz 1925 der Nobelpreis in Physik verliehen.

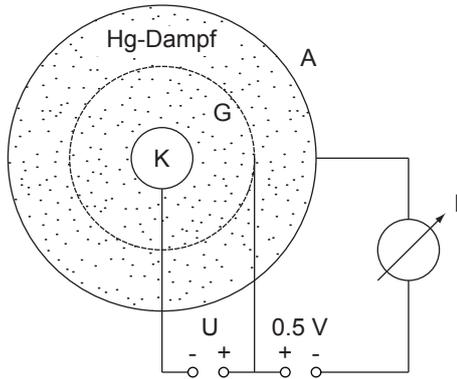


Abb. 8.7: Aufbau des Franck-Hertz-Experiments: In einer mit Quecksilberdampf gefüllten Röhre werden Elektronen von der Glühkathode K emittiert und im elektrischen Feld zwischen Kathode K und Gitter G beschleunigt. Die Auffängerelektrode A hat gegen das Gitter eine negative Spannung von 0.5 V.

Gemessen wird nun der Strom I im Auffängerkreis als Funktion der Beschleunigungsspannung U . Aus dem Messergebnis (siehe Abb. 8.8) wird ersichtlich, dass der Auffängerstrom Maxima durchläuft, die von mehr oder weniger scharfen Einbrüchen gefolgt sind. Die Maxima sind gleichmässig verteilt mit einem Abstand von jeweils 4.86 V.

8.8.2 Interpretation

Die Interpretation für das erhaltene Messresultat ist folgende: Die beschleunigten Elektronen stossen mit den Quecksilberatomen zusammen. Wenn die kinetische Energie $mv^2/2$ des Elektrons 4.86 eV übersteigt, werden inelastische Stösse möglich. Dabei handelt es sich aber um besondere inelastische Stösse: Der Energieverlust des Elektrons beträgt jedes Mal ziemlich genau 4.86 eV. Da das Massenverhältnis der Stosspartner sehr klein ist (Elektronenmasse m / Masse Quecksilberatom $M = 2.6 \cdot 10^{-6}$), wird nach dem Impulserhaltungssatz nur ein sehr kleiner Bruchteil (Grössenordnung 10^{-6}) der kinetischen Energie des Elektrons in Form von kinetischer Energie auf das Quecksilberatom übertragen. Beinahe der gesamte Energieverlust des Stosselektrons wird in der Elektronenhülle des Quecksilberatoms gespeichert. Die kinetische Energie des Elektrons

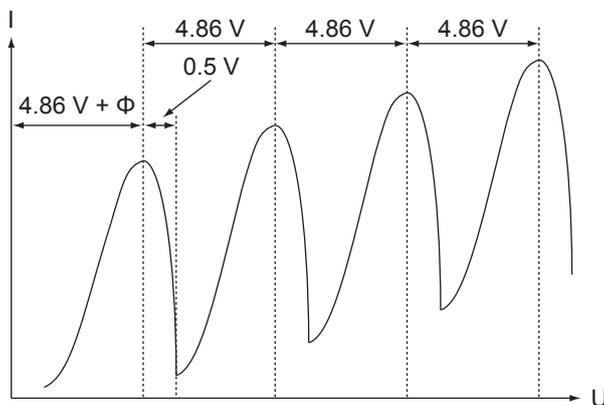


Abb. 8.8: Messkurve des Franck-Hertz-Experiments: Auffängerstrom I als Funktion der Beschleunigungsspannung U .

nach dem inelastischen Stoss ist deshalb annähernd gegeben durch

$$\frac{1}{2}mv_1^2 = \frac{1}{2}mv_0^2 - 4.86 \text{ eV}, \quad (8.52)$$

wobei v_0 (v_1) die Geschwindigkeit vor (nach) dem Stoss ist. Dabei haben wir die Approximation $m/M \rightarrow 0$ vorgenommen, was nach den oben aufgeführten Betrachtungen gerechtfertigt ist. Ausserdem wird die thermische Geschwindigkeit der Quecksilberatome und die Geschwindigkeitsverteilung der aus der Kathode austretenden Elektronen vernachlässigt.

Wir gehen noch etwas genauer auf die charakteristische Form der Messkurve ein. Der erste Abfall des Auffängerstroms wird bei der Beschleunigungsspannung $U = 4.86 \text{ V} + \phi$ beginnen, wobei $W = e\phi$ die Austrittsarbeit der Elektronen aus der Kathode ist. Das Elektron wird in diesem Fall gerade noch einen inelastischen Stoss machen können und danach still stehen. Wenn die kinetische Energie des Elektrons nach dem Stoss mehr als 0.5 V beträgt, so vermag es noch gegen die Gegenspannung von 0.5 V anzulaufen und trägt zum Auffängerstrom bei. Folglich wird bis zu einer Beschleunigungsspannung von $U = 4.86 \text{ V} + \phi + 0.5 \text{ V}$ der Auffängerstrom sinken und beim Überschreiten dieser Spannung wieder ansteigen. Bei weiterer Steigerung der Beschleunigungsspannung vermag das Elektron noch einen zweiten, dritten, vierten ... inelastischen Zusammenstoss auszuführen. Da es jedes Mal die Energie von 4.86 eV verliert folgen die Maxima bzw. Abfälle der $I(U)$ -Kurve in Abständen von 4.86 V aufeinander.

Wir schliessen aus diesen Beobachtungen, dass die Elektronenhülle eines Quecksilberatoms Energie nur in diskreten Quanten von 4.86 eV aufnehmen kann. Dies ist ein weiterer unabhängiger Hinweis auf das Vorhandensein von diskreten Energieniveaus in Atomen. In diesem Experiment wird das Quecksilberatom aus dem Grundzustand in einen angeregten Zustand gehoben, dessen Energie um 4.86 eV höher liegt. Tatsächlich findet man auch eine entsprechende Linie im optischen Spektrum des Quecksilberatoms bei $E = 4.86 \text{ eV}$ bzw. $\lambda = 2536 \text{ \AA}$.

Es bleibt jetzt noch die Frage zu klären, was mit dieser Energie geschieht, die in der Elektronenhülle des gestossenen Quecksilberatoms gespeichert ist. Es zeigt sich, dass die Quecksilberatome nicht lange in diesem angeregten Zustand bleiben, sondern innerhalb einer Zeit von ungefähr 10^{-8} s unter Emission eines Photons der Energie $h\nu = 4.86 \text{ eV}$ in den Grundzustand zurückfallen. Die Wellenlänge des emittierten Lichts ist gegeben durch $\lambda = 2536 \text{ \AA}$. Diese Strahlung kann im Franck-Hertz-Experiment ebenfalls direkt beobachtet werden.

Bei einer verfeinerten Messanordnung erhält man mehrere Maxima und Minima in der $I(U)$ -Messkurve. Es zeigt sich also auch im Stossexperiment die Tatsache, dass das Quecksilberatom viele angeregte Zustände, d.h. viele diskrete Energieniveaus besitzt. Es kann auch vorkommen, dass ein Atom durch einen ersten Elektronenstoss in ein langlebiges, ein sogenanntes *metastabiles* Energieniveau gehoben wird. Bevor es dann in den Grundzustand zurückfällt, kann es durch einen zweiten Stoss in ein noch höhere Energieniveau gehoben werden.

8.9 Einstein-Koeffizienten

Die Absorption und Emission von elektromagnetischer Strahlung durch Atome werden durch die sogenannten Einstein-Koeffizienten beschrieben. Im thermischen Gleichgewicht erlauben sie eine alternative Herleitung des Planckschen Strahlungsgesetzes (5.22), das wir bereits in Kapitel 5 kennengelernt haben.

Wir betrachten N Atome im thermischen Gleichgewicht mit einem elektromagnetischen Strahlungsfeld der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ bei einer Temperatur T . Des Weiteren betrachten wir Atome mit diskreten Energieniveaus, wie wir sie in diesem Kapitel kennen gelernt haben. Betrachten wir nun vereinfachend nur zwei dieser Energieniveaus E_i und E_j , so gibt es nach Einstein drei verschiedene physikalische Prozesse, die für einen Übergang zwischen diesen Niveaus verantwortlich sind (siehe Abb. 8.9):

1. Durch **Absorption** eines Photons der Energie $h\nu_{ij} = E_j - E_i$ aus dem elektromagnetischen Feld wird das Atom vom tieferen Energieniveau E_i ins höhere Energieniveau E_j angehoben.
2. Es ist möglich, dass ein Atom im Energieniveau E_j nach einer gewissen Zeit (mittlere Lebensdauer des Energieniveaus) spontan unter Emission eines Photons der Energie $h\nu_{ij} = E_j - E_i$ ins tiefer liegende Energieniveau E_i fällt. Dementsprechend wird dieser Vorgang **spontane Emission** genannt.
3. Bei der **stimulierten Emission** wird der Übergang des Atoms von E_j nach E_i durch ein Photon der Energie $h\nu_{ij} = E_j - E_i$ aus dem elektromagnetischen Feld eingeleitet oder wie es der Name sagt stimuliert. Dabei wird ein weiteres Photon der Energie $h\nu_{ij} = E_j - E_i$ ausgesendet. Es sei hier bemerkt, dass die stimulierte Emission in Lasern zur Erzeugung von kohärentem Licht eingesetzt wird.

Wir nehmen nun an, dass sich N_i Atome im Zustand E_i und N_j Atome im Zustand E_j befinden, wobei gilt $N = N_i + N_j$. Wir betrachten die Übergänge von E_i nach E_j und E_j nach E_i getrennt:

1. Die Anzahl dN_{ij} der Atome, die durch Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ in einem Zeitintervall dt durch Absorption eines Photons von E_i nach E_j übergehen, ist gegeben

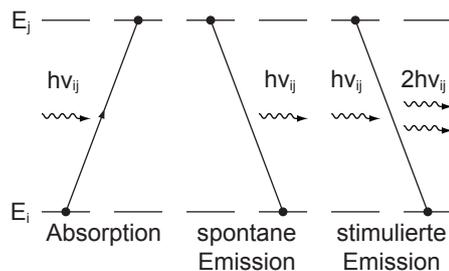


Abb. 8.9: Absorption, spontane und stimulierte Emission illustriert in einem Energiediagramm eines Atoms mit den Energielevels E_i und E_j .

durch

$$dN_{ij} = N_i B_{ij} u(\nu_{ij}) dt, \quad (8.53)$$

wobei B_{ij} der *Einsteinsche B-Koeffizient* ist und für die Wahrscheinlichkeit steht, dass ein Atom ein Photon der Frequenz ν_{ij} absorbiert.

2. Die Anzahl dN_{ji} der Atome, die durch Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld der spektralen Energiedichte $u(\nu)$ im Zeitintervall dt durch spontane oder stimulierte Emission eines Photons von E_j nach E_i übergehen, ist gegeben durch

$$dN_{ji} = N_j (A_{ji} + B_{ji} u(\nu_{ij})) dt. \quad (8.54)$$

Dabei ist A_{ji} der *Einsteinsche A-Koeffizient* und steht für die Wahrscheinlichkeit, dass ein Atom spontan ein Photon der Frequenz ν_{ij} emittiert. B_{ji} ist ein weiterer *Einsteinscher B-Koeffizient* und steht für die Wahrscheinlichkeit, dass ein Atom durch Wechselwirkung mit einem Photon der Frequenz ν_{ij} zur Emission eines weiteren Photons der Frequenz ν_{ij} stimuliert wird.

Aus (8.53) und (8.54) ergeben sich die Differentialgleichungen für den zeitlichen Verlauf der Anzahl Atome N_i und N_j in den Zuständen E_i und E_j . Die Änderung dN_i pro Zeitintervall dt der Anzahl Atome im Zustand E_i ergibt sich aus der Differenz zwischen der Anzahl Atome dN_{ji} , die im Zeitintervall dt von E_j nach E_i übergehen und der Anzahl Atome dN_{ij} , die im Zeitintervall dt von E_i nach E_j übergehen

$$dN_i = dN_{ji} - dN_{ij}. \quad (8.55)$$

Analog ergibt sich die Änderung dN_j pro Zeitintervall dt der Anzahl Atome im Zustand E_j aus der Differenz zwischen der Anzahl Atome dN_{ij} , die im Zeitintervall dt von E_i nach E_j übergehen und der Anzahl Atome dN_{ji} , die im Zeitintervall dt von E_j nach E_i übergehen

$$dN_j = dN_{ij} - dN_{ji}. \quad (8.56)$$

Einsetzen von (8.53) und (8.54) liefert die folgenden Differentialgleichungen

$$\frac{dN_i}{dt} = N_j (A_{ji} + B_{ji} u(\nu_{ij})) - N_i B_{ij} u(\nu_{ij}), \quad (8.57)$$

$$\frac{dN_j}{dt} = N_i B_{ij} u(\nu_{ij}) - N_j (A_{ji} + B_{ji} u(\nu_{ij})). \quad (8.58)$$

Im thermischen Gleichgewicht streben die Anzahl Atome N_i und N_j in den Zuständen E_i und E_j gegen einen konstanten Wert (siehe Abb. 8.10), d.h. die Ableitungen dN_i/dt und dN_j/dt verschwinden. Daraus folgt

$$N_j (A_{ji} + B_{ji} u(\nu_{ij})) = N_i B_{ij} u(\nu_{ij}). \quad (8.59)$$

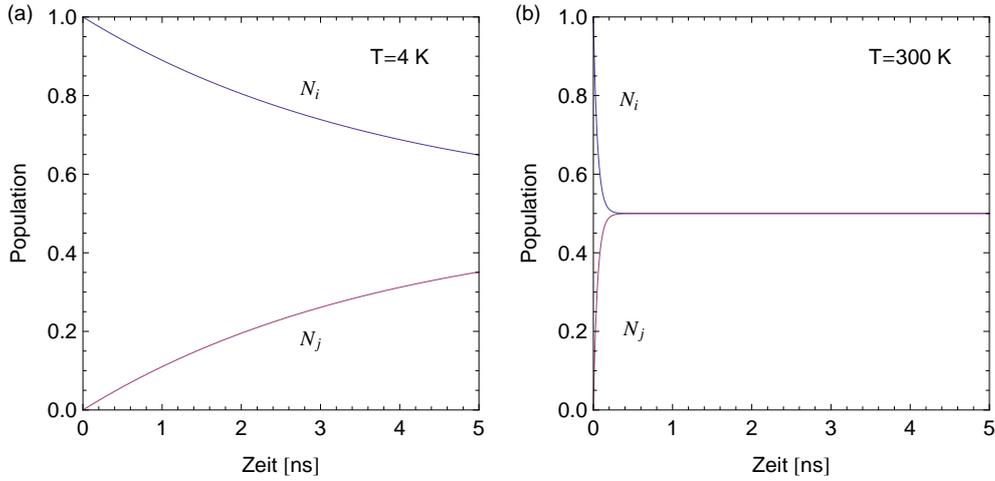


Abb. 8.10: Die Anzahl Atome N_i und N_j in den Zuständen E_i und E_j als Funktion der Zeit für die Temperaturen (a) $T = 4\text{ K}$ und (b) $T = 300\text{ K}$. Als Anfangszustände haben wir jeweils $N_i = 1$ und $N_j = 0$ gewählt.

Diese Gleichung ist gleichbedeutend mit der Aussage, dass im thermischen Gleichgewicht die Anzahl Übergänge von E_i nach E_j im Zeitintervall dt identisch mit den Anzahl Übergängen im Zeitintervall dt von E_j nach E_i ist, d.h. es gilt

$$dN_{ij} = dN_{ji}. \quad (8.60)$$

Aus (8.59) ergibt sich für die spektrale Energiedichte $u(\nu_{ij})$ der folgende Ausdruck

$$\begin{aligned} u(\nu_{ij}) &= \frac{N_j A_{ji}}{N_i B_{ij} - N_j B_{ji}} \\ &= \frac{A_{ji}}{B_{ji}} \frac{1}{\frac{N_i}{N_j} \frac{B_{ij}}{B_{ji}} - 1}. \end{aligned} \quad (8.61)$$

Wir nehmen an, dass die Anzahl der Atome N_i und N_j in den Zuständen E_i und E_j im thermischen Gleichgewicht durch die klassische Maxwell-Boltzmann-Verteilung gegeben ist

$$N_i = C e^{-E_i/(k_B T)}, \quad (8.62)$$

$$N_j = C e^{-E_j/(k_B T)}, \quad (8.63)$$

wobei C eine Konstante ist. Damit folgt für das Verhältnis der Zahl der Atome N_i im Zustand E_i zur Zahl der Atome N_j im Zustand E_j

$$\frac{N_i}{N_j} = e^{(E_j - E_i)/(k_B T)} = e^{h\nu_{ij}/(k_B T)}. \quad (8.64)$$

Einsetzen in (8.61) ergibt

$$u(\nu_{ij}) = \frac{A_{ji}}{B_{ji}} \frac{1}{\frac{B_{ij}}{B_{ji}} e^{h\nu_{ij}/(k_B T)} - 1}. \quad (8.65)$$

Für $T \rightarrow \infty$ muss gelten $u(\nu) \rightarrow \infty$. Daraus folgt, dass die beiden B-Koeffizienten identisch sein müssen

$$B_{ij} = B_{ji}. \quad (8.66)$$

D.h. die Wahrscheinlichkeiten für Absorption und stimulierte Emission sind gleich. Damit ergibt sich für die spektrale Energiedichte $u(\nu_{ij})$

$$u(\nu_{ij}) = \frac{A_{ji}}{B_{ji}} \frac{1}{e^{h\nu_{ij}/(k_B T)} - 1}. \quad (8.67)$$

Für sehr kleine Frequenzen, d.h. $h\nu_{ij} \ll k_B T$ gilt das Rayleigh-Jeans-Gesetz

$$u(\nu_{ij}) = \frac{8\pi\nu_{ij}^2 k_B T}{c^3}. \quad (8.68)$$

Entwickeln wir nun (8.67) für kleine Frequenzen ($h\nu_{ij} \ll k_B T$) dann erhalten wir

$$u(\nu_{ij}) = \frac{A_{ji}}{B_{ji}} \frac{k_B T}{h\nu_{ij}}. \quad (8.69)$$

Der Vergleich mit dem Rayleigh-Jeans-Gesetz (8.68) liefert für das Verhältnis der Einstein-Koeffizienten

$$\frac{A_{ji}}{B_{ji}} = \frac{8\pi h \nu_{ij}^3}{c^3}. \quad (8.70)$$

Mit anderen Worten die Wahrscheinlichkeiten für spontane Emission und Absorption sind proportional zueinander. Einsetzen in (8.67) liefert nun das folgende Resultat

$$u(\nu_{ij}) = \frac{8\pi h \nu_{ij}^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu_{ij}/(k_B T)} - 1}. \quad (8.71)$$

Dies ist das Plancksche Strahlungsgesetz (5.22), das wir bereits in Kapitel 5 kennengelernt haben, hergeleitet aus den Prozessen der Absorption und Emission von elektromagnetischer Strahlung in einem Atom der Übergangsfrequenz ν_{ij} .

8.10 Zusammenfassung

- Betrachtet man Emissions- oder Absorptionsspektren von Atomen, so beobachtet man diskrete Linienspektren, was darauf hindeutet, dass Elektronen in einem Atom mit bestimmten diskreten Energiewerten an den Atomkern gebunden sind. Neben Linienspektren kommen in der Natur auch kontinuierliche Spektren (Festkörper oder Gase) oder Bandspektren (molekulare Gase) vor.

Diese Beobachtung kann mit Methoden der klassischen Physik nicht erklärt werden. Klassische Theorien würden beliebige Elektronenenergien

und somit kontinuierliche Spektren vorhersagen, zudem versagen sie bei der Erklärung der Stabilität von Atomen.

Als erster Ansatzpunkt zur Erklärung der Spektren von Atomen gilt das Ritzsche Kombinationsprinzip, das besagt, dass die Frequenz ν jeder Spektrallinie eines Atoms als Differenz zwischen zwei sogenannten Spektraltermen T_i und T_j darstellen lässt und dass jede Atomsorte einen für sie charakteristischen Satz von Spektraltermen T_j besitzt.

- Das Wasserstoffspektrum besteht aus einer Vielzahl von Serien, wie z.B. die Balmer-Serie im sichtbaren Bereich. Die Gesamtheit aller Serien wird durch die Rydberg-Formel beschrieben

$$\nu_{if} = R_{\text{H}} c \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (8.72)$$

wobei die ganzen Zahlen n_i und n_f , die sogenannten Hauptquantenzahlen, den Anfangszustand bzw. den Endzustand bezeichnen und $R_{\text{H}} = 1.09678 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ die Rydberg-Konstante ist.

- Das erste einfache Modell zur Beschreibung des Spektrum des Wasserstoffatoms ist das Bohrsche Atommodell. Einerseits ging Bohr vom Rutherford'schen Atommodell aus, indem er annahm, dass sich im Wasserstoffatom das negativ geladene Elektron auf einer Kreisbahn um den positiv geladenen Kern bewegt. Andererseits formulierte er ausgehend von den experimentellen Erkenntnissen über atomare Spektren drei Postulate. Daraus erhielt er folgende Resultate:

1. Rydberkonstante

$$R = \frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3 c} = 1.09737 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}. \quad (8.73)$$

2. Bahnradius

$$r_n = \frac{e^2 n^2}{8 \pi \epsilon_0 R h c} = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \cdot n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}, \quad (8.74)$$

wobei der kleinste Bahnradius $r_1 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ Bohrscher Radius genannt wird und üblicherweise mit a_0 bezeichnet wird.

3. Bahndrehimpuls

$$|\vec{L}| = n \cdot \hbar \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (8.75)$$

- Die Resultate des Bohrschen Atommodells lassen sich auf wasserstoffähnliche Systeme wie Ionen mit einem Elektron, das sich um einen Kern mit Kernladungszahl Z bewegt, erweitern. Berücksichtigt man zudem noch die Bewegung des Kerns, so ergibt sich zur Beschreibung der Spektren von wasserstoffähnlichen Systemen folgende allgemeine Formel

$$\nu = Z^2 R_{\text{Kern}} c \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ mit } R_{\text{Kern}} = \frac{R}{1 + m/M}, \quad (8.76)$$

wobei M die Kernmasse bezeichnet.

- Aufgrund von beobachteten Feinstrukturen im Wasserstoffspektrum, postulierte Sommerfeld eine Erweiterung des Bohrschen Atommodells. Unter Berücksichtigung, dass für Elektronen neben Kreisbahnen auch Ellipsenbahnen möglich sind sowie der Relativitätstheorie, erhielt er für die Energiewerte E_n der Elektronen

$$E_{n,k} = -Rhc \frac{Z^2}{n^2} \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) + \text{höhere Ordnungen} \right). \quad (8.77)$$

Dabei ist k eine zweite Quantenzahl und $\alpha = e^2/(2\epsilon_0 hc) = 1/137$ die *Feinstrukturkonstante*.

- Das Bohr-Sommerfeld-Modell beschreibt einige grundlegende Eigenschaften des Wasserstoffatoms in guter Näherung. Es weist aber seine Grenzen auf, wie z.B. dass mit dem Modell keine korrekten Vorhersagen für Atome mit mehreren Elektronen möglich sind. Eine genaue Beschreibung ist nur in einem rein quantenmechanischen Modell möglich.
- Atome, welche sich annähernd durch das Bohr-Sommerfeld-Modell beschreiben lassen, sind Rydberg-Atome. Das sind Atome, bei denen sich ein Elektron in einem Zustand mit einer sehr grossen Hauptquantenzahl $n > 20$ befindet und die ein wichtiger Bestandteil der Grundlagenforschung sind.
- Unabhängig von optischer Spektroskopie wurde die Existenz von diskreten Energieniveaus im Atom durch das Franck-Hertz-Experiment nachgewiesen: Im Experiment treffen beschleunigte Elektronen auf Quecksilberatome und es zeigt sich, dass diese Atome nur Energie in diskreten Quanten aufnehmen können.
- Betrachtet man zwei Energieniveaus E_i und E_j eines Atoms, so gibt es nach Einstein die drei physikalischen Prozesse Absorption, spontane und stimulierte Emission, die für einen Übergang zwischen diesen Niveaus verantwortlich sind. Diese Prozesse werden durch sogenannte Einstein-Koeffizienten beschrieben. Im thermischen Gleichgewicht erlauben sie eine alternative Herleitung des Planckschen Strahlungsgesetzes.

Kapitel 9

Grundlagen der Quantenmechanik

In den vorangegangenen Kapiteln haben wir uns mit physikalischen Situationen und experimentellen Ergebnissen auseinandergesetzt, bei denen die klassische Physik nicht mehr ausreicht, um die beobachteten Phänomene befriedigend zu erklären. Diese Problematik motivierte die Einführung der Quantenmechanik. In Kapitel 8 haben wir z.B. erkannt, dass das Bohrsche Atommodell grundlegende Eigenschaften der Spektren von Atomen mit einem Elektron mit Hilfe semi-klassischer Annahmen, die auf der Beschreibung der Eigenschaften von Teilchen durch Materiewellen beruhen, erklären kann. Um ein detailliertes physikalisches Verständnis von Atomen in elektromagnetischen Feldern oder Atomen mit mehreren Elektronen zu erlangen, erkannte man am Anfang des letzten Jahrhunderts schnell, dass eine vollständig neue Theorie, die heute als Quantenmechanik bekannt ist, benötigt werden würde.

Historisch gesehen wurden die Grundlagen der Quantenmechanik in den Jahren 1925 und 1926 mit Hilfe wichtiger Beiträge bekannter Physiker wie Erwin Schrödinger¹, Werner Heisenberg, Max Born, Paul Dirac und anderer entwickelt. Das grundlegende Ziel war eine Theorie zu entwickeln, die die Welleneigenschaften von Teilchen korrekt beschreibt. Schon bis in die 1930er Jahre, kurz nach ihrer Entwicklung, konnten eine grosse Anzahl von Beobachtungen und Experimenten in der Physik und auch der Chemie durch diese neue Theorie erklärt werden.

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns nun mit den wichtigen Aspekten des Formalismus der Quantenmechanik. Die Theorie basiert auf einigen wenigen grundlegenden Postulaten, mit deren Hilfe alle Beobachtungen von quantenmechanischen Phänomenen in der Natur korrekt beschrieben werden können. Bis heute hat noch kein Experiment den Vorhersagen der Quantenmechanik widersprochen.

Hier führen wir in die Grundlagen der Quantenmechanik basierend auf der Wellenmechanik von de Broglie ein (siehe Kapitel 6). Wir werden uns dabei zunächst auf die quantenmechanischen Eigenschaften der Dynamik einzelner Teilchen (Massepunkte) in einer Dimension, beschrieben durch die Ortskoordi-

¹Schrödinger war Professor der Universität Zürich von 1921 - 1927.

nate x und den Impuls p , beschränken. Dabei soll jedoch darauf hingewiesen werden, dass die Postulate und hergeleiteten Sätze auch für drei Dimensionen gelten.

9.1 Das erste Postulat: Wellenfunktionen

Zur Formulierung des ersten Postulats der Quantenmechanik benötigen wir die folgende Definition:

Definition 9.1 Eine Funktion $f(x, t)$ heisst **quadratisch integabel**, falls gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x, t)f(x, t)dx < \infty, \quad (9.1)$$

wobei $f^*(x, t)$ die komplex konjugierte Funktion von $f(x, t)$ bezeichnet. Der Raum aller quadratisch integablen Funktionen wird mit L^2 bezeichnet.

Postulat 1 Zu einem Teilchen (Massepunkt) gehört eine eindeutige, quadratisch integable, im Allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\psi(x, t)$. Sie beschreibt den Zustand des Teilchens. Dabei gibt $\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ die Wahrscheinlichkeit an das Teilchen zur Zeit t zwischen x und $x + dx$ anzutreffen. Die Grösse $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ wird daher als **Wahrscheinlichkeitsdichte** bezeichnet.

Wir diskutieren zunächst einige wichtige Aspekte dieses Postulats. Da die Wellenfunktion quadratisch integabel ist, kann sie normiert werden. Dazu ziehen wir die Bedingung heran, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t irgendwo auf der x -Achse anzutreffen 100% ist. Daher lautet die **Normierungsbedingung**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx = 1. \quad (9.2)$$

Weiter gilt nach dem Postulat 1, dass der Zustand des Teilchens durch die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ bestimmt ist. Somit sind alle Informationen über die quantenmechanischen Eigenschaften eines Teilchens in $\psi(x, t)$ enthalten. Experimentell erfassbare Grössen werden in der Quantenmechanik durch Erwartungswerte charakterisiert. Nach der Wahrscheinlichkeitsrechnung gilt folgende Definition.

Definition 9.2 Der **Erwartungswert** einer Funktion $f(x, t)$, die eine gegebene physikalische Messgrösse beschreibt, ist für einen bestimmten Zeitpunkt t gegeben durch

$$\langle f(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)f(x, t)\psi(x, t)dx \quad (9.3)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f(x, t)}_{\text{Funktionswert}} \underbrace{\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx}_{\text{Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Funktionswerts}} \quad (9.4)$$

Wahrscheinlichkeit für das
Auftreten des Funktionswerts

Dabei ist zu beachten, dass die instruktive Umformung in der zweiten Zeile nur dann gilt, wenn die Funktion $f(x, t)$ reelle oder komplexe Werte annimmt. Handelt es sich bei der Funktion um einen sogenannten Operator, so ist (9.3) in der gegebenen Form explizit zu verwenden, wie wir in Abschnitt 9.3 einsehen werden. Beispiele für Funktionen $f(x, t)$ sind die Ortskoordinate $x(t)$ des Teilchens oder seine potentielle Energie $V(x, t)$.

9.1.1 Beispiel: Teilchen im Potentialtopf

Zur Veranschaulichung des ersten Postulats betrachten wir ein Teilchen in einem eindimensionalen Potentialtopf (siehe Abb. 9.1). D.h. die Bewegung des Teilchens entlang der x -Richtung ist durch harte Wände an den Positionen $x = 0$ und $x = L$ eingeschränkt. Damit sind die Gebiete $x < 0$ und $x > L$ für das Teilchen nicht erreichbar. Diese Tatsache wird durch das folgende Potential $V(x)$ beschrieben

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.5)$$

Wir betrachten das Teilchen nun als Materiewelle. Im Bereich $0 \leq x \leq L$ kann sich das Teilchen frei bewegen. Daher setzen wir für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$, die den Zustand des Teilchens in diesem Bereich beschreibt, die Wellenfunktion für ein freies Teilchen an. Nach (6.17) gilt

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}. \quad (9.6)$$

Klassisch gesehen besteht für ein freies Teilchen zwischen der Energie E und dem Impuls p die folgende Beziehung

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow p = \pm\sqrt{2mE}. \quad (9.7)$$

D.h. bei konstanter Energie E kann der Impuls p in einer Dimension zwei mögliche Werte annehmen, die einer Bewegung des Teilchens entlang der positiven oder negativen Koordinatenachse entspricht. Wir erweitern daher unseren Ansatz zu einer Superposition von einer nach rechts und einer nach links laufenden Materiewelle

$$\psi(x, t) = \left(Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.8)$$

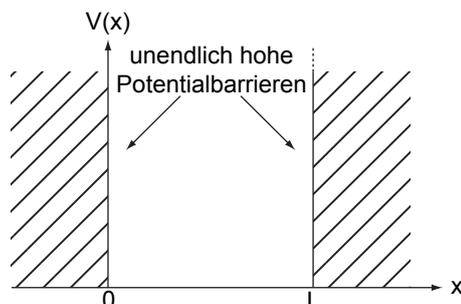


Abb. 9.1: Das Potential $V(x)$ in Abhängigkeit von x für ein Teilchen im Potentialtopf. Unendlich hohe Potentialbarrieren beschränken das Teilchen auf den Bereich $0 < x < L$.

Nun berücksichtigen wir, dass die freie Bewegung des Teilchens auf den Bereich $0 \leq x \leq L$ beschränkt ist. D.h. die betrachtete Wellenfunktion muss folgenden Randbedingungen genügen

$$\psi(0, t) = \psi(L, t) = 0. \quad (9.9)$$

Aus $\psi(0, t) = 0$ folgt $A + B = 0$. Damit erhalten wir

$$\psi(x, t) = A \left(e^{ipx/\hbar} - e^{-ipx/\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} = 2iA \sin(px/\hbar) e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.10)$$

Aus $\psi(L, t) = 0$ folgt $\sin(pL/\hbar) = 0$ und damit $pL/\hbar = n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$. Woraus wir die Bedingung erhalten, dass der Impuls p und damit die Energie E des Teilchens im Potentialtopf nur diskrete Werte E_n annehmen kann

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (9.11)$$

Hier erkennen wir, dass die Beschreibung eines Teilchens in einem Potentialtopf als Materiewelle auf natürliche Art und Weise zu einer diskreten Abfolge von möglichen Energiewerten des Teilchens, also zu einer Quantisierung, führt.

Die Wellenfunktion $\psi_n(x, t)$ zur Energie E_n nimmt damit die folgende Form an

$$\psi_n(x, t) = \begin{cases} 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.12)$$

Zur Bestimmung der Konstanten A ziehen wir nun die Normierungsbedingung (9.2) heran. Wir erhalten

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x, t) \psi_n(x, t) dx \\ &= 4A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \\ &= 4A^2 \left(\frac{x}{2} - \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{4n\pi/L} \right) \Big|_0^L \\ &= 2A^2 L. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Daraus ergibt sich $A = \sqrt{1/(2L)}$ und somit für die Wellenfunktion $\psi_n(x, t)$ zur Energie E_n für das Teilchen im Potentialtopf das folgende Resultat (siehe Abb. 9.2)

$$\psi_n(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} i \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.14)$$

Ein Potentialtopf, wie wir ihn hier besprochen haben, ist ein gutes Modell für die Energieniveaus von Elektronen in sogenannten *Quantenpunkten* (*quantum dots*). Die Elektronen in Quantenpunkten sind in ihrer Beweglichkeit in allen drei Raumrichtungen eingeschränkt. Realisiert werden Quantenpunkte in sogenannten Nanostrukturen, welche grösstenteils aus verschiedenen Halbleitermaterialien aufgebaut sind.

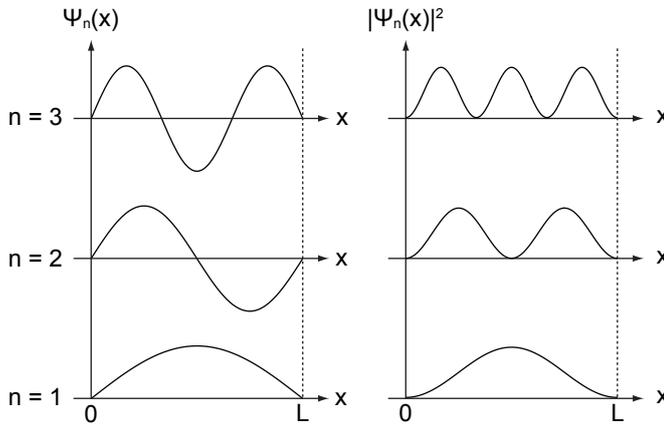


Abb. 9.2: Die Wellenfunktionen $\psi_n(x, t)$ und die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi_n(x, t)|^2$ für die Zustände $n = 1, 2, 3$ für ein Teilchen im Potentialtopf.

9.1.2 Darstellung der Wellenfunktion im Impulsraum

Bisher haben wir die Wellenfunktion als eine Funktion der Ortsvariablen x betrachtet. Wir haben also die sogenannte *Ortsraumdarstellung* gewählt. Anstelle der Ortskoordinate x kann jedoch auch der entsprechende Impuls p als Variable eingeführt werden. Man postuliert dann eine weitere, ebenfalls eindeutige, quadratisch integrierbare, im Allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\phi(p, t)$, die den Zustand des Teilchens im folgenden Sinn beschreibt: $\phi^*(p, t)\phi(p, t)dp$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen zur Zeit t einen Impuls zwischen p und $p + dp$ besitzt.

Auch für diese Wellenfunktion gilt eine **Normierungsbedingung**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t)\phi(p, t)dp = 1. \tag{9.15}$$

Wir können auch hier für eine Funktion $g(p, t)$, die sich aufs Teilchen bezieht, den entsprechenden Erwartungswert definieren.

Definition 9.3 Der **Erwartungswert** einer Funktion $g(p, t)$ ist für einen bestimmten Zeitpunkt t gegeben durch

$$\langle g(p, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t)g(p, t)\phi(p, t)dp \tag{9.16}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{g(p, t)}_{\text{Funktionswert}} \underbrace{\phi^*(p, t)\phi(p, t)dp}_{\text{Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Funktionswerts}} \tag{9.17}$$

Hier gelten die selben Einschränkungen wie wir sie bereits für die Wellenfunktionen im Ortsraum diskutiert haben. Beispiele für die Funktion $g(p, t)$ sind der Impuls $p(t)$ des Teilchens oder seine kinetische Energie $E_{\text{kin}} = p^2/(2m)$.

Nun untersuchen wir, welcher Zusammenhang zwischen der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im Ortsraum und der Wellenfunktion $\phi(p, t)$ im Impulsraum besteht. Wir betrachten dazu ein Teilchen mit konstanter Gesamtenergie $E = \hbar\omega$, z.B. ein

Teilchen, das sich mit konstanter kinetischer Energie in einem konstanten Potential $V(x)$ bewegt. Der Zustand wird durch ein entsprechendes Wellenpaket $\psi(x, t)$ beschrieben (siehe Abschnitt 6.4)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk = \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk. \quad (9.18)$$

Dabei ist $A(k)$ durch die entsprechende Fourier-Transformierte gegeben

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx. \quad (9.19)$$

Mit der de Broglie-Beziehung $p = \hbar k$ folgt damit, dass auch die Wellenfunktionen im Orts- bzw. Impulsraum $\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ durch eine Fourier-Transformation miteinander verbunden sind. Es gilt

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} dp, \quad (9.20)$$

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (9.21)$$

9.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation

In der klassischen Mechanik sind die Eigenschaften eines Teilchens, wie zum Beispiel sein Ort x und sein Impuls p , *gleichzeitig* beliebig genau bestimmt. Diese Eigenschaften lassen sich im Prinzip mit beliebiger, nur durch die Messapparatur begrenzter, Genauigkeit in einer Messung bestimmen.

Im Gegensatz dazu ist eine charakteristische Eigenschaft der Quantenmechanik, dass der Ort x und der Impuls p eines Teilchens nicht *gleichzeitig* beliebig genau bestimmt sind. Versucht man zum Beispiel x und p gleichzeitig zu messen, so gilt, dass das Produkt der Standardabweichungen der Messresultate für Ort und Impuls immer grösser ist als eine Konstante, die durch die Quantenmechanik bestimmt ist. Diese Eigenschaft der Quantenmechanik wird als Heisenbergsche Unschärferelation bezeichnet.

Diese Unschärferelation gilt nicht nur für Ort und Impuls eines Teilchens sondern auch für andere Grössen, wie z.B. Energie und Zeit oder die Komponenten des Bahndrehimpulses in drei Dimensionen, wie wir später kennen lernen werden.

Bevor wir uns der Einbettung der Unschärferelation in die Wellenmechanik zuwenden, betrachten wir als Illustration die Beugung einer Materiewelle am Spalt.

9.2.1 Beispiel: Beugung einer Materiewelle am Spalt

Im betrachteten Versuch (siehe Abb. 9.3) bewegt sich ein Teilchenstrom von links auf einen Spalt der Breite Δx zu. Der Spalt sei bei $z = 0$ positioniert.

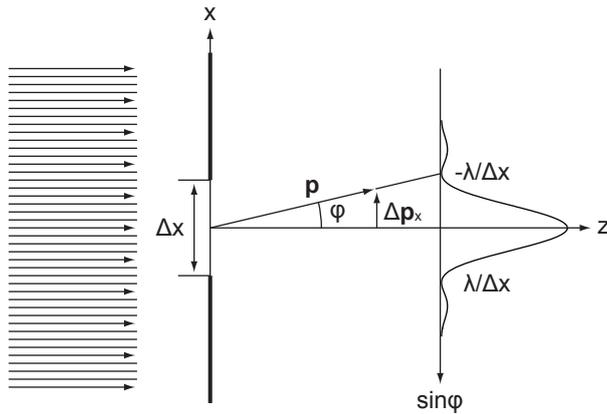


Abb. 9.3: Die Beugung einer Materiewelle am Spalt. Auf die einzelnen Bestandteile und Beschriftungen der Versuchsanordnung wird im Text eingegangen.

Vor dem Spalt, d.h. für $z < 0$, kennt man die x -Koordinate des Teilchens nicht, dafür ist die Impulskomponente p_x genau bekannt. Trifft nun dieser Teilchenstrahl auf den Spalt, so erfolgt eine Selektion der Teilchen. Die x -Koordinate ist dann bis auf die Unschärfe Δx bekannt. Jedoch gibt es durch die Beugung am Spalt Teilchen, die unter einem nicht verschwindenden Winkel φ auslaufen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich aus der Beugung der Materiewelle (de Broglie-Welle). Die meisten Teilchen treffen in den Winkelbereich

$$-\frac{\lambda}{\Delta x} < \sin \varphi < \frac{\lambda}{\Delta x}. \quad (9.22)$$

Damit kann die in Abb. 9.3 eingezeichnete Grösse Δp_x als Unschärfe der Impulskomponente p_x aufgefasst werden. Es gilt dabei der folgende Zusammenhang

$$\frac{\Delta p_x}{p} = \frac{\lambda}{\Delta x}. \quad (9.23)$$

Mit der de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$ erhalten wir

$$\Delta p_x \Delta x = h. \quad (9.24)$$

Berücksichtigt man die Tatsache, dass einige Teilchen auch in die Nebenmaxima fallen, so wird aus der Gleichung eine Ungleichung

$$\Delta p_x \Delta x \geq h. \quad (9.25)$$

Diese Ungleichung besagt, dass die Ortskoordinate x und die Impulskomponente p_x gleichzeitig nicht beliebig genau bestimmbar sind.

In diesem Abschnitt haben wir den Begriff der Unschärfe anhand eines Beispiels eingeführt. Nun wenden wir uns der formalen Berechnung der Unschärferelation eines Teilchens im Rahmen der Wellenmechanik zu.

9.2.2 Definition Unschärfe

Definition 9.4 Entsprechend den Gesetzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist die **Unschärfe** Δf einer Grösse f bestimmt durch die Standardabweichung, die

durch die Wurzel des Erwartungswerts der Quadrate der Abweichungen vom Erwartungswert gegeben ist

$$\Delta f = \sqrt{\langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}. \quad (9.26)$$

Wir wenden diese Definition 9.4 auf ein Teilchen an, dessen Zustand durch eine reelle Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben ist (für genaue Ausführungen der folgenden Berechnungen verweisen wir auf Anhang A). $\psi(x, t)$ ist so beschaffen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x, t)|^2$ des Teilchens einer Gauss-Verteilung entspricht

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/(2a^2)} \quad (9.27)$$

und somit ein Wellenpaket der charakteristischen Breite a formt. Diese Funktion ist normiert, d.h. es gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (9.28)$$

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ der Ortskoordinate erhalten wir

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t)^* x \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 x dx = 0, \quad (9.29)$$

d.h. $\psi(x, t)$ beschreibt ein Teilchen, das sich im Mittel bei $x = 0$ aufhält. Damit ergibt sich für die Unschärfe Δx der Ortskoordinate

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ &= \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t)^* x^2 \psi(x, t) dx} \\ &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 x^2 dx} \\ &= a. \end{aligned} \quad (9.30)$$

Δx entspricht also gerade der Breite der Gauss-Verteilung.

Um die Eigenschaften der Impulsverteilung des Teilchens zu bestimmen, berechnen wir die Wellenfunktion $\phi(p, t)$ in der Impulsraumdarstellung. Mit Hilfe der Fourier-Transformation (9.20) erhalten wir

$$\begin{aligned} \phi(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/(4a^2)} e^{-ipx/\hbar} dx, \end{aligned} \quad (9.31)$$

Die Ausführung der Integration liefert

$$\phi(p, t) = \left(\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{-a^2 p^2 / \hbar^2}. \quad (9.32)$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\phi(p, t)|^2$ im Impulsraum

$$|\phi(p, t)|^2 = \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} e^{-2a^2 p^2 / \hbar^2}. \quad (9.33)$$

Der Erwartungswert $\langle p \rangle$ nimmt den Wert

$$\langle p \rangle = 0 \quad (9.34)$$

an, d.h. das Teilchen hat einen verschwindenden mittleren Impuls. Gleichzeitig ergibt sich eine Impulsunschärfe Δp von

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2a}. \quad (9.35)$$

Mit (9.30) erhalten wir daraus für die Unschärferelation eines Gaußschen Wellenpakets

$$\Delta x \Delta p = \frac{1}{2} \hbar. \quad (9.36)$$

Das Gaußsche Wellenpaket erfüllt somit gerade die minimale Unschärferelation (siehe Abschnitt 9.2.3).

9.2.3 Formulierung nach Heisenberg

Nachdem wir zwei Beispiele zur Unschärferelation betrachtet haben, kommen wir zur Formulierung der Unschärferelation nach Heisenberg, wie sie 1927 aufgestellt wurde. Wir schreiben sie hier für die Ortskoordinate x und die Impulskomponente p_x

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (9.37)$$

Für die allgemeine Formulierung und die Herleitung sei auf Anhang B oder weiterführende Literatur [11] verwiesen.

Wir erwähnen hier noch eine weitere Form der Heisenbergschen Unschärferelation, die sogenannte *Energie-Zeit-Unschärferelation*. Es gilt

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (9.38)$$

Die Formulierung (9.38) sagt aus, dass die Energie E eines Systems, welches für die Zeitspanne Δt existiert, z.B. ein Atom dessen Lebensdauer im angeregten Zustand durch Δt gegeben ist, nur auf ΔE genau bestimmt ist. Diese Relation legt zum Beispiel die Breite von spektralen Linien eines atomaren Übergangs im Verhältnis zur Lebensdauer des angeregten Zustands des Atoms fest.

9.3 Operatoren

Operatoren spielen in der Quantenmechanik eine entscheidende Rolle. Denn jede physikalische Grösse f wird durch einen entsprechenden Operator \hat{f} dargestellt. Die Bedeutung von Operatoren im Rahmen der Quantenmechanik, besprechen wir in diesem Abschnitt.

9.3.1 Erwartungswerte von Ortskoordinate und Impuls

Der Erwartungswert des Impulses in der Ortsraumdarstellung

Wir beginnen mit einer Diskussion der Frage, wie sich der Erwartungswert des Impulses in der Ortsraumdarstellung berechnen lässt.

Wenn wir den Zustand des Teilchens durch die Wellenfunktion $\phi(p, t)$ im Impulsraum beschreiben, so lässt sich der Erwartungswert des Impulses $\langle p \rangle$ einfach als Mittelwert von p zur Wellenfunktion $\phi(p, t)$ berechnen

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) p \phi(p, t) dp. \quad (9.39)$$

Wenn der Zustand des Teilchens aber durch die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im Ortsraum beschrieben wird, so muss folgender Erwartungswert

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) p \psi(x, t) dx, \quad (9.40)$$

berechnet werden.

Hier stellt sich nun die Frage in welchem Zusammenhang der Impuls p des Teilchens mit der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ steht. Zur Lösung des Problems gehen wir von der Impulsraumdarstellung aus und gehen dann durch die Fourier-Transformation auf die Ortsraumdarstellung über. In einem ersten Schritt setzen wir für $\phi(p, t)$ in (9.39) die Fourier-Transformierte ein

$$\langle p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) p \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx dp. \quad (9.41)$$

Wir schreiben das Integral über x mittels partieller Integration um

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx = \underbrace{-\psi(x, t) \frac{\hbar}{ip} e^{-ipx/\hbar}}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \frac{\hbar}{ip} e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (9.42)$$

Der erste Summand verschwindet, da $\psi(x, t)$ quadratisch integrierbar (normierbar) ist und somit insbesondere im Unendlichen gegen null strebt. Einsetzen

in (9.41) und Umformen liefert

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} e^{-ipx/\hbar} dx dp \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) e^{-ipx/\hbar} dp}_{=\psi^*(x, t)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) dx.
 \end{aligned} \tag{9.43}$$

Wir kommen somit zu folgendem Schluss:

In der Ortsraumdarstellung, in der der Zustand eines Teilchens durch die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ beschrieben ist, wird der Erwartungswert des Impulses p berechnet, indem man in (9.40) den Impuls p durch den Impulsoperator

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \tag{9.44}$$

ersetzt.

Der Erwartungswert der Ortskoordinate in der Impulsraumdarstellung

Analog können wir nun auch den Erwartungswert der Ortskoordinate x in der Impulsraumdarstellung berechnen. Wir gehen hier entsprechend von der Ortsraumdarstellung aus und wechseln mittels Fourier-Transformation in die Impulsraumdarstellung

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} dp dx.
 \end{aligned} \tag{9.45}$$

Partielle Integration für das Integral über p liefert

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} dp = \underbrace{\phi(p, t) \frac{\hbar}{ix} e^{ipx/\hbar} \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial p} \frac{\hbar}{ix} e^{ipx/\hbar} dp. \tag{9.46}$$

Der erste Summand verschwindet, da auch $\phi(p, t)$ quadratisch integrierbar (normierbar) ist und somit insbesondere im Unendlichen gegen null strebt. Einsetzen in (9.45) und Umformen liefert

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) e^{ipx/\hbar} dx}_{=\phi^*(p, t)} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial p} dp \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p, t) dp.
 \end{aligned} \tag{9.47}$$

Wir fassen zusammen:

In der Impulsraumdarstellung, in der der Zustand eines Teilchens durch die Wellenfunktion $\phi(p, t)$ beschrieben ist, wird der Erwartungswert der Ortskoordinate x berechnet, indem man die Ortskoordinate x in

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) x \phi(p, t) dp \quad (9.48)$$

durch den Ortsoperator

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (9.49)$$

ersetzt.

In der Ortsraumdarstellung ist der Ortsoperator \hat{x} trivialerweise der Faktor x und in der Impulsraumdarstellung ist der Impulsoperator \hat{p} trivialerweise der Faktor p . In Tab. 9.1 sind die Berechnungen für die Erwartungswerte für die Ortskoordinate x und den Impuls p für die Orts- und Impulsraumdarstellung zusammengefasst. Es ist zu bemerken, dass die Operatoren jeweils auf die nachfolgende Funktion wirken und daher die Reihenfolge der Faktoren von entscheidender Bedeutung ist.

Der Erwartungswert von Potenzen der Ortskoordinate und des Impulses

Entsprechend zu den vorangegangenen Berechnungen in diesem Abschnitt können auch die Erwartungswerte von Potenzen der Ortskoordinate x und des Impulses p berechnet werden. Es ergibt sich für den Erwartungswert von Potenzen von p in der Ortsraumdarstellung

$$\langle p^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(x, t) dx \quad (9.50)$$

und entsprechend für den Erwartungswert von Potenzen von x in der Impulsraumdarstellung

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n} \phi(p, t) dp. \quad (9.51)$$

Ortsraumdarstellung	Impulsraumdarstellung
$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx$	$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p, t) dp$
$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) dx$	$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t) p \phi(p, t) dp$

Tab. 9.1: Berechnungen der Erwartungswerte für die Ortskoordinate x und den Impuls p in Orts- und Impulsraumdarstellung.

9.3.2 Weitere wichtige Operatoren in Ortsraumdarstellung

Bei der Betrachtung von weiteren Beispielen von Operatoren beschränken wir uns auf die Ortsraumdarstellung.

Der Ortsoperator in 3D

Wie wir im letzten Abschnitt gesehen haben, ist der Ortsoperator \hat{x} in Ortsraumdarstellung gleich dem Faktor x . Entsprechend gilt in drei Dimensionen für den Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$ die folgende einfache Darstellung

$$\hat{\vec{r}} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (9.52)$$

Der Impulsoperator in 3D

Beschreiben wir die Bewegung eines Teilchens im dreidimensionalen Raum in kartesischen Koordinaten, dann ist jeder Impulskomponente ein Operator zugeordnet. Nach (9.44) gilt für die Operatoren \hat{p}_x , \hat{p}_y und \hat{p}_z der Impulskomponenten

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (9.53)$$

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad (9.54)$$

$$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (9.55)$$

Dem Impulsvektor $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ist also ein Impulsoperator $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ zugeordnet. Wenn man ihn auf eine Wellenfunktion anwendet, so resultiert ein Vektor.

Die Erwartungswerte der Impulskomponenten p_x , p_y und p_z lassen sich berechnen durch

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z, t) dx dy dz, \quad (9.56)$$

$$\langle p_y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \psi(x, y, z, t) dx dy dz, \quad (9.57)$$

$$\langle p_z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi(x, y, z, t) dx dy dz. \quad (9.58)$$

Der Hamilton-Operator

Aus der klassischen Mechanik ist die Hamilton-Funktion H bekannt. Sie entspricht der Gesamtenergie E eines Systems ausgedrückt als Funktion der verallgemeinerten Koordinaten q_k und der dazu kanonisch konjugierten Impulse p_k . Der *Hamilton-Operator* \hat{H} ist die zugehörige quantenmechanische Grösse.

Wir betrachten als Beispiel die Bewegung eines Teilchens der Masse m mit den kartesischen Koordinaten x , y und z im Potential $V(x, y, z, t)$. Die konjugierten Impulse sind demzufolge die kartesischen Impulskomponenten p_x , p_y und

p_z . Wir beschränken uns hier auf eine nichtrelativistische Betrachtung. Klassisch gelten die folgenden Beziehungen

$$p_x = m\dot{x}, \quad (9.59)$$

$$p_y = m\dot{y}, \quad (9.60)$$

$$p_z = m\dot{z}. \quad (9.61)$$

Damit lässt sich die kinetische Energie E_{kin} schreiben als

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (9.62)$$

Die entsprechende Hamilton-Funktion H lautet somit

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z, t). \quad (9.63)$$

Den entsprechenden Hamilton-Operator \hat{H} in Ortsraumdarstellung erhalten wir, indem wir die Impulskomponenten p_x , p_y und p_z durch die entsprechenden Impulsoperatoren \hat{p}_x , \hat{p}_y und \hat{p}_z in Ortsraumdarstellung ersetzen. Mit (9.53), (9.54) und (9.55) ergibt sich somit für den Hamilton-Operator \hat{H}

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{=\Delta} + V(x, y, z, t), \quad (9.64)$$

wobei Δ den *Laplace-Operator* bezeichnet. Die potentielle Energie $V(x, y, z, t)$ ist kein Differentialoperator, da sie die Impulskomponenten nicht enthält. Sie wirkt als Faktor.

Der Erwartungswert der Hamilton-Funktion H ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z, t) \hat{H} \psi(x, y, z, t) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z, t) \right) \psi(x, y, z, t) dx dy dz. \end{aligned} \quad (9.65)$$

Der Bahndrehimpulsoperator

Der (klassische) Bahndrehimpulsvektor \vec{L} eines Teilchens bzgl. des Ursprungs ist definiert als

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}, \quad (9.66)$$

wobei \vec{r} den Ortsvektor und \vec{p} den Impulsvektor bezeichnen. Zum Bahndrehimpulsoperator gelangen wir nun, indem wir für jede Impulskomponente den

entsprechenden Operator einsetzen. Die Ortskoordinaten bleiben als Faktoren stehen, da wir in der Ortsraumdarstellung rechnen. Es gilt

$$\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}. \quad (9.67)$$

Beim Wasserstoffatom bewegt sich das Elektron im Zentralpotential des Kerns (siehe Kapitel 11). Es zeigt sich, dass diese Bewegung eines Teilchens im Zentralpotential einfachheitshalber in Kugelkoordinaten behandelt wird. Aus diesem Grund geben wir hier den Bahndrehimpulsoperator zusätzlich auch in Kugelkoordinaten an. Man erhält für den Bahndrehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$ in Kugelkoordinaten

$$\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}. \quad (9.68)$$

Wir beweisen die Richtigkeit dieses Ausdrucks indem wir auf die kartesischen Koordinaten zurückrechnen. Die Umrechnung zwischen kartesischen Koordinaten und Kugelkoordinaten lautet (siehe Abb. 9.4)

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad (9.69)$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad (9.70)$$

$$z = r \cos \vartheta. \quad (9.71)$$

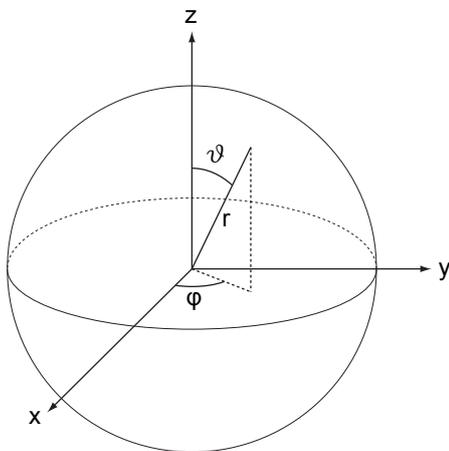


Abb. 9.4: Illustration des Zusammenhangs zwischen den kartesischen Koordinaten x, y, z und den Kugelkoordinaten r, φ, ϑ .

i) Für die Anwendung von \hat{L}_x auf $\psi = \psi(x, y, z, t)$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x \psi &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \vartheta} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} r \cos \vartheta \cos \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \cos \vartheta \sin \varphi - \frac{\partial \psi}{\partial z} r \sin \vartheta \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \vartheta \sin \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \vartheta \cos \varphi + 0 \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial y} \underbrace{(r \cos \vartheta \sin^2 \varphi + r \cos \vartheta \cos^2 \varphi)}_{=z} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \underbrace{r \sin \vartheta \sin \varphi}_{=y} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi. \tag{9.72}
\end{aligned}$$

ii) Für die y-Komponente des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}_y gilt

$$\begin{aligned}
\hat{L}_y \psi &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \vartheta} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} r \cos \vartheta \cos \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \cos \vartheta \sin \varphi - \frac{\partial \psi}{\partial z} r \sin \vartheta \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \vartheta \sin \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \vartheta \cos \varphi + 0 \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \underbrace{(r \cos \vartheta \cos^2 \varphi + r \cos \vartheta \sin^2 \varphi)}_{=z} - \frac{\partial \psi}{\partial z} \underbrace{r \sin \vartheta \cos \varphi}_{=x} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi. \tag{9.73}
\end{aligned}$$

iii) Für die z-Komponente des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}_z gilt

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_z \psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \underbrace{r \sin \vartheta \sin \varphi}_{=y} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \underbrace{r \sin \vartheta \cos \varphi}_{=x} \right) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi.
 \end{aligned} \tag{9.74}$$

Diese Ausdrücke stimmen mit (9.67) überein, womit die Richtigkeit von (9.68) bewiesen ist.

Bemerkung

Das Plancksche Wirkungsquantum \hbar hat die Dimension des Bahndrehimpulses. In der Quantenmechanik wird deshalb der Bahndrehimpuls oft in Einheiten von \hbar angegeben, sodass in den Formeln für den Bahndrehimpuls der Faktor \hbar entfällt.

9.3.3 Eigenschaften von Operatoren in der Quantenmechanik

Wir haben bisher an diversen Beispielen erörtert, wie eine physikalische Grösse f in der Quantenmechanik durch einen entsprechenden Operator \hat{f} dargestellt wird. In Tab. 9.2 sind die kennengelernten Operatoren in der Ortsraumdarstellung nochmals zusammengefasst. Wir definieren nun zum Abschluss dieses Abschnitts allgemein was man unter einem Operator in der Quantenmechanik versteht und gehen auf seine Eigenschaften ein.

Physikalische Grösse	klassisch	Operator
Ortsvektor	$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	$\hat{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$
Impulsvektor	$\vec{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$	$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$
Hamilton-Funktion	$H = E = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z)$
Bahndrehimpulsvektor	$\vec{L} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$	$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$

Tab. 9.2: Quantenmechanische Operatoren in der Ortsraumdarstellung zu verschiedenen physikalischen Grössen.

Definition 9.5 Ein **quantenmechanischer Operator** \hat{F} ist definiert durch die Bedingung, dass für eine Funktion $\psi(x, t) \in L^2$ gilt

$$\hat{F}\psi = \varphi(x, t) \in L^2. \quad (9.75)$$

Dabei bezeichnet L^2 den Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen (siehe Definition 9.1).

Quantenmechanische Operatoren besitzen folgende Eigenschaften:

1. Linearität

Eine erste Eigenschaft quantenmechanischer Operatoren ist die Linearität:

Definition 9.6 Sei \hat{F} ein Operator, so heißt \hat{F} **linear** falls gilt

$$\hat{F}(\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)) = \hat{F}\psi_1(x, t) + \hat{F}\psi_2(x, t), \quad (9.76)$$

$$\hat{F}(c\psi(x, t)) = c\hat{F}\psi(x, t) \text{ mit } c \in \mathbb{C}. \quad (9.77)$$

2. Distributivgesetz

Quantenmechanische Operatoren erfüllen zudem das Distributivgesetz.

Definition 9.7 Seien \hat{F} und \hat{G} zwei Operatoren, so lautet das **Distributivgesetz**

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi(x, t) = \hat{F}\psi(x, t) + \hat{G}\psi(x, t). \quad (9.78)$$

3. Assoziativgesetz

Quantenmechanische Operatoren erfüllen ebenfalls das Assoziativgesetz.

Definition 9.8 Seien \hat{F} und \hat{G} zwei Operatoren, so lautet das **Assoziativgesetz**

$$(\hat{F}\hat{G})\psi(x, t) = \hat{F}(\hat{G}\psi(x, t)). \quad (9.79)$$

4. Kommutativgesetz

Quantenmechanische Operatoren kommutieren im Allgemeinen **nicht**. Bevor wir die Definition des Kommutativgesetzes angeben, führen wir den Begriff des Kommutators ein.

Definition 9.9 Seien \hat{F} und \hat{G} zwei Operatoren, so ist der **Kommutator** $[\hat{F}, \hat{G}]$ definiert als

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}. \quad (9.80)$$

Mit Hilfe dieser Definition 9.9 formulieren wir das Kommutativgesetz.

Definition 9.10 Zwei Operatoren \hat{F} und \hat{G} **kommutieren** falls der entsprechende Kommutator verschwindet, d.h.

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0. \quad (9.81)$$

Ist der Kommutator ungleich null, so kommutieren die beiden Operatoren nicht.

Wir betrachten dazu einige Beispiele. Als erstes betrachten wir die zu den Funktionen xp_x und $p_x x$ gehörenden Operatoren $\hat{x}\hat{p}_x$ und $\hat{p}_x\hat{x}$ in der Ortsraumdarstellung. Anwendung auf $\psi = \psi(x, y, z, t)$ ergibt

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (9.82)$$

$$\hat{p}_x\hat{x}\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \frac{\hbar}{i} \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (9.83)$$

Damit folgt

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi = i\hbar\psi. \quad (9.84)$$

Diese Gleichung gilt unabhängig von der Wellenfunktion ψ , auf welche die Operatoren wirken. D.h. für den Kommutator der beiden Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x gilt

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (9.85)$$

In diesem Beispiel verschwindet der Kommutator nicht, d.h. die beiden Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x kommutieren nicht. Es sei bemerkt, dass die Operatorgleichung (9.85) ganz allgemein für kanonisch konjugierte Variablen gilt.

Im Gegensatz gibt es auch Operatoren, deren Kommutator verschwindet. Zum Beispiel gilt für die Anwendung der Operatoren \hat{x} und \hat{p}_y auf die Wellenfunktion $\psi = \psi(x, y, z, t)$ in der Ortsraumdarstellung

$$[\hat{x}, \hat{p}_y]\psi = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x})\psi = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}(x\psi) = 0. \quad (9.86)$$

Das Nichtverschwinden eines Kommutators hat (wie wir in Abschnitt 9.5.4 präzisieren und beweisen werden) folgende Bedeutung: Die Erwartungswerte nicht kommutierender Operatoren können nicht gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden.

Diese Eigenschaft ist, wie wir auch im Zusammenhang mit der Heisenbergschen Unschärferelation (siehe Abschnitt 9.2) gesehen haben, ein wichtiger Aspekt der Quantenmechanik. In der klassischen Physik beobachten wir dieses Phänomen nie: Klassische Messgrößen kommutieren immer und sind dementsprechend gleichzeitig beliebig genau bestimmbar. Es fällt jedoch auf, dass der Kommutator der Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x für $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet. In diesem Grenzfall können dann x und p_x beliebig genau bestimmt werden. In diesem Grenzfall strebt auch die de Broglie-Wellenlänge

$\lambda = h/p$ gegen null, so dass keine Beugungserscheinungen mehr auftreten. Insbesondere verschwindet auch die rechte Seite der Heisenbergschen Unschärferelation (9.37). Aus diesen Gründen kann die klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik für $\hbar \rightarrow 0$ betrachtet werden.

Am Beispiel der verschiedenen Komponenten des Bahndrehimpulses zeigt sich, dass nicht nur Operatoren, die kanonisch konjugierten Variablen entsprechen, nicht kommutieren. Für die Anwendung des Kommutators der Operatoren \hat{L}_x und \hat{L}_y auf die Wellenfunktion $\psi = \psi(x, y, z, t)$ erhält man

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}_x, \hat{L}_y]\psi &= \frac{\hbar^2}{i^2} \left(\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) \\
 &= \frac{\hbar^2}{i^2} \left(\left(yz \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial x} + y \frac{\partial \psi}{\partial x} - yx \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} + zx \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \left(zy \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + xz \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial y} + x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) \\
 &= \frac{\hbar^2}{i^2} \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \\
 &= i\hbar \hat{L}_z \psi. \tag{9.87}
 \end{aligned}$$

Analog ergibt sich

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \tag{9.88}$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y. \tag{9.89}$$

Dies bedeutet, dass es nicht möglich ist, dass zwei verschiedene Komponenten des Bahndrehimpulses gleichzeitig beliebig genau bestimmt werden können.

5. Reelle Erwartungswerte

Operatoren in der Quantenmechanik haben reelle Erwartungswerte, da physikalisch messbare Grössen, sogenannte *Observable*², reell sind. Beispiele für Observable sind Ortskoordinaten, Impuls, Bahndrehimpuls, Energie oder allgemein reelle Funktionen von Orts- und Impulskoordinaten.

Ein Operator \hat{F} , der einer Observablen $F(x, p)$ entspricht, muss demzufolge folgende Bedingung erfüllen

$$\langle F(x, p) \rangle = \langle F(x, p) \rangle^*, \tag{9.90}$$

d.h. der Erwartungswert muss gleich seinem konjugiert Komplexen sein. Für den Operator \hat{F} gilt daher

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) \hat{F}^* \psi^*(x, t) dx. \tag{9.91}$$

²In anderen Worten: Der Begriff Observable ist ein anderer Ausdruck für eine physikalische Messgrösse.

Operatoren, die diese Bedingung erfüllen, werden nach Charles Hermite *hermitesche oder selbstadjungierte Operatoren* genannt. Es ergibt sich also folgende Schlussfolgerung:

Jeder Observablen F entspricht ein hermitescher Operator \hat{F} .

Als Beispiel betrachten wir den Impulsoperator \hat{p}_x zur Observablen p_x und zeigen, dass \hat{p}_x hermitesch ist. Es gilt

$$\begin{aligned}
 \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{p}_x \psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\
 &\stackrel{\text{PI}}{=} \underbrace{\frac{\hbar}{i} \psi^*(x, t) \psi(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} dx \\
 &= \langle p_x \rangle^*, \tag{9.92}
 \end{aligned}$$

womit gezeigt ist, dass der Impulsoperator \hat{p}_x hermitesch ist. PI steht für partielle Integration.

6. Erzeugung eines hermiteschen Operators

Es stellt sich heraus, dass Operatoren zu Observablen nicht automatisch hermitesch sind. Als Beispiel betrachten wir dazu die Funktionen $F_1 = xp_x$ und $F_2 = p_x x$. Sie sind als Produkt aus Ortskoordinate und Impuls physikalisch deutbare Funktionen und demzufolge Observablen. Die Berechnung der Erwartungswerte $\langle xp_x \rangle$ und $\langle p_x x \rangle$ zeigt jedoch, dass weder der Operator $\hat{F}_1 = \hat{x} \hat{p}_x$ noch der Operator $\hat{F}_2 = \hat{p}_x \hat{x}$ hermitesch ist. Zudem erhält man für F_1 und F_2 unterschiedliche Erwartungswerte.

Es ist jedoch möglich, diese Operatoren zu „hermitisieren“. In unserem Beispiel ist die Hermitisierung relativ einfach: Der zu \hat{F}_1 und \hat{F}_2 gehörende hermitesche Operator lautet

$$\hat{F} = \frac{1}{2} (\hat{x} \hat{p}_x + \hat{p}_x \hat{x}). \tag{9.93}$$

Im Allgemeinen kann diese Aufgabe der Hermitisierung jedoch relativ kompliziert sein.

9.4 Das zweite Postulat: Die Schrödinger-Gleichung

Ist die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ eines Teilchens bekannt, so ist der Zustand des Teilchens vollständig charakterisiert. Insbesondere ist es möglich die Erwartungswerte beliebiger Observablen auszurechnen und somit das Verhalten des Teilchens in einem Experiment vorauszusagen. Es stellt sich nun die Frage: Wie bestimmt man die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ eines Teilchens?

Die Antwort auf diese Frage lieferte Schrödinger im Jahr 1926:

Postulat 2 Die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ ist eine Lösung der Differentialgleichung

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial\psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (9.94)$$

Diese Gleichung wird nach Schrödinger die **zeitabhängige Schrödinger-Gleichung** genannt.

Die Dynamik eines quantenmechanischen Systems wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung bestimmt. Die Schrödinger-Gleichung ist ein weiteres Postulat der Quantenmechanik und kann nicht hergeleitet oder bewiesen werden.

Für ein Teilchen der Masse m , das sich mit nichtrelativistischer Geschwindigkeit in einem Potential $V(x, y, z, t)$ bewegt, nimmt die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit (9.64) folgende Form an

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t)\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial\psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (9.95)$$

In der Quantenmechanik tritt die Schrödinger-Gleichung an die Stelle der Newtonschen Bewegungsgleichung der klassischen Mechanik. Wir verdeutlichen diesen Zusammenhang hier an einem Beispiel.

Ein Teilchen der Masse m bewege sich entlang der x -Achse in einem Potential $V(x)$. Die Newtonsche Bewegungsgleichung kann geschrieben werden in der Form

$$\frac{d}{dt}p = F = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (9.96)$$

Die Quantenmechanik erlaubt nur statistische Aussagen in Form von berechneten Erwartungswerten. Demzufolge würde die entsprechende Gleichung in der Quantenmechanik folgende Gestalt annehmen

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle. \quad (9.97)$$

Herleitung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x} dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial\psi^*(x, t)}{\partial t} \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x} + \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x} \right) dx \end{aligned} \quad (9.98)$$

Die Schrödinger-Gleichung und das konjugiert Komplexe der Schrödinger-Gleichung für unser Beispiel lauten

$$i\hbar \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t), \quad (9.99)$$

$$-i\hbar \frac{\partial\psi^*(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi^*(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi^*(x, t). \quad (9.100)$$

Einsetzen in (9.98) liefert

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi^*(x, t) \right) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\
 &+ \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - V(x) \psi(x, t) \right) dx \\
 &\stackrel{\text{PI}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} V(x) \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\
 &- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} (V(x) \psi(x, t)) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} V(x) \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) V(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\
 &- \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial V(x)}{\partial x} \psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(-\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx \\
 &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle. \tag{9.101}
 \end{aligned}$$

Stationäre Lösungen

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m , das sich mit nichtrelativistischer Geschwindigkeit in einem Potential $V(x, y, z, t)$ bewegt.

Definition 9.11 Ein Zustand, der dadurch gekennzeichnet ist, dass die Wahrscheinlichkeit $\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ das Teilchen zwischen x und $x + dx$ anzutreffen nicht von der Zeit t abhängt, heisst **stationärer Zustand**.

Ein Beispiel dafür ist die bereits mehrfach erwähnte ebene, harmonische Materiewelle

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px - Et)/\hbar}. \tag{9.102}$$

Allgemein hat ein stationärer Zustand die Form

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}. \tag{9.103}$$

In drei Dimensionen gilt

$$\psi(x, y, z, t) = u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}. \tag{9.104}$$

E ist die totale Energie des Teilchens, welche bei nichtrelativistischer Behandlung die Summe aus kinetischer und potentieller Energie ist

$$E = E_{\text{kin}} + V(x, y, z, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z, t). \tag{9.105}$$

Wir setzen nun den Ansatz (9.104) in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (9.94) ein, um herauszufinden, unter welchen Bedingungen sie eine Lösung ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\left(u(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}\right) + V(x,y,z,t)u(x,y,z)e^{-iEt/\hbar} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(u(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}\right). \quad (9.106)$$

$u(x,y,z)$ ist eine Funktion der Ortskoordinaten allein, sodass

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(x,y,z) + V(x,y,z,t)u(x,y,z)\right)e^{-iEt/\hbar} = u(x,y,z)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.107)$$

Wenn sich das Teilchen in einem zeitunabhängigen Potential $V(x,y,z)$ bewegt und somit die Gesamtenergie E konstant ist ($\partial E/\partial t = 0$) gilt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(x,y,z) + V(x,y,z)u(x,y,z) = Eu(x,y,z). \quad (9.108)$$

Diese Gleichung bestimmt die zeitunabhängige Funktion $u(x,y,z)$.

Ein Teilchen ist also in einem stationären Zustand, wenn seine Bewegung in einem zeitlich konstanten Potential $V(x,y,z)$ stattfindet. Für die Funktion $u(x,y,z)$ gilt dann die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(x,y,z) + V(x,y,z)u(x,y,z) = Eu(x,y,z). \quad (9.109)$$

9.4.1 Eigenschaften der Lösungen

Lösungen der Schrödinger-Gleichung in einer Dimension besitzen folgende Eigenschaften (gelten auch in drei Dimensionen):

1. Normierbarkeit

Bei physikalischen Problemen müssen die Lösungen $\psi(x,t)$ normierbar sein

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx < \infty. \quad (9.110)$$

Da die Schrödinger-Gleichung linear und homogen ist, darf man eine Lösung mit einem Normierungsfaktor multiplizieren. In Übereinstimmung mit (9.2) wählen wir den Normierungsfaktor jeweils so, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = 1. \quad (9.111)$$

Im Fall stationärer Zustände ist $\psi(x,t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}$, so dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)u(x)dx = 1. \quad (9.112)$$

2. Verhalten im Unendlichen

Aus der Normierungsbedingung folgt, dass $\psi(x, t)$ und $u(x)$ mit $x \rightarrow \pm\infty$ genügend rasch gegen null streben müssen. Dasselbe gilt auch für die Ableitungen nach x .

3. Stetigkeit und Eindeutigkeit

$\psi(x, t)$ und $\partial\psi(x, t)/\partial x$ müssen für alle x stetig, eindeutig und endlich sein. Dasselbe gilt auch für $u(x)$ und $\partial u(x)/\partial x$.

Diese Eigenschaften garantieren zum Beispiel, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und der Impuls eines Teilchens kontinuierlich mit den Koordinaten variieren.

4. Superpositionsprinzip

Da die Schrödinger-Gleichung linear und homogen ist, ist eine beliebige Linearkombination von Lösungen ebenfalls eine Lösung. D.h. sind zum Beispiel ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so ist $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$ ebenfalls eine Lösung.

Ausnahmefälle

Es kommt vor, dass idealisierte Beispiele und Grenzfälle einige dieser Eigenschaften nicht erfüllen. Wir geben hier zwei bekannte Beispiele an:

- Die ebene harmonische Materiewelle $\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}$ erfüllt die Normierungsbedingung und das geforderte Verhalten im Unendlichen nicht. Dies entspricht dem Grenzfall, bei dem Teilchen vollständig im Raum delokalisiert sind, ihre Position also völlig unbestimmt ist.
- Lösungen für physikalisch unrealistische Randbedingungen wie z.B. für das Teilchen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden (siehe Abschnitt 9.1.1) erfüllen die Stetigkeitsbedingungen nicht. In jeder physikalisch realistischen Situation, z.B. wenn ein Elektron durch endlich grosse elektrische Felder in einem Quantenpunkt lokalisiert ist, hat ein Potentialtopf eine endliche Höhe.

9.4.2 Beispiele von Lösungen der Schrödinger-Gleichung

Wir berechnen nun Lösungen der Schrödinger-Gleichung für einige grundlegende physikalische Probleme.

Bewegung im zeitlich und räumlich konstanten Potential

Wir betrachten ein nichtrelativistisches Teilchen, das sich längs der x-Achse bewegen kann und dessen potentielle Energie V_0 räumlich und zeitlich konstant ist. Nach der klassischen Mechanik bewegt sich das Teilchen dann mit einem beliebigen, konstanten Impuls von links nach rechts oder von rechts nach links oder es bleibt irgendwo in Ruhe. Wir wollen nun herausfinden wie ein solches Problem quantenmechanisch gelöst wird.

Da das Potential V_0 zeitunabhängig ist, kommt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (9.109) zur Anwendung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + V_0 u(x) = E u(x). \quad (9.113)$$

Wir wählen den folgenden Ansatz

$$u(x) = e^{ikx}. \quad (9.114)$$

Einsetzen in (9.113) liefert

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V_0 = E. \quad (9.115)$$

Daraus ergibt sich

$$k_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}. \quad (9.116)$$

Somit nimmt die Funktion $u(x)$ folgende Form an

$$u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}. \quad (9.117)$$

Die vollständige Wellenfunktion $\psi(x, t)$ lautet

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-iEt/\hbar} = \left(A e^{ikx} + B e^{-ikx} \right) e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.118)$$

Mit $E = \hbar\omega$ und $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ ist $\psi(x, t)$ die Superposition einer links- mit einer rechtslaufenden harmonischen Welle

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{i(-kx - \omega t)}. \quad (9.119)$$

Nach de Broglie gilt $k = p/\hbar = mv/\hbar$ und mit $E_{\text{kin}} = mv^2/2$ gilt $k = \sqrt{2mE_{\text{kin}}}/\hbar$. Der Vergleich mit (9.116) führt auf $E_{\text{kin}} = E - V_0$, was bestätigt, dass E der Gesamtenergie des Teilchens entspricht. Für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ eines Teilchens mit konstantem längs der positiven x-Achse gerichteten Impuls p gilt dementsprechend

$$\psi(x, t) = A e^{i(px - Et)/\hbar}. \quad (9.120)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ nimmt dabei den konstanten Wert A^2 an. Demzufolge ist diese Wellenfunktion nicht normierbar. In diesem Fall kann die Konstante A so gewählt werden, dass sie die konstante Dichte der Teilchen entlang der x -Koordinate angibt.

Teilchen im Potentialtopf

Wir lösen nun das in Abschnitt 9.1.1 besprochene physikalische Problem eines Teilchens in einem Potentialtopf mit der Schrödinger-Gleichung. D.h. wir betrachten ein Teilchen der Masse m , das sich längs der x -Achse bewegt, jedoch zwischen den Koordinaten 0 und L lokalisiert ist. Das Potential $V(x)$ hat dementsprechend die Form (siehe Abb. 9.1)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.121)$$

Da das Potential zeitunabhängig ist, gilt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x). \quad (9.122)$$

Für $x < 0$ und $x > L$ ist wegen $V(x) = \infty$ $u(x) = 0$. Für $0 \leq x \leq L$ nimmt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung folgende Form an

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) = Eu(x). \quad (9.123)$$

Wir wählen wieder den Ansatz

$$u(x) = e^{ikx}. \quad (9.124)$$

Einsetzen in 9.123 liefert

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = E. \quad (9.125)$$

Daraus ergibt sich

$$k_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (9.126)$$

Somit nimmt die Funktion $u(x)$ folgende Form an

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (9.127)$$

wobei A und B die Amplituden der rechts bzw. links laufenden Wellen beschreiben. Die Berücksichtigung der Randbedingungen führt analog zu den Ausführungen in Abschnitt 9.1.1 auf die folgende Lösung³

$$\psi_n(x, t) = u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (9.128)$$

³Der Faktor i ist ein nichtrelevanter Phasenfaktor und wurde deshalb gegenüber der Formulierung (9.14) vernachlässigt.

wobei die (diskreten) Energiewerte E_n gegeben sind durch

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (9.129)$$

Die Wellenfunktionen (9.128) erfüllen nicht alle Bedingungen, die man an eine Lösung der Schrödinger-Gleichung stellt, denn die Ableitung der Wellenfunktion nach x bei $x = 0$ und $x = L$ ist unstetig. Dies ist eine Folge davon, dass das betrachtete Potential zu unphysikalischen Randbedingungen führt. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, tritt diese Schwierigkeit beim Potentialtopf mit endlicher tiefe V_0 nicht auf. Trotzdem sind die Wellenfunktionen (9.128) durchaus sinnvoll, wenn man sie als Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ betrachtet.

Teilchen im endlichen Potentialtopf

Wir kommen nun vom Spezialfall $V_0 = \infty$ zum allgemeinen Fall $V_0 \neq \infty$. Wir betrachten ein Teilchen mit Masse m , das sich in einem zeitlich konstanten Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ V_0, & |x| \geq a, \end{cases} \quad (9.130)$$

welches die Gestalt eines symmetrischen Topfes der Tiefe V_0 hat (siehe Abb. 9.5), bewegt. Die Gesamtenergie des Teilchens sei E .

Wir betrachten zuerst die *klassischen* Erwartungen und unterscheiden dabei die Fälle $E < V_0$ und $E > V_0$:

1. $E < V_0$: Da die kinetische Energie positiv sein muss, kann sich das Teilchen nur innerhalb des Topfes aufhalten. Es bewegt sich zwischen den Umkehrpunkten $\pm a$ hin und her.
2. $E > V_0$: Das Teilchen kann den Topf durchqueren und sich auch ausserhalb desselben aufhalten.

Wir kommen nun zur **quantenmechanischen** Behandlung für den Fall dass $E < V_0$, d.h. wenn das Teilchen im Potentialtopf lokalisiert ist. Wir unterteilen die x -Achse in drei Bereiche I, II und III (siehe Abb. 9.5) für die wir die zeitunabhängige (Potential ist zeitunabhängig) Schrödinger-Gleichung separat lösen.

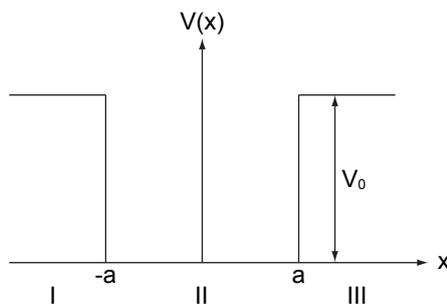


Abb. 9.5: Das Potential $V(x)$ in Abhängigkeit von x für ein Teilchen im endlichen Potentialtopf. Die x -Achse wird für die Berechnungen in drei Teilgebiete I, II und III unterteilt.

- In der Region I nimmt das Potential den Wert V_0 an und daher lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{I}}(x) + V_0 u_{\text{I}}(x) = E u_{\text{I}}(x). \quad (9.131)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$u_{\text{I}}(x) = A_1 e^{k'x} + A'_1 e^{-k'x} \text{ mit } k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (9.132)$$

Da die Lösung für $x \rightarrow -\infty$ endlich sein muss gilt $A'_1 = 0$ und wir erhalten

$$u_{\text{I}}(x) = A_1 e^{k'x} \text{ mit } k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (9.133)$$

- In der Region II verschwindet das Potential und daher lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{II}}(x) = E u_{\text{II}}(x). \quad (9.134)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$u_{\text{II}}(x) = A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (9.135)$$

- Analog zu Region I ergibt sich für die Region III die Lösung

$$u_{\text{III}}(x) = A'_3 e^{-k'x} \text{ mit } k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (9.136)$$

Aus den Stetigkeitsbedingungen für die Wellenfunktion und deren Ableitung nach x an den Stellen $x = \pm a$ ergeben sich die folgenden Gleichungen zur Bestimmung der Amplituden und Energiewerte

$$u_{\text{I}}(-a) = u_{\text{II}}(-a) \rightarrow A_1 e^{-k'a} = A_2 e^{-ika} + A'_2 e^{ika}, \quad (9.137)$$

$$\frac{\partial u_{\text{I}}(-a)}{\partial x} = \frac{\partial u_{\text{II}}(-a)}{\partial x} \rightarrow k' A_1 e^{-k'a} = ik A_2 e^{-ika} - ik A'_2 e^{ika}, \quad (9.138)$$

$$u_{\text{II}}(a) = u_{\text{III}}(a) \rightarrow A_2 e^{ika} + A'_2 e^{-ika} = A'_3 e^{-k'a}, \quad (9.139)$$

$$\frac{\partial u_{\text{II}}(a)}{\partial x} = \frac{\partial u_{\text{III}}(a)}{\partial x} \rightarrow ik A_2 e^{ika} - ik A'_2 e^{-ika} = -k' A'_3 e^{-k'a}. \quad (9.140)$$

In Matrixschreibweise lautet dieses Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} e^{-k'a} & 0 & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ k' e^{-k'a} & 0 & -ik e^{-ika} & ik e^{ika} \\ 0 & e^{-k'a} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ 0 & k' e^{-k'a} & ik e^{ika} & -ik e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A'_3 \\ A_2 \\ A'_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (9.141)$$

Elementare Zeilenumformungen für lineare Gleichungssysteme liefern

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-k'a} & 0 & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ 0 & e^{-k'a} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ 0 & 0 & (k' - ik)e^{-ika} & (k' + ik)e^{ika} \\ 0 & 0 & (k' + ik)e^{ika} & (k' - ik)e^{-ika} \end{pmatrix}}_{=M} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_3 \\ A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = 0. \quad (9.142)$$

Nichttriviale Lösungen ergeben sich für $\det(M) = 0$. Daraus ergibt sich

$$\frac{(k' - ik)^2}{(k' + ik)^2} = e^{4ika}. \quad (9.143)$$

Wir unterscheiden hier **zwei Fälle**

$$\frac{k' - ik}{k' + ik} = e^{2ika}, \quad (9.144)$$

$$\frac{k' - ik}{k' + ik} = -e^{2ika}, \quad (9.145)$$

die symmetrischen ($u(x) = u(-x)$) und antisymmetrischen ($u(x) = -u(-x)$) Wellenfunktionen entsprechen. Wir berechnen separat die Amplituden der Wellenfunktionen in den drei Regionen und die sich daraus ergebenden möglichen Energiewerte.

1. Antisymmetrischer Fall

Wir setzen $A_2' \equiv C$ und bestimmen mit (9.142) schrittweise die weiteren Amplituden. Für A_2 erhalten wir mit (9.144)

$$A_2 = -C \frac{k' + ik}{k' - ik} e^{2ika} = -C. \quad (9.146)$$

Wir erhalten also für den ersten Fall für den Bereich II antisymmetrische Wellenfunktionen. Daher nennen wir diesen Fall *antisymmetrisch*. Für A_3 und A_1 ergibt sich

$$A_3' = \frac{A_2 e^{ika} + A_2' e^{-ika}}{e^{-k'a}} = -C \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{e^{-k'a}} = -2iC \sin(ka) e^{k'a}, \quad (9.147)$$

$$A_1 = -A_3' = 2iC \sin(ka) e^{k'a}. \quad (9.148)$$

Die Wellenfunktionen für die drei Bereiche I, II und III nehmen dementsprechend die folgende Form an

$$u_{\text{I}}(x) = 2iC \sin(ka) e^{k'(a+x)}, \quad (9.149)$$

$$u_{\text{II}}(x) = -C e^{ikx} + C e^{-ikx} = -2iC \sin(kx), \quad (9.150)$$

$$u_{\text{III}}(x) = -2iC \sin(ka) e^{k'(a-x)}. \quad (9.151)$$

Die verbleibende Unbekannte C erhalten wir aus der Normierungsbedingung. Es gilt

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{-a} |u_{\text{I}}(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |u_{\text{II}}(x)|^2 dx + \int_a^{\infty} |u_{\text{III}}(x)|^2 dx \\
 &= \int_{-\infty}^{-a} 4C^2 \sin^2(ka) e^{2k'(a+x)} dx + \int_{-a}^a 4C^2 \sin^2(kx) dx \\
 &\quad + \int_a^{\infty} 4C^2 \sin^2(ka) e^{2k'(a-x)} dx \\
 &= \frac{4C^2 \sin^2(ka)}{2k'} + \frac{4C^2}{k} (ka - \sin(ka) \cos(ka)) + \frac{4C^2 \sin^2(ka)}{2k'} \\
 &= 4C^2 \left(\frac{\sin^2(ka)}{k'} + \frac{ka - \sin(ka) \cos(ka)}{k} \right). \tag{9.152}
 \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich für die Konstante C

$$C = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2(ka)}{k'} + \frac{ka - \sin(ka) \cos(ka)}{k} \right)^{-1/2}. \tag{9.153}$$

Damit ist die Wellenfunktion für das Teilchen im endlichen Potentialtopf im antisymmetrischen Fall bestimmt.

Es bleibt noch die Frage zu klären, welche Energiewerte für das Teilchen erlaubt sind. Wir formen dazu die Gleichung (9.144) um, sodass wir eine transzendente Gleichung erhalten, die wir graphisch lösen können. In einem ersten Schritt ersetzen wir k und k' in (9.144) durch die Ausdrücke in (9.133) und (9.135). Wir erhalten somit

$$\begin{aligned}
 e^{2i\sqrt{2mE}a/\hbar} &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)} - i\sqrt{2mE}}{\sqrt{2m(V_0 - E)} + i\sqrt{2mE}} \\
 &= \frac{\left(\sqrt{2m(V_0 - E)} - i\sqrt{2mE} \right)^2}{2mV_0} \\
 &= 1 - \frac{2E}{V_0} - i \frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \tag{9.154}
 \end{aligned}$$

Wir schreiben nun auch die linke Seite der Gleichung als Summe von Real- und Imaginärteil

$$\cos(2\sqrt{2mE}a/\hbar) + i \sin(2\sqrt{2mE}a/\hbar) = 1 - \frac{2E}{V_0} - i \frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \tag{9.155}$$

Gleichsetzen der Real- bzw. Imaginärteile ergibt folgendes Gleichungssystem

$$\cos(2\sqrt{2mE}a/\hbar) = 1 - \frac{2E}{V_0}, \tag{9.156}$$

$$\sin(2\sqrt{2mE}a/\hbar) = - \frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \tag{9.157}$$

Wir benützen die Additionstheoreme $\cos(2x) = 1 - 2\sin^2 x$ und $\sin(2x) = 2\sin x \cos x$ und erhalten

$$2\sin^2(\sqrt{2mEa}/\hbar) = \frac{2E}{V_0}, \quad (9.158)$$

$$2\sin(\sqrt{2mEa}/\hbar)\cos(\sqrt{2mEa}/\hbar) = -\frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \quad (9.159)$$

Division von (9.159) durch (9.158) ergibt

$$-\cot(\sqrt{2mEa}/\hbar) = \frac{\sqrt{E(V_0 - E)}}{E}. \quad (9.160)$$

Wir führen nun die Konstante $\xi \equiv \sqrt{2mV_0a}/\hbar$ ein. Damit ergibt sich das folgende Resultat (siehe Gl. (9.135))

$$-\cot(ka) = \frac{\sqrt{\xi^2 - (ka)^2}}{ka} \quad \text{mit } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (9.161)$$

Dies ist die zu Beginn erwähnte transzendente Gleichung, die wir nun graphisch lösen. Dazu setzen wir $z \equiv ka$ und tragen die Funktionen $f_1^a(z) = -\cot z$ und $f_2^a(z) = \sqrt{\xi^2 - z^2}/z$ auf (siehe Abb. 9.6). Die erlaubten Werte von z ergeben sich aus den Schnittpunkten dieser beiden Kurven. Die Anzahl antisymmetrischer Lösungen n_a hängt von ξ ab. Dabei gilt folgende Gesetzmässigkeit: Wenn

$$\frac{\pi}{2}(2n_a - 1) < \xi < \frac{\pi}{2}(2n_a + 1), \quad (9.162)$$

dann besitzt (9.161) genau n_a Lösungen. Insbesondere wird daraus ersichtlich, dass antisymmetrische Lösungen nur dann existieren, wenn $\xi > \pi/2$, d.h. wenn gilt

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}. \quad (9.163)$$

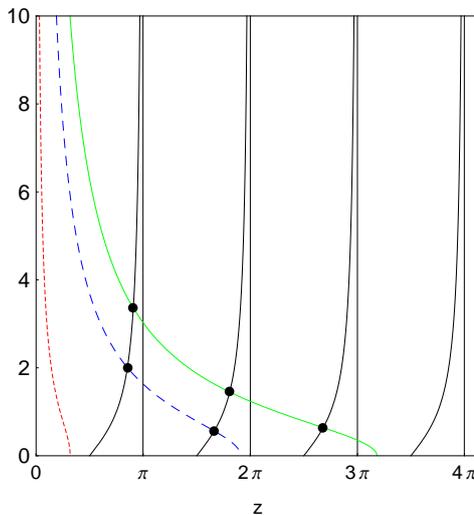


Abb. 9.6: Graphische Lösung der transzendenten Gleichung (9.161) für verschiedene Werte von ξ . Die Funktion $f_1^a(z)$ entspricht der schwarzen durchgezogenen Linie, die Funktion $f_2^a(z)$ ist durch die rot gestrichelte (ξ_1), blau gestrichelte (ξ_2) und grün durchgezogene Linie (ξ_3) dargestellt, wobei $\xi_1 < \xi_2 < \xi_3$.

Das Potential V_0 muss also einen minimalen Wert aufweisen. Die z entsprechenden Energiewerte E ergeben sich aus (siehe Gl. (9.135))

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{z^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (9.164)$$

2. Symmetrischer Fall

Da der symmetrische Fall analog zum antisymmetrischen Fall gelöst wird, werden wir uns im Wesentlichen auf die Angabe der Resultate beschränken. Wir setzen wiederum $A'_2 \equiv C$ und bestimmen mit (9.142) schrittweise die weiteren Amplituden. Für A_2 erhalten wir mit (9.145)

$$A_2 = C. \quad (9.165)$$

Wir erhalten also für den Bereich II symmetrische Wellenfunktionen. Daher nennen wir diesen Fall *symmetrisch*. Für A'_3 und A_1 ergibt sich

$$A'_3 = 2C \cos(ka) e^{k'a}, \quad (9.166)$$

$$A_1 = -2C \cos(ka) e^{k'a}. \quad (9.167)$$

Die Wellenfunktionen für die drei Bereiche I, II und III nehmen dementsprechend die folgende Form an

$$u_{\text{I}}(x) = -2C \cos(ka) e^{k'a} e^{k'(a+x)}, \quad (9.168)$$

$$u_{\text{II}}(x) = 2C \cos(kx), \quad (9.169)$$

$$u_{\text{III}}(x) = 2C \cos(ka) e^{k'(a-x)}. \quad (9.170)$$

Die verbleibende Unbekannte C erhalten wir aus der Normierungsbedingung. Analog zu den Berechnungen beim antisymmetrischen Fall ergibt sich für die Konstante C

$$C = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2(ka)}{k'} + \frac{ka + \sin(ka) \cos(ka)}{k} \right)^{-1/2}. \quad (9.171)$$

Damit ist die Wellenfunktion für das Teilchen im endlichen Potentialtopf auch im symmetrischen Fall bestimmt. Ebenfalls ergibt sich auf analoge Weise eine transzendente Gleichung zur Bestimmung der Energiewerte

$$\tan(ka) = \frac{\sqrt{\xi^2 - (ka)^2}}{ka} \quad \text{mit } \xi \equiv \sqrt{2mV_0}a/\hbar \quad \text{und } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (9.172)$$

Für die graphische Lösung setzen wir wiederum $z \equiv ka$ und tragen die Funktionen $f_1^s(z) = \tan z$ und $f_2^s(z) = \sqrt{\xi^2 - z^2}/z$ auf (siehe Abb. 9.7).

Die erlaubten Werte von z ergeben sich aus den Schnittpunkten dieser beiden Kurven. Die Anzahl symmetrischer Lösungen n_s ist gegeben durch

$$n_s = \left[\frac{\xi}{\pi} \right], \quad (9.173)$$

wobei [...] auf die nächsthöhere ganze Zahl rundet. Somit existiert für $\xi > 0$ im Gegensatz zum antisymmetrischen Fall auf jeden Fall mindestens eine Lösung. Die z entsprechenden Energiewerte E ergeben sich wiederum aus (9.164).

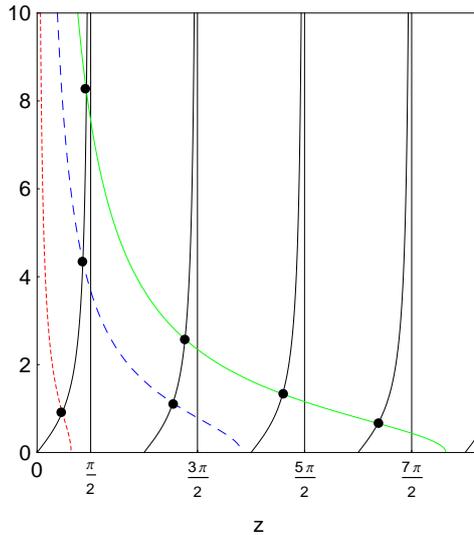


Abb. 9.7: Graphische Lösung der transzendenten Gleichung (9.172) für verschiedene Werte von ξ . Die Funktion $f_1^s(z)$ entspricht der schwarzen durchgezogenen Linie, die Funktion $f_2^s(z)$ ist durch die rot gepunktete (ξ_1), blau gestrichelte (ξ_2) und grün durchgezogene Linie (ξ_3) dargestellt, wobei $\xi_1 < \xi_2 < \xi_3$.

Zum Abschluss formulieren wir einige **Schlussfolgerungen** und zusammenfassende Bemerkungen:

- Fassen wir die beiden Fälle zusammen, so ergeben sich für ein festes Potential V_0 und damit für ein festes ξ

$$\left\lfloor \frac{2\xi}{\pi} \right\rfloor + 1 \quad (9.174)$$

diskrete Zustände, die das Teilchen besetzen kann. [...] rundet auf die nächstkleinere ganze Zahl ab. Zum Beispiel ergeben sich für ein Potential mit $\xi = 5$: 4 Zustände, 2 antisymmetrische und 2 symmetrische.

- Die symmetrischen und antisymmetrischen Zustände wechseln einander mit wachsender Energie und Knotenzahl⁴ ab. Die Knotenzahl im symmetrischen Grundzustand ist null und steigt bei jedem höheren Zustand um eins. Sie bietet daher eine Möglichkeit, die Zustände zu nummerieren.
- In Abb. 9.8 ist eine numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktionen für die Knotenzahlen k von 0 bis 4 dargestellt.
- Im Vergleich zu den zu Beginn aufgeführten klassischen Betrachtungen ergibt sich folgender wichtige Unterschied: Auch bei $E < V_0$ besteht eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit das Teilchen ausserhalb des Topfes (in den Gebieten I und III) anzutreffen.

Der Tunneleffekt

Wir betrachten ein Teilchen mit kinetischer Energie E , welches auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 > E$ und der Breite L trifft (siehe Abb. 9.9). Nach den

⁴Die Knotenzahl entspricht der Anzahl Nullstellen der Wellenfunktion

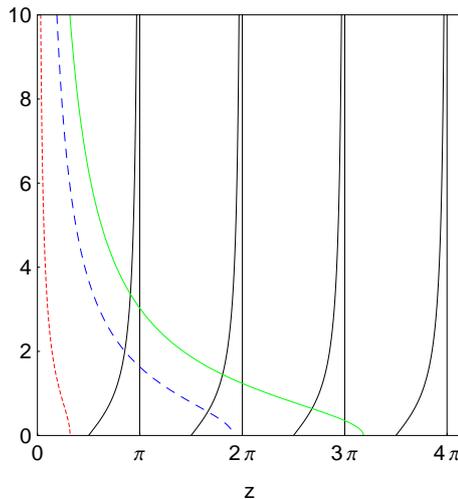


Abb. 9.8: Numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktionen für die Knotenzahlen k von 0 bis 4.

Regeln der klassischen Physik kann das Teilchen die Barriere nicht überwinden. Quantenmechanisch kann ein Teilchen jedoch eine Potentialbarriere durchdringen und sich auf der anderen Seite der Barriere weiter fortbewegen. Auf diesen quantenmechanischen Effekt, den sogenannten *Tunneleffekt*, gehen wir in diesem Abschnitt genauer ein.

Der Tunneleffekt wurde in zahlreichen Experimenten verifiziert, z.B. beim radioaktiven Zerfall oder in elektronischen Tunneldioden. Der Tunneleffekt wird z.B. im Rastertunnelmikroskop (siehe Abschnitt 7.2.3), welches zur Abbildung der Oberfläche verwendet werden kann, auch technisch angewandt. Dessen Funktionsweise beruht darauf, dass es für Elektronen möglich ist die Potentialbarriere zwischen der abtastenden Spitze und der zu untersuchenden Oberfläche einer Probe zu überwinden.

Das Ziel der folgenden Rechnung ist es, die sogenannte *Transmissionswahrscheinlichkeit*, auch *Transmissionskoeffizient* genannt, eines Teilchens durch eine Potentialbarriere zu bestimmen. Die Definition lautet folgendermassen:

Definition 9.12 Die *Transmissionswahrscheinlichkeit* T ist definiert als der transmittierte Teilchenfluss S_{trans} geteilt durch den einfallenden Teilchenfluss S_{ein} und ist damit ein Mass für die Stärke des Tunneleffekts

$$T = \frac{S_{\text{trans}}}{S_{\text{ein}}}. \tag{9.175}$$

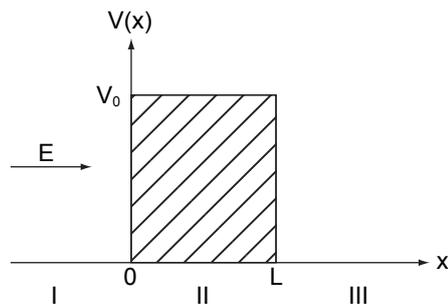


Abb. 9.9: Ein Teilchen mit kinetischer Energie E trifft auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 > E$ und der Breite L .

Der Teilchenfluss S ist dabei gegeben durch

$$S = |u(x)|^2 v, \quad (9.176)$$

d.h. als Produkt von Wahrscheinlichkeitsdichte $|u(x)|^2$ und Teilchengeschwindigkeit v .

Wir beginnen unsere Berechnung, indem wir die x -Achse in drei Bereiche I, II und III unterteilen (siehe Abb. 9.9), für die wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (Potential ist zeitunabhängig) separat lösen

$$\text{I:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{I}}(x) = E u_{\text{I}}(x), \quad (9.177)$$

$$\text{II:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{II}}(x) + V_0 u_{\text{II}}(x) = E u_{\text{II}}(x), \quad (9.178)$$

$$\text{III:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{III}}(x) = E u_{\text{III}}(x). \quad (9.179)$$

Die Lösung für die drei Bereiche lassen sich analog zu den vorangegangenen Beispielen mit Hilfe eines Exponentialansatzes bestimmen. Wir verzichten daher auf eine Herleitung und geben direkt die Lösungen für die Wellenfunktionen u_{I} , u_{II} und u_{III} in den drei Bereichen an

$$\text{I:} \quad u_{\text{I}}(x) = \underbrace{A e^{ik_{\text{I}}x}}_{\substack{\text{einfallende} \\ \text{Welle}}} + \underbrace{B e^{-ik_{\text{I}}x}}_{\substack{\text{reflektierte} \\ \text{Welle}}} \quad \text{mit } k_{\text{I}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (9.180)$$

$$\text{II:} \quad u_{\text{II}}(x) = \underbrace{C e^{k_{\text{II}}x} + D e^{-k_{\text{II}}x}}_{\substack{\text{zerfallende Wellenfunktion} \\ \text{in der Barriere}}} \quad \text{mit } k_{\text{II}} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (9.181)$$

$$\text{III:} \quad u_{\text{III}}(x) = \underbrace{F e^{ik_{\text{III}}x}}_{\substack{\text{rechtslaufende} \\ \text{Welle}}} + \underbrace{G e^{-ik_{\text{III}}x}}_{\substack{\text{linkslaufende} \\ \text{Welle}}} \quad \text{mit } k_{\text{III}} = k_{\text{I}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (9.182)$$

Es ist zu bemerken, dass im Bereich III aufgrund der betrachteten Situation (Teilchen kommt von links) nur eine rechtslaufende Welle existieren kann und daher $G = 0$ ist. Die anderen Koeffizienten A , B , C , D und F ergeben sich aus den Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ und $x = L$ für die Wellenfunktion und deren Ableitung nach x . Bevor wir die Koeffizienten A , B , C , D und F aus diesen Stetigkeitsbedingungen berechnen, gehen wir zurück zu unserem ursprünglichen Ziel, der Bestimmung der Transmissionswahrscheinlichkeit T . Mit (9.180) und (9.182) ergibt sich nach Definition 9.12 der folgende Ausdruck

$$T = \frac{S_{\text{trans}}}{S_{\text{ein}}} = \frac{|u_{\text{III}}(x)|^2 v_{\text{III}}}{|u_{\text{I,ein}}(x)|^2 v_{\text{I}}} = \frac{FF^*}{AA^*}, \quad (9.183)$$

wobei $u_{I,\text{ein}}(x)$ den einfallenden Anteil der Wellenfunktion $u_I(x)$ bezeichnet. Ausserdem haben wir im letzten Schritt verwendet, dass $v_I = v_{III}$, da sich das Teilchen in beiden Regionen I und III im potentialfreien Raum bewegt und beim Tunnelprozess keine kinetische Energie verliert. Demzufolge genügt es das Verhältnis A/F aus den Stetigkeitsbedingungen zu bestimmen. Diese sind gegeben durch

$$u_I(0) = u_{II}(0) \rightarrow A + B = C + D, \quad (9.184)$$

$$u_{II}(L) = u_{III}(L) \rightarrow Ce^{k_{II}L} + De^{-k_{II}L} = Fe^{ik_1L}, \quad (9.185)$$

$$\frac{\partial u_I}{\partial x}(0) = \frac{\partial u_{II}}{\partial x}(0) \rightarrow Aik_1 - Bik_1 = Ck_{II} - Dk_{II}, \quad (9.186)$$

$$\frac{\partial u_{II}}{\partial x}(L) = \frac{\partial u_{III}}{\partial x}(L) \rightarrow Ck_{II}e^{k_{II}L} - Dk_{II}e^{-k_{II}L} = Fik_1e^{ik_1L}. \quad (9.187)$$

In Matrixschreibweise lautet dieses Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_{II}L} & e^{-k_{II}L} & -e^{ik_1L} \\ ik_1 & -ik_1 & -k_{II} & k_{II} & 0 \\ 0 & 0 & k_{II}e^{k_{II}L} & -k_{II}e^{-k_{II}L} & -ik_1e^{ik_1L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ F \end{pmatrix} = 0. \quad (9.188)$$

Elementare Zeilenumformungen für lineare Gleichungssysteme liefern

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -2ik_1 & -k_{II} + ik_1 & k_{II} + ik_1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_{II}L} & e^{-k_{II}L} & -e^{ik_1L} \\ 0 & 0 & 0 & -2k_{II}e^{-k_{II}L} & (-ik_1 + k_{II})e^{ik_1L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ F \end{pmatrix} = 0. \quad (9.189)$$

Wir drücken nun mit (9.189) Schritt für Schritt die Koeffizienten A , B , C und D durch den Koeffizient F aus, um dann schliesslich zum Verhältnis A/F zu gelangen. Für den Koeffizient D ergibt sich

$$D = \left(-\frac{ik_1}{2k_{II}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_1+k_{II})L} F. \quad (9.190)$$

Damit erhalten wir für den Koeffizient C

$$\begin{aligned} C &= -e^{-2k_{II}L} D + e^{(ik_1-k_{II})L} F \\ &= \left(\frac{ik_1}{2k_{II}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_1-k_{II})L} F. \end{aligned} \quad (9.191)$$

Für den Koeffizient B resultiert

$$\begin{aligned} B &= \left(-\frac{k_{II}}{2ik_1} + \frac{1}{2} \right) C + \left(\frac{k_{II}}{2ik_1} + \frac{1}{2} \right) D \\ &= \left(\left(-\frac{k_{II}}{4ik_1} + \frac{ik_1}{4k_{II}} \right) e^{(ik_1-k_{II})L} + \left(\frac{k_{II}}{4ik_1} - \frac{ik_1}{4k_{II}} \right) e^{(ik_1+k_{II})L} \right) F. \end{aligned} \quad (9.192)$$

Schlussendlich erhalten wir daraus für das Verhältnis A/F

$$\begin{aligned}
\frac{A}{F} &= -\frac{B}{F} + \frac{C}{F} + \frac{D}{F} \\
&= \left(\frac{k_{\text{II}}}{4ik_{\text{I}}} - \frac{ik_{\text{I}}}{4k_{\text{II}}} \right) e^{(ik_{\text{I}}-k_{\text{II}})L} + \left(-\frac{k_{\text{II}}}{4ik_{\text{I}}} + \frac{ik_{\text{I}}}{4k_{\text{II}}} \right) e^{(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L} \\
&\quad + \left(\frac{ik_{\text{I}}}{2k_{\text{II}}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_{\text{I}}-k_{\text{II}})L} + \left(-\frac{ik_{\text{I}}}{2k_{\text{II}}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L} \\
&= \left(\frac{1}{2} - \frac{i}{4} \left(\frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} - \frac{k_{\text{I}}}{k_{\text{II}}} \right) \right) e^{(ik_{\text{I}}-k_{\text{II}})L} + \left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4} \left(\frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} - \frac{k_{\text{I}}}{k_{\text{II}}} \right) \right) e^{(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L}.
\end{aligned} \tag{9.193}$$

Wir vereinfachen diesen Ausdruck, indem wir folgende zwei Annahmen tätigen:

1. Die Teilchenenergie E sei klein gegenüber der Höhe der Potentialbarriere V_0 , d.h. $E \ll V_0$. Damit ergibt sich: $k_{\text{II}} \gg k_{\text{I}}$ und daraus

$$\frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} - \frac{k_{\text{I}}}{k_{\text{II}}} \sim \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}. \tag{9.194}$$

2. Für die Breitenbreite L sei $k_{\text{II}}L \gg 1$, d.h. wir betrachten breite Barrieren. Daraus folgt

$$e^{k_{\text{II}}L} \gg e^{-k_{\text{II}}L}. \tag{9.195}$$

Mit diesen beiden Annahmen (9.194) und (9.195) vereinfacht sich der Ausdruck (9.193) für das Verhältnis A/F folgendermassen

$$\frac{A}{F} = \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_{\text{II}}}{4k_{\text{I}}} \right) e^{(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L}. \tag{9.196}$$

Einsetzen in (9.183) liefert für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned}
T &= \frac{FF^*}{AA^*} \\
&\sim \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_{\text{II}}}{4k_{\text{I}}} \right)^{-1} e^{-(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L} \left(\frac{1}{2} - \frac{ik_{\text{II}}}{4k_{\text{I}}} \right)^{-1} e^{-(-ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L} \\
&= \frac{16}{4 + (k_{\text{II}}/k_{\text{I}})^2} e^{-2k_{\text{II}}L}.
\end{aligned} \tag{9.197}$$

Mit den Ausdrücken $k_{\text{I}} = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $k_{\text{II}} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ ergibt sich das folgende Schlussresultat

$$T = \frac{16}{3 + V_0/E} e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}L/\hbar}. \tag{9.198}$$

D.h. die Transmissionswahrscheinlichkeit zeigt eine starke exponentielle Abhängigkeit von Teilchenenergie E und der Breite der Barriere L .

Um nun eine Vorstellung über die Stärke des Tunneleffekts zu erhalten, betrachten wir das folgende Beispiel: Ein Elektron mit kinetischer Energie $E = 1$

eV bewegt sich auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 = 10$ eV und Breite $L = 0.5$ nm zu. Wie gross ist die Transmissionswahrscheinlichkeit T , d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass das Elektron die Barriere überwinden kann? Einsetzen der Werte in (9.198) liefert das folgende Ergebnis

$$T = \frac{16}{3 + V_0/E} e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}L/\hbar} = 2.6 \cdot 10^{-7}. \quad (9.199)$$

Das bedeutet, dass selbst für leichte Teilchen und niedrige Barrieren die Transmissionswahrscheinlichkeit T sehr klein ist. Dennoch ist der Tunneleffekt experimentell beobachtbar und findet, wie bereits zu Beginn des Abschnitts erwähnt, zum Beispiel beim Rastertunnelmikroskop⁵ (siehe Abschnitt 7.2.3) seine Anwendung.

Zum Abschluss dieses Abschnitts geben wir das Resultat einer Mathematica Berechnung für die Wellenfunktion (Realteil) und die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte für die Zahlenwerte $E = 9$ eV, $V_0 = 10$ eV und $L = 0.5$ nm wider (siehe Abb. 9.10). Aus dieser graphischen Darstellung wird ersichtlich, dass die Wellenfunktion vor und nach der Potentialbarriere oszilliert und innerhalb der Barriere exponentiell abfällt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte oszilliert ebenfalls vor der Potentialbarriere, da sich dort eine stehende Welle aus einfallender und reflektierter Materiewelle ausbildet. Innerhalb der Barriere fällt die Wahrscheinlichkeitsdichte exponentiell ab und hat nach der Barriere einen konstanten Wert, da sich das Teilchen dort als ebene Welle nur nach rechts ausbreitet.

Bewegung eines Wellenpakets durch einen Potentialtopf / Potentialbarriere

Wie bereits zuvor diskutiert ergibt sich ein Wellenpaket als Superposition von vielen harmonischen Wellen mit verschiedenen Frequenzen ω und Wellenzahlen k (siehe Abschnitt 6.4). Die verschiedenen Frequenzen ω entsprechen verschiedenen Energien $\hbar\omega$.

Wir betrachten hier die Bewegung eines Gaußschen Wellenpakets durch einen Potentialtopf der Tiefe V_0 und durch eine Potentialbarriere der Höhe V_0 hindurch. Dieses Problem lässt sich durch Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (9.94) bearbeiten. Die Berechnung eines solchen Problems lässt sich nur schwierig von Hand bewältigen. Wir geben hier das Resultat einer Computerberechnung wieder, welche von Abraham Goldberg und seinen Mitarbeitern im Jahr 1967 [12] durchgeführt wurde. Diese zeigen, dass sich das Wellenpaket am Potentialtopf und an der Barriere, für den Fall dass die Teilchenenergie sehr viel grösser ist als die Topftiefe oder die Barrierenhöhe ($\langle E \rangle \gg V_0$), im Wesentlichen wie ein klassisches Teilchen verhält. Das Teilchen überwindet die durch die Barriere oder den Topf dargestellte Störung mit hoher Wahrscheinlichkeit und wird nur mit einer niedrigen Wahrscheinlichkeit reflektiert. Für $\langle E \rangle \ll V_0$ wird das Teilchen sowohl vom Topf als auch von der Barriere reflektiert. Für die Barriere entspricht dies angenähert ebenfalls den klassischen

⁵Für das Design des ersten Rastertunnelmikroskops erhielten Gerd Binnig und Heinrich Rohrer 1986 den Nobelpreis.

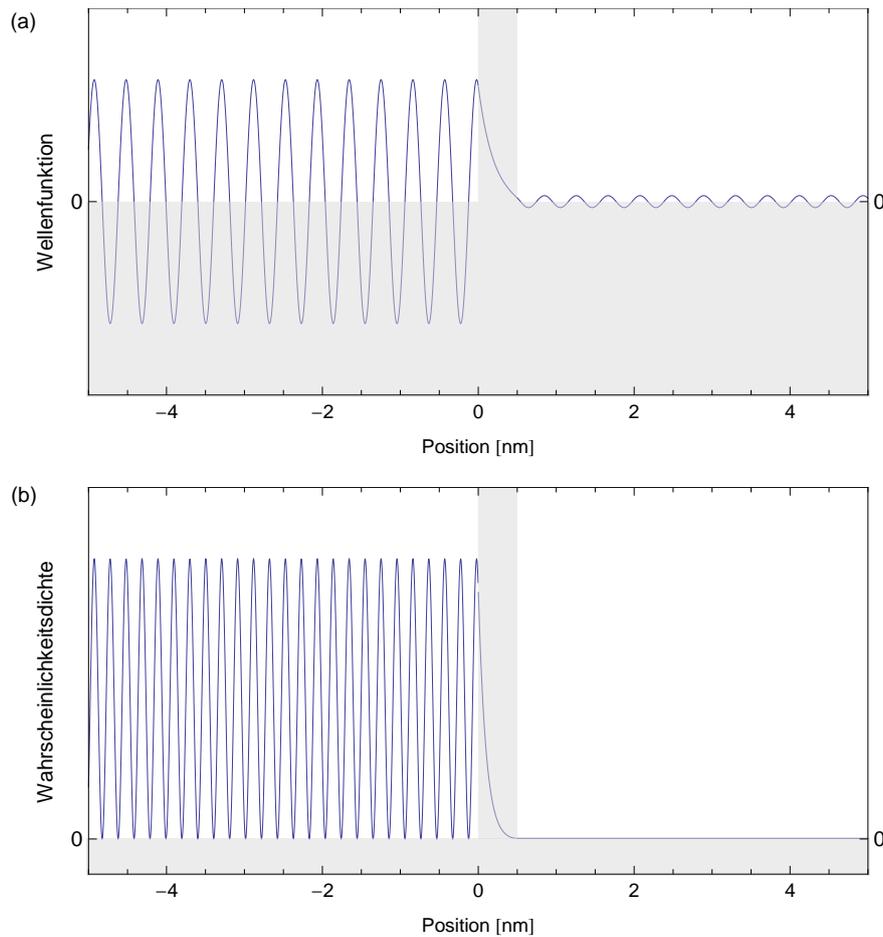


Abb. 9.10: Mathematica Berechnung der (a) Wellenfunktion $\text{Re}[u(x)]$ und (b) Wahrscheinlichkeitsdichte $|u(x)|^2$ für ein Elektron, das sich mit einer kinetischen Energie $E = 9 \text{ eV}$ auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 = 10 \text{ eV}$ und Breite $L = 0.5 \text{ nm}$ zubewegt und diese „tunnelt“.

Vorstellungen. Drastische Abweichung vom klassischen Verhalten kommen jedoch zum Vorschein, wenn die Teilchenenergie von ähnlicher Grösse ist wie die Barrierenhöhe oder die Topftiefe (siehe Abb. 9.11). Vergleiche dazu die Ausführungen zum Tunneleffekt im vorangegangenen Abschnitt.

9.5 Eigenwerte und Eigenfunktionen von Operatoren

9.5.1 Scharfe und unscharfe Werte von Observablen

Wir illustrieren zunächst die Bedeutung von scharfen bzw. unscharfen Observablen anhand von einigen Beispielen und geben anschliessend die genaue mathematische Definition. Bei den Beispielen beziehen wir uns auf die Heisenbergsche Unschärferelation (siehe Abschnitt 9.2).

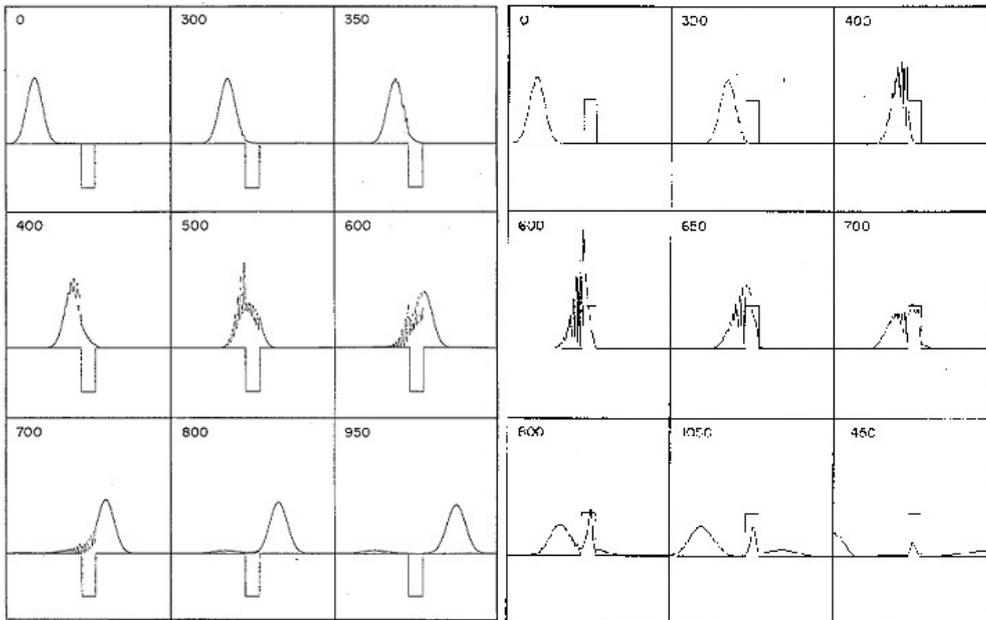


Abb. 9.11: Computerberechnungen für die Bewegung eines Gaußschen Wellenpakets durch einen Potentialtopf (links) und durch eine Potentialbarriere (rechts) für den Fall $\langle E \rangle = V_0$. [12]

Stationäre Zustände

Bei der Bewegung eines Teilchens (Massepunkt) in einem zeitunabhängigen Potential bleibt die Gesamtenergie E konstant. Zur Messung der Energie steht damit eine beliebig lange Zeitspanne Δt zur Verfügung. Da $\Delta E \Delta t \sim h$, also endlich ist, kann die Unschärfe ΔE einer Messung der Energie beliebig klein werden. Man sagt in diesem Fall: Die Energie hat den *scharfen* Wert E .

Zum Beispiel haben wir beim Teilchen im Potentialtopf gesehen (siehe Abschnitte 9.1.1 und 9.4.2), dass die Energie verschiedene scharfe und diskrete Werte E_n annehmen kann, welche durch die Quantenzahl n charakterisiert sind.

Bei genauerer Betrachtung findet man jedoch, dass die Schärfe der Differenz zweier Energien eines quantenmechanischen Systems immer durch die Lebensdauer der mit dem Übergang verknüpften Zustände begrenzt ist. Diese Zustände können, wie wir bereits kennengelernt haben, im Prozess der spontanen Emission, hervorgerufen durch die Wechselwirkung mit den Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes, auf einer durch die Einstein-Koeffizienten bestimmten Zeitskala zerfallen.

Teilchen im räumlich und zeitlich konstanten Potential

Nach Abschnitt 9.4.2 ist die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im räumlich und zeitlich konstanten Potential eine ebene, harmonische Welle

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px - Et)/\hbar}. \quad (9.200)$$

Da der Zustand stationär ist, ist die Energie scharf. Im Gegensatz zum Teilchen im Potentialtopf sind die Werte, die sie annehmen kann, jedoch beliebig und

nicht diskret.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ ist räumlich (und zeitlich) konstant. D.h. der genaue Aufenthaltsort des Teilchens ist unbestimmt oder mit anderen Worten, die Unschärfe Δx des Ortes ist unendlich. Da $\Delta p \Delta x \sim h$ endlich ist, verschwindet die Unschärfe Δp des Impulses p . D.h. neben der Energie E nimmt auch der Impuls p einen scharfen Wert an. Auch beim Impuls sind die Werte beliebig und nicht diskret.

Unschärfe Werte

Im Gegensatz zu diesen Beispielen haben wir bei der Beugung am Spalt (siehe Abschnitt 9.2.1) und beim Gauss'schen Wellenpaket (siehe Abschnitt 9.2.2) gesehen, dass sowohl der Ort x als auch der Impuls p unscharfe Werte annehmen. Dabei sind die Unschärfen Δx und Δp von Ort und Impuls durch die Heisenbergsche Unschärferelation miteinander verknüpft.

Definition: Der scharfe Wert einer Observablen

Diesen Beispielen folgend geben wir nun eine mathematische Definition an, unter welchen Bedingungen der Erwartungswert $\langle F \rangle$ einer Observablen F scharf bestimmt ist.

Definition 9.13 Für ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t)$ ist der Erwartungswert $\langle F \rangle$ einer Observablen F **scharf** bestimmt, wenn bei wiederholter Messung an identisch gleich präparierten Teilchen immer der selbe Wert F_0 resultiert. Mathematisch bedeutet das, dass die Unschärfe ΔF verschwinden muss

$$(\Delta F)_\psi = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle_\psi} = 0. \quad (9.201)$$

Der Index ψ soll daran erinnern, dass diese Beziehung für ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t)$ gilt, denn es hängt vom Zustand ab, ob der Erwartungswert einer Observable einen scharfen Wert annimmt oder nicht.

Wir werden nun zeigen, dass sich mit Hilfe des Operatorformalismus eine einfache Bedingung angeben lässt, die erfüllt sein muss, damit der Erwartungswert $\langle F \rangle_\psi$ einer Observable F im Zustand $\psi(x, t)$ einen scharfen Wert besitzt. Wir betrachten diese Observable als Funktion $F(x, p)$ oder allgemeiner als Funktion $F(q_k, p_k)$ der verallgemeinerten Koordinaten q_k und der dazu kanonisch konjugierten Impulse p_k . Wir betrachten hier stationäre (zeitunabhängige) Zustände und interpretieren die Bildung der Erwartungswerte als Mittelung vieler Messungen an identischen, gleich präparierten Teilchen.

Satz 9.1 Sei der Zustand jedes betrachteten Teilchens beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im Ortsraum, dann gilt: Der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_\psi$ einer Observable $F(x, p)$ nimmt genau dann den scharfen Wert F_0 an, wenn die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ die folgende Gleichung erfüllt

$$\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t). \quad (9.202)$$

Die Gleichung (9.202) wird als **Eigenwertgleichung** bezeichnet. Sie besagt, dass sich die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ bis auf den Faktor F_0 reproduziert, wenn man den Operator \hat{F} auf sie anwendet. Eine Wellenfunktion $\psi(x, t)$, die (9.202) erfüllt, ist eine **Eigenfunktion** des Operators \hat{F} . Der scharfe Wert F_0 , den der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_\psi$ annimmt, wird **Eigenwert** des Operators \hat{F} genannt.

In der Impulsraumdarstellung gilt ein entsprechender Satz für die Wellenfunktion $\phi(p, t)$. Es ist zu beachten, dass der Operator \hat{F} in dieser Darstellung eine andere Form besitzt als in der Ortsraumdarstellung.

Beweis des Satzes:

Nach Definition 9.13 für den scharfen Wert des Erwartungswerts $\langle F(x, p) \rangle_\psi$ einer Observable $F(x, p)$ ist folgende Äquivalenz zu zeigen

$$\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t) \Leftrightarrow (\Delta F)_\psi = 0, \quad (9.203)$$

wobei $F_0 = \langle F(x, p) \rangle_\psi$. Wir betrachten die beiden Richtungen einzeln.

„ \Rightarrow “

Mit Hilfe der Eigenwertgleichung (9.202) folgt für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle F(x, p) \rangle_\psi &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} \psi(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) F_0 \psi(x, t) dx \\ &= F_0 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx}_{=1} &= F_0. \end{aligned} \quad (9.204)$$

Für den Erwartungswert $\langle F^2(x, p) \rangle_\psi$ von $F^2(x, p)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle F^2(x, p) \rangle_\psi &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F}^2 \psi(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} (\hat{F} \psi(x, t)) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} F_0 \psi(x, t) dx &= F_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} \psi(x, t) dx \\ &= F_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) F_0 \psi(x, t) dx &= F_0^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx}_{=1} \\ &= F_0^2. \end{aligned} \quad (9.205)$$

Somit erhalten wir für die Unschärfe $(\Delta F)_\psi$ von $F(x, p)$

$$\begin{aligned} (\Delta F)_\psi &= \sqrt{\langle (F(x, p) - \langle F(x, p) \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi} \\ &= \sqrt{\langle F^2(x, p) \rangle_\psi - \langle F(x, p) \rangle_\psi^2} \\ &= \sqrt{F_0^2 - F_0^2} = 0. \end{aligned} \quad (9.206)$$

„ \Leftarrow “

Aus $(\Delta F)_\psi = 0$ folgt mit der Eigenschaft, dass in der Quantenmechanik die Operatoren hermitesch sind

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right)^2 \psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right) \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right) \psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right) \psi(x, t) \right)^* \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right) \psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left| \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right) \psi(x, t) \right|^2 dx. \tag{9.207}
 \end{aligned}$$

Dieses Integral verschwindet nur dann, wenn gilt

$$\left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_\psi \right) \psi(x, t) = 0, \tag{9.208}$$

d.h. wenn folgende Gleichung erfüllt ist

$$\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t) \text{ mit } F_0 = \langle F(x, p) \rangle_\psi. \tag{9.209}$$

□

Wir fassen diesen Abschnitt zusammen:

Genau dann wenn bei wiederholter Messung der Observablen $F(x, p)$ an identischen, im selben Zustand $\psi(x, t)$ präparierten Teilchen, immer der selbe Wert F_0 gemessen wird, ist $\psi(x, t)$ eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} zum Eigenwert F_0 . Man sagt dann, das Teilchen befindet sich in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} der zum Eigenwert F_0 gehört.

9.5.2 Eigenfunktionen und Eigenwerte von ausgewählten Operatoren

Wir betrachten hier verschiedene Operatoren, die wir in Abschnitt 9.3.2 kennengelernt haben und bestimmen ihre Eigenfunktionen und Eigenwerte.

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Hamilton-Operators

Wir betrachten ein Teilchen, das sich in einem zeitunabhängigen Potential $V(x, y, z)$ bewegt. Seine Gesamtenergie E ist dann konstant und damit scharf messbar, wenn sich das Teilchen in einem Eigenzustand des Operators befindet. Nach Abschnitt 9.5.1 ist somit E ein Eigenwert des Hamilton-Operators \hat{H} . Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = E\psi(x, y, z, t). \tag{9.210}$$

Andererseits gilt die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \tag{9.211}$$

Aus (9.210) und (9.211) folgt die Gleichung

$$E\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (9.212)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi(x, y, z, t) = u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.213)$$

Andererseits kann die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (9.109) als Eigenwertgleichung aufgefasst werden, indem wir schreiben

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z)\right)}_{=\hat{H}} u(x, y, z) = Eu(x, y, z). \quad (9.214)$$

Wir halten fest

- Die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators (9.213) stellen stationäre Zustände dar.
- Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (9.109) kann als Eigenwertgleichung aufgefasst werden.
- Insbesondere sind die Wellenfunktionen $u(x, y, z)$ Eigenfunktionen des Hamilton-Operators.

Das Teilchen im Potentialtopf (siehe Abschnitte 9.1.1 und 9.4.2) ist ein instruktives Beispiel für das Auftreten diskreter Energiewerte E_n . Zu jedem Eigenwert E_n des Hamilton-Operators gehört eine Eigenfunktion $\psi_n(x, t)$ bzw. $u_n(x)$.

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Impulsoperators

Wir betrachten einfachheitshalber ein eindimensionales System. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = p_0 \psi(x, t) \quad (9.215)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi(x, t) = f(t)e^{ip_0x/\hbar}, \quad (9.216)$$

wobei $f(t)$ als Amplitude aufzufassen ist. Diese Funktion ist räumlich periodisch und stellt ein Teilchen dar, das einen scharf bestimmten Impuls p_0 hat, dessen Position aber völlig unbestimmt ist. Damit ist die Unschärfe des Ortes unendlich gross. Dies ist im Einklang mit der Heisenbergschen Unschärferelation (9.37).

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Ortsoperators

Wir beschränken uns wiederum auf eine Dimension und betrachten zusätzlich ein zeitunabhängiges Problem. Die Eigenwertgleichung nimmt dann folgende Form an

$$\hat{x}u(x) = x_0u(x). \quad (9.217)$$

Der Ortsoperator in der Ortsraumdarstellung entspricht dem Faktor x . Demzufolge können wir schreiben

$$(x - x_0)u(x) = 0. \quad (9.218)$$

Nach dieser Gleichung muss $u(x)$ verschwinden für alle $x \neq x_0$. Bei $x = x_0$ ist $u(x)$ unendlich und zwar so, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)u(x)dx = 1. \quad (9.219)$$

D.h. $u(x)$ entspricht einer sogenannten *Diracschen Deltafunktion*

$$u(x) = \delta(x - x_0). \quad (9.220)$$

Eine solche Deltafunktion kann man angenähert als beliebig schmales Gaußsches Wellenpaket beschreiben

$$u(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} e^{-(x-x_0)^2/(4a^2)}. \quad (9.221)$$

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Operators \hat{L}_z

Der Zustand eines Teilchens im dreidimensionalen Raum sei in Kugelkoordinaten ausgedrückt $\psi(r, \vartheta, \varphi, t) = u(r, \vartheta, \varphi)e^{iEt/\hbar}$. Wir betrachten hier wiederum ein zeitunabhängiges Problem. Somit lautet die Eigenwertgleichung für den Operator \hat{L}_z

$$\hat{L}_z u(r, \vartheta, \varphi) = L_{z0} u(r, \vartheta, \varphi). \quad (9.222)$$

Mit (9.68) ergibt sich

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} u(r, \vartheta, \varphi) = L_{z0} u(r, \vartheta, \varphi). \quad (9.223)$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist

$$u(r, \vartheta, \varphi) = f(r, \vartheta) e^{iL_{z0}\varphi/\hbar}. \quad (9.224)$$

Das erste Postulat (siehe Abschnitt 9.1) verlangt, dass die Wellenfunktion eindeutig sein muss. Daraus ergibt sich für die Wellenfunktion $u(r, \vartheta, \varphi)$ folgende notwendige Bedingung

$$u(r, \vartheta, \varphi) = u(r, \vartheta, \varphi + 2\pi). \quad (9.225)$$

D.h. es muss gelten

$$e^{iL_{z0}\varphi/\hbar} = e^{iL_{z0}(\varphi+2\pi)/\hbar}. \quad (9.226)$$

Diese Gleichung ist erfüllt, wenn

$$\frac{L_{z0}2\pi}{\hbar} = 2\pi m_l \text{ mit } m_l \in \mathbb{Z}. \quad (9.227)$$

Damit ergibt sich

Die Eigenwerte L_{z0} des Operators \hat{L}_z sind ganzzahlige Vielfache von \hbar

$$L_{z0} = m_l \hbar \text{ mit } m_l \in \mathbb{Z}. \quad (9.228)$$

Zu jedem Eigenwert (zu jeder Quantenzahl) $m_l \hbar$ gehört eine Eigenfunktion $u_{m_l}(r, \vartheta, \varphi)$

$$u_{m_l}(r, \vartheta, \varphi) = f_{m_l}(r, \vartheta) e^{im_l \varphi}. \quad (9.229)$$

Aus diesen Betrachtungen ergibt sich, dass die z-Komponente des Bahndrehimpulses - wenn sie einen scharfen Wert besitzt - nur die diskreten Werte $m_l \hbar$ annehmen kann. Dies gilt nur für eine ausgezeichnete Richtung des Raumes, in diesem Fall die z-Richtung. Entlang der beiden dazu orthogonalen Raumrichtungen, x und y , ist der Bahndrehimpuls unscharf. Diese Tatsache werden wir in einem späteren Kapitel noch genauer diskutieren.

9.5.3 Das dritte Postulat: Die quantenmechanische Messung

Das dritte Postulat der Quantenmechanik lautet:

Postulat 3 *Das Ergebnis einer einzelnen Messung einer Observablen F ist ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{F} . Erhält man bei einer Messung den Eigenwert F_0 , so geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion $\psi(x, t)$ über. D.h. befindet sich das System vor der Messung einer Observablen F nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} , so ändert die Messung den Zustand des System, sodass sich das System nach der Messung in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} befindet. Hingegen bleibt der Zustand des Systems unverändert, wenn dieser bereits vor der Messung der Observablen F einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} entspricht.*

Wir illustrieren Postulat 3 am Beispiel des Bahndrehimpulses aus dem vorangegangenen Abschnitt. Wir betrachten die Messung der Komponente des Bahndrehimpulses eines Teilchens längs einer vorgegebenen Achse. Eine solche ausgezeichnete Achse kann zum Beispiel durch die Richtung eines angelegten homogenen Magnetfeldes vorgegeben sein, eine Situation die wir im Kontext

des Zeeman-Effekts noch genauer diskutieren werden. Es ist in der Quantenmechanik üblich, diese Achse, längs der die Komponente des Bahndrehimpulses gemessen wird, als z-Achse zu bezeichnen.

Als Ergebnis einer solchen Messung der z-Komponente des Bahndrehimpulses L_z ergeben sich nach Postulat 3 und Abschnitt 9.5.2 nur die diskreten Werte $m_l\hbar$, d.h. die Eigenwerte des entsprechenden Operators \hat{L}_z . Führt man diese Messung nun an gleich präparierten Teilchen durch und misst jedes Mal den selben Wert (Eigenwert) $m_l\hbar$, dann war der Zustand der Teilchen vor der Messung ein Eigenzustand von \hat{L}_z und der Zustand der Teilchen wird durch die Messung nicht verändert. Misst man hingegen an gleich präparierten Teilchen verschiedene Werte (Eigenwerte) $m_l\hbar$, dann war der Zustand der Teilchen vor der Messung kein Eigenzustand von \hat{L}_z . Nach der Messung befinden sich in diesem Fall die Teilchen in verschiedenen Eigenzuständen von \hat{L}_z zu den entsprechenden Eigenwerten (Messresultaten) $m_l\hbar$.

9.5.4 Simultane Eigenfunktionen zweier Operatoren

Nach Satz 9.1 nimmt der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_\psi$ einer Observable $F(x, p)$ den scharfen Wert F_0 an, wenn der Zustand des Teilchens $\psi(x, t)$ die Eigenwertgleichung

$$\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t) \quad (9.230)$$

erfüllt. Es stellt sich nun die Frage, ob Zustände $\psi(x, t)$ existieren, für die die Erwartungswerte von zwei Observablen gleichzeitig scharf sind. Diese Frage ist mit „ja“ zu beantworten, wie das folgende Beispiel zeigt.

Die Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar} \quad (9.231)$$

stellt ein Teilchen dar, das sich im zeitlich und räumlich konstanten Potential längs der x-Achse bewegt. Nach Abschnitt 9.5.1 sind die Energie E und auch der Impuls p gleichzeitig scharf. Dies lässt sich nochmals verdeutlichen, indem wir die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ als Produkt schreiben

$$\psi(x, t) = Ae^{ipx/\hbar}e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.232)$$

Daraus wird ersichtlich, dass es sich um eine simultane Eigenfunktion der Operatoren \hat{p}_x und \hat{H} handelt. Denn eine Eigenfunktion von \hat{p}_x hat nach (9.216) die allgemeine Form

$$\psi(x, t) = f(t)e^{ipx/\hbar} \quad (9.233)$$

und eine Eigenfunktion von \hat{H} hat nach (9.213) die allgemeine Form

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.234)$$

Das Ziel ist es nun ein allgemeines Kriterium zu formulieren, welches angibt, ob zwei Observable gleichzeitig scharf messbar sind. Im Zusammenhang mit der

Erklärung der Bedeutung des Kommutators (siehe Abschnitt 9.3.3) haben wir diese Frage schon einmal gestreift, indem wir gesagt haben, dass die Erwartungswerte nicht kommutierender Operatoren gleichzeitig nicht mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden können. Wie angekündigt wollen wir nun diese Aussage präziser formulieren und beweisen. Es gilt der folgende Satz:

Satz 9.2 Die Erwartungswerte von zwei Observablen F und G eines Teilchens im Zustand $\psi(x, t)$ sind dann und nur dann gleichzeitig scharf, wenn die Anwendung des Kommutators der entsprechenden Operatoren \hat{F} und \hat{G} auf die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ null ergibt

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi(x, t) = 0. \quad (9.235)$$

Beweis:

Wir betrachten die beiden Richtungen einzeln.

„ \Rightarrow “

Wenn F und G gleichzeitig scharf sind, dann gelten nach Satz 9.1 die Eigenwertgleichungen

$$\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t), \quad (9.236)$$

$$\hat{G}\psi(x, t) = G_0\psi(x, t). \quad (9.237)$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} [\hat{F}, \hat{G}]\psi(x, t) &= \hat{F}\hat{G}\psi(x, t) - \hat{G}\hat{F}\psi(x, t) \\ &= \hat{F}(\hat{G}\psi(x, t)) - \hat{G}(\hat{F}\psi(x, t)) \\ &= \hat{F}(G_0\psi(x, t)) - \hat{G}(F_0\psi(x, t)) \\ &= G_0\hat{F}\psi(x, t) - F_0\hat{G}\psi(x, t) \\ &= G_0F_0\psi(x, t) - F_0G_0\psi(x, t) = 0. \end{aligned} \quad (9.238)$$

„ \Leftarrow “

Zu zeigen ist, dass wenn die Anwendung des Kommutators $[\hat{F}, \hat{G}]$ auf die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ null ergibt, $\psi(x, t)$ eine Eigenfunktion von \hat{F} und \hat{G} ist.⁶

Es sei (ohne Beschränkung der Allgemeinheit) $\psi(x, t)$ eine Eigenfunktion von \hat{F} , dann gilt

$$\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t). \quad (9.239)$$

Da $[\hat{F}, \hat{G}]\psi(x, t) = 0$ gilt

$$\hat{F}\hat{G}\psi(x, t) = \hat{G}\hat{F}\psi(x, t). \quad (9.240)$$

Mit (9.239) erhalten wir

$$\hat{F}(\hat{G}\psi(x, t)) = F_0(\hat{G}\psi(x, t)). \quad (9.241)$$

⁶Wir beschränken uns dabei auf den nicht-entarteten Fall, d.h. wenn zu einem Eigenwert ein eindimensionaler Eigenraum gehört.

Da $\psi(x, t)$ die einzige Eigenfunktion von \hat{F} zum Eigenwert F_0 ist, muss $\hat{G}\psi(x, t)$ proportional zu $\psi(x, t)$ sein. Wir bezeichnen die Proportionalitätskonstante mit G_0 und erhalten

$$\hat{G}\psi(x, t) = G_0\psi(x, t), \quad (9.242)$$

d.h. $\psi(x, t)$ ist gleichzeitig auch eine Eigenfunktion von \hat{G} . Für den Beweis des entarteten Falls verweisen wir auf weiterführende Literatur [11]. \square

Beispiele zur Anwendung des Satzes

- Nach Abschnitt 9.3.3 kommutieren \hat{x} und \hat{p}_x für jede beliebige Wellenfunktion ψ nicht. Demzufolge gibt es nach Satz 9.2 keinen Zustand, bei dem x und p_x gleichzeitig scharf sind. Dies ist in Übereinstimmung mit der Unschärferelation (9.37).
- Die Operatoren der Bahndrehimpulscomponenten kommutieren nicht (siehe Abschnitt 9.3.3). Demzufolge gibt es nach Satz 9.2 auch für diese Observablen keinen Zustand, bei dem sie gleichzeitig scharf sind.
- Weitere Beispiele für gleichzeitig scharfe Observable werden wir bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms (siehe Kapitel 11) kennenlernen. In diesem Fall sind dann sogar drei Observablen scharf: Die Energie E , das Quadrat des Bahndrehimpulsvektors \vec{L}^2 und die z-Komponente L_z des Bahndrehimpulses. Entsprechend gilt nach Satz 9.2

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (9.243)$$

9.5.5 Orthogonalität der Eigenfunktionen

Die allgemeine mathematische Definition für die Orthogonalität zweier Funktionen lautet:

Definition 9.14 Zwei Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ nennt man im Variablenbereich $a \leq x \leq b$ **orthogonal**, wenn gilt

$$\int_a^b f^*(x)g(x)dx = 0. \quad (9.244)$$

Zum Beispiel sind die Funktionen $\cos(mx)$ und $\cos(nx)$ bei ganzzahligen m und n im Variablenbereich $-\pi \leq x \leq \pi$ orthogonal für $m \neq n$, denn es gilt

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx) \cos(nx) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \pi, & m = n. \end{cases} \quad (9.245)$$

Die gleiche Orthogonalitätsbedingung erfüllen auch die Funktionen $\sin(mx)$ und $\sin(nx)$. Es sind genau diese Orthogonalitätseigenschaften, die die Fourier-Entwicklung ermöglichen.

Für die Wellenfunktionen $\psi(x, t)$ gilt der folgende Satz:

Satz 9.3 *Es seien $\psi_m(x, t)$ und $\psi_n(x, t)$ Eigenfunktionen des hermiteschen Operators \hat{F} , die zu verschiedenen Eigenwerten F_m und F_n gehören. Dann sind $\psi_m(x, t)$ und $\psi_n(x, t)$ orthogonal in ihrem räumlichen Existenzgebiet, d.h.*

$$\int \psi_m^*(x, t)\psi_n(x, t)dx = 0 \text{ für } m \neq n. \quad (9.246)$$

Beweis:

i) Hermitesche Operatoren \hat{F} erfüllen die Bedingung (9.91)

$$\int \psi^*(x, t)\hat{F}\psi(x, t)dx = \int \psi(x, t)\hat{F}^*\psi^*(x, t)dx \quad (9.247)$$

Wir beweisen nun in einem ersten Schritt, dass dann auch gilt

$$\int \psi_m^*(x, t)\hat{F}\psi_n(x, t)dx = \int \psi_n(x, t)\hat{F}^*\psi_m^*(x, t)dx. \quad (9.248)$$

Es sei $\psi(x, t) = \psi_m(x, t) + \beta\psi_n(x, t)$, wobei $\beta \in \mathbb{C}$ beliebig. Für diese Wellenfunktion gilt nach (9.247)

$$\begin{aligned} & \int (\psi_m(x, t) + \beta\psi_n(x, t))^*\hat{F}(\psi_m(x, t) + \beta\psi_n(x, t))dx \\ &= \int (\psi_m(x, t) + \beta\psi_n(x, t))\hat{F}^*(\psi_m(x, t) + \beta\psi_n(x, t))^*dx. \end{aligned} \quad (9.249)$$

Ausmultiplizieren liefert

$$\begin{aligned} & \int \psi_m^*(x, t)\hat{F}\psi_m(x, t)dx + \beta \int \psi_m^*(x, t)\hat{F}\psi_n(x, t)dx \\ &+ \beta^* \int \psi_n^*(x, t)\hat{F}\psi_m(x, t)dx + \beta^*\beta \int \psi_n^*(x, t)\hat{F}\psi_n(x, t)dx \\ &= \int \psi_m(x, t)\hat{F}^*\psi_m^*(x, t)dx + \beta^* \int \psi_m(x, t)\hat{F}^*\psi_n^*(x, t)dx \\ &+ \beta \int \psi_n(x, t)\hat{F}^*\psi_m^*(x, t)dx + \beta\beta^* \int \psi_n(x, t)\hat{F}^*\psi_n^*(x, t)dx. \end{aligned} \quad (9.250)$$

Indem wir wiederum die Bedingung (9.247) für hermitesche Operatoren ausnützen, lassen sich einige Terme wegekürzen und wir erhalten

$$\begin{aligned} & \beta \underbrace{\left(\int \psi_m^*(x, t)\hat{F}\psi_n(x, t)dx - \int \psi_n(x, t)\hat{F}^*\psi_m^*(x, t)dx \right)}_{\equiv \alpha} \\ &= \beta^* \underbrace{\left(\int \psi_m(x, t)\hat{F}^*\psi_n^*(x, t)dx - \int \psi_n^*(x, t)\hat{F}\psi_m(x, t)dx \right)}_{\equiv \gamma}. \end{aligned} \quad (9.251)$$

Mit den Bezeichnungen α und γ können wir (9.251) schreiben

$$\beta\alpha = \beta^*\gamma. \quad (9.252)$$

Für $\beta \in \mathbb{C}$ dürfen wir einen beliebigen Wert annehmen. Wir wählen einmal $\beta = 1$ und einmal $\beta = i$ und erhalten damit die Gleichungen $\alpha = \gamma$ und $\alpha = -\gamma$ mit der Lösung $\alpha = 0$ und $\gamma = 0$, d.h.

$$\int \psi_m^*(x, t) \hat{F} \psi_n(x, t) dx - \int \psi_n(x, t) \hat{F}^* \psi_m^*(x, t) dx = 0, \quad (9.253)$$

$$\int \psi_m(x, t) \hat{F}^* \psi_n^*(x, t) dx - \int \psi_n^*(x, t) \hat{F} \psi_m(x, t) dx = 0. \quad (9.254)$$

Jede dieser Gleichungen ist äquivalent zu (9.248), womit die Richtigkeit von (9.248) bewiesen ist.

- ii) Betrachte nun zwei Eigenfunktionen $\psi_m(x, t)$ und $\psi_n(x, t)$ von \hat{F} , die zu den (reellen) Eigenwerten F_m und F_n gehören. Die entsprechenden Eigenwertgleichungen lauten dann

$$\hat{F} \psi_m(x, t) = F_m \psi_m(x, t), \quad (9.255)$$

$$\hat{F} \psi_n(x, t) = F_n \psi_n(x, t). \quad (9.256)$$

Einsetzen in (9.248) liefert

$$\begin{aligned} & F_n \int \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx - F_m \int \psi_n(x, t) \psi_m^*(x, t) dx \\ &= (F_n - F_m) \int \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx = 0, \end{aligned} \quad (9.257)$$

d.h. für $F_m \neq F_n$ gilt

$$\int \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx = 0. \quad (9.258)$$

□

Wir illustrieren Satz 9.3 an zwei bekannten Beispielen:

1. Teilchen im Potentialtopf

Die Orthogonalität der Eigenfunktionen des Hamilton-Operators für ein Teilchen im (unendlichen) Potentialtopf ist für $x < 0$ und $x > L$ offensichtlich. Wir zeigen nun, dass die Orthogonalitätsbedingung auch für $0 \leq x \leq L$ erfüllt ist. Nach Abschnitt 9.4.2 nehmen die Eigenfunktionen folgende Form an

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (9.259)$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}
& \int_0^L \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx \\
&= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\
&= \frac{2}{L} \int_0^L \frac{e^{im\pi x/L} - e^{-im\pi x/L}}{2i} \frac{e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L}}{2i} dx \\
&= -\frac{2}{L} \int_0^L e^{i(m+n)\pi x/L} + e^{-i(m+n)\pi x/L} \\
&\quad - e^{i(m-n)\pi x/L} - e^{-i(m-n)\pi x/L} dx \tag{9.260}
\end{aligned}$$

Das Integral über die ersten beiden Summanden verschwindet. Für das Integral über die letzten beiden Summanden müssen wir eine Fallunterscheidung machen. Wir erhalten

$$\begin{aligned}
\int_0^L \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx &= \frac{2}{L} \int_0^L e^{i(m-n)\pi x/L} + e^{-i(m-n)\pi x/L} dx \\
&= \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n. \end{cases} \tag{9.261}
\end{aligned}$$

2. Die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators (z-Komponente)

Nach Abschnitt 9.5.2 haben die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}_z folgende Form

$$u_{m_l}(r, \vartheta, \varphi) = f_{m_l}(r, \vartheta) e^{im_l \varphi} \text{ mit } m_l \in \mathbb{Z}, \tag{9.262}$$

wobei zu jedem m_l ein Eigenwert $L_{z0} = m_l \hbar$ gehört. Dies ist eine Produktwellenfunktion, bei der die Variable φ von den Variablen r und ϑ separiert ist. Sowohl das System der Funktionen $e^{im_l \varphi}$, als auch das System der Funktionen $f_{m_l}(r, \vartheta)$ muss Orthogonalitätseigenschaften haben. Näheres folgt im Kapitel 11 über das Wasserstoffatom. Die Funktionen $f_{m_l}(r, \vartheta)$ hängen vom betrachteten System ab. Für das System der Funktionen $e^{im_l \varphi}$ lässt sich die Orthogonalitätseigenschaft leicht überprüfen

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} (e^{im_l \varphi})^* e^{im'_l \varphi} d\varphi &= \int_0^{2\pi} e^{i(m'_l - m_l) \varphi} d\varphi \\
&= \begin{cases} 0, & m_l \neq m'_l, \\ 2\pi, & m_l = m'_l. \end{cases} \tag{9.263}
\end{aligned}$$

Entartung

Häufig gehören zu einem Eigenwert F_m eines Operators \hat{F} mehrere verschiedene Eigenfunktionen. In diesem Fall spricht man von *Entartung*.

Zum Beispiel sind die Eigenfunktionen $\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z, t)$ des Hamilton-Operators eines in einem Würfel eingesperrten Teilchens entartet

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{L}\right) e^{-iE_{n_1, n_2, n_3} t / \hbar} \quad (9.264)$$

mit den Eigenwerten

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (9.265)$$

Entartet sind dabei sicher alle Energieniveaus bei denen mindestens zwei der Quantenzahlen n_1 , n_2 und n_3 verschieden sind. Aus dem Beweis des Satzes 9.3 geht hervor, dass zwei verschiedene Eigenfunktionen, die zum selben Eigenwert gehören nicht notwendigerweise orthogonal sind. Deshalb ist Satz 9.3 im Fall der Entartung mit Vorsicht anzuwenden. Wir werden auf diese Thematik der Entartung im nächsten Abschnitt nochmals genauer eingehen.

9.5.6 Linearkombinationen von Eigenfunktionen

Linearkombinationen zum selben Eigenwert

Für Eigenfunktionen zum selben Eigenwert, d.h. im Fall der Entartung, gilt der folgende Satz:

Satz 9.4 *Eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 ist wieder eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 .*

Beweis:

Seien $\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 , dann gilt

$$\hat{F}\psi_i(x, t) = F_0\psi_i(x, t), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (9.266)$$

Für eine Linearkombination dieser Eigenfunktionen $\psi(x, t) = \sum_{i=1}^n c_i \psi_i(x, t)$, $c_i \in \mathbb{C}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{F}\psi(x, t) &= \hat{F} \sum_{i=1}^n c_i \psi_i(x, t) = \sum_{i=1}^n c_i \hat{F}\psi_i(x, t) \\ &= \sum_{i=1}^n c_i F_0 \psi_i(x, t) = F_0 \sum_{i=1}^n c_i \psi_i(x, t) \\ &= F_0 \psi(x, t). \end{aligned} \quad (9.267)$$

□

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass Eigenfunktionen zum selben Eigenwert nicht notwendigerweise orthogonal sind. Im Allgemeinen ist es jedoch sehr hilfreich mit orthogonalen Eigenfunktionen rechnen zu können. Nach

Satz 9.4 ist es nun möglich aus Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, zum selben Eigenwert F_0 eines Operators \hat{F} neue Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, zum selben Eigenwert F_0 zu bilden, welche orthogonal sind. Eine Methode, die es ermöglicht aus ursprünglich nicht orthogonalen (normierten) Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, orthogonale (normierte) Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, zu gewinnen, ist das sogenannte *Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren*. Die neuen orthogonalen (normierten) Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, ergeben sich dabei folgendermassen (für einen Beweis verweisen wir auf Anhang C)

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x, t), \tag{9.268}$$

$$\Psi'_2(x, t) = \psi_2(x, t) - \Psi_1(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(x, t) \psi_2(x, t) dx,$$

$$\Psi_2(x, t) = \frac{\Psi'_2(x, t)}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2'^*(x, t) \Psi_2'(x, t) dx}}, \tag{9.269}$$

⋮

$$\Psi'_n(x, t) = \psi_n(x, t) - \sum_{i=1}^{n-1} \Psi_i(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i^*(x, t) \psi_n(x, t) dx,$$

$$\Psi_n(x, t) = \frac{\Psi'_n(x, t)}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n'^*(x, t) \Psi_n'(x, t) dx}}. \tag{9.270}$$

Linearkombinationen zu unterschiedlichen Eigenwerten

Nachdem wir nun Linearkombinationen von Eigenfunktionen, die zum selben Eigenwert gehören, betrachtet haben, kommen wir nun zu Linearkombinationen von Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten. Genauer gesagt, gehen wir der Frage nach, welche physikalische Bedeutung ein Zustand hat, der eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zu verschiedenen Eigenwerten ist.

Wir starten als Beispiel mit den Eigenfunktionen des Hamilton-Operators für ein Teilchen im Potentialtopf. Nach Abschnitt 9.4.2 lauten die Eigenfunktionen

$$\psi_n(x, t) = u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \text{ für } 0 \leq x \leq L, \tag{9.271}$$

wobei

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \tag{9.272}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2. \tag{9.273}$$

Wir bilden nun eine Linearkombination der Wellenfunktionen $\psi_n(x, t)$

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= c_1 \psi_1(x, t) + c_2 \psi_2(x, t) + \dots + c_n \psi_n(x, t) \\ &= c_1 u_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 u_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} + \dots + c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \end{aligned} \tag{9.274}$$

Jeder Summand von (9.274) ist eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (9.94). Dementsprechend ist nach dem Superpositionsprinzip (siehe Abschnitt 9.4.1) auch die Linearkombination $\psi(x, t)$ eine Lösung und stellt damit einen Zustand dar, in dem sich das System befinden kann. Jedoch ist dieser Zustand nicht stationär, denn $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ ist zeitabhängig, da sich die Eigenwerte E_n nach Voraussetzung unterscheiden.

Wir kommen zu einer allgemeinen Betrachtung. Es sei F eine beliebige Observable und die Funktionen $\psi_1(x, t)$, $\psi_2(x, t)$, ..., $\psi_n(x, t)$ orthogonale Eigenfunktionen des entsprechenden Operators \hat{F} , die zu den Eigenwerten F_1, F_2, \dots, F_n gehören, sodass die Eigenwertgleichungen $\hat{F}\psi_i(x, t) = F\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, gelten. Wir betrachten eine beliebige Linearkombination der Eigenfunktionen

$$\psi(x, t) = c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t) + \dots + c_n\psi_n(x, t) \quad (9.275)$$

und bestimmen den Erwartungswert der Observablen F , wenn sich das Teilchen im Zustand $\psi(x, t)$ befindet. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} \psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^* \psi_1^*(x, t) + c_2^* \psi_2^*(x, t) + \dots + c_n^* \psi_n^*(x, t)) \\ &\quad \hat{F} (c_1 \psi_1(x, t) + c_2 \psi_2(x, t) + \dots + c_n \psi_n(x, t)) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^* \psi_1^*(x, t) + c_2^* \psi_2^*(x, t) + \dots + c_n^* \psi_n^*(x, t)) \\ &\quad (c_1 \hat{F} \psi_1(x, t) + c_2 \hat{F} \psi_2(x, t) + \dots + c_n \hat{F} \psi_n(x, t)) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^* \psi_1^*(x, t) + c_2^* \psi_2^*(x, t) + \dots + c_n^* \psi_n^*(x, t)) \\ &\quad (c_1 F_1 \psi_1(x, t) + c_2 F_2 \psi_2(x, t) + \dots + c_n F_n \psi_n(x, t)) dx \\ &= c_1^* c_1 F_1 + c_2^* c_2 F_2 + \dots + c_n^* c_n F_n, \end{aligned} \quad (9.276)$$

wobei wir im letzten Schritt die Normierung und die Orthogonalität der Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, benützt haben. Dieser Ausdruck führt zur folgenden Interpretation (siehe Postulat 3):

Wenn sich ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t) = c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t) + \dots + c_n\psi_n(x, t)$ befindet, der eine Linearkombination der orthogonalen Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ des Operators \hat{F} mit den Eigenwerten F_i ist, dann ist die Wahrscheinlichkeit w_i , dass eine Messung der Observablen F den Wert F_i liefert, gegeben durch $w_i = c_i^* c_i$.

Diese Interpretation gilt auch bei Entartung, vorausgesetzt, dass die zu einem entarteten Eigenwert gehörenden Eigenfunktionen orthogonal sind. Die Konstruktion solcher orthogonaler Eigenfunktionen haben wir zu Beginn des Abschnitts skizziert (Gram-Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren).

9.5.7 Entwicklung nach Eigenfunktionen

Die Fourier-Reihe ist die Entwicklung einer periodischen Funktion nach einem speziellen orthogonalen Funktionensystem. Das analoge gilt für die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators:

Satz 9.5 Die Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ eines hermiteschen Operators \hat{F} bilden auch ein orthogonales Funktionensystem. Erfüllt dieses System die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_i \psi_i^*(x', t) \psi_i(x, t) = \delta(x - x'), \quad (9.277)$$

so lässt sich jeder Zustand $\psi(x, t)$, in welchem sich das betrachtete quantenmechanische System befinden kann, als Linearkombination dieser Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ schreiben. Man spricht dann von einer Entwicklung der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ nach den Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ des Operators \hat{F} .

Beweis:

Es seien $\psi_i(x, t)$ Eigenfunktionen des Operators \hat{F} , welche die Vollständigkeitsrelation (9.277) erfüllen, dann gilt für einen beliebigen Zustand $\psi(x, t)$ des betrachteten quantenmechanischen Systems

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \psi(x', t) dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_i \psi_i^*(x', t) \psi_i(x, t) \psi(x', t) dx' \\ &= \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x', t) \psi(x', t) dx' \psi_i(x, t) \\ &= \sum_i c_i \psi_i(x, t) \quad \text{mit } c_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x, t) \psi(x, t) dx. \end{aligned} \quad (9.278)$$

□

Als Illustration von Satz 9.5 ist im Anhang D die Entwicklung einer Dreiecksfunktion nach den Eigenfunktionen des Hamiltonoperators des Teilchens im Potentialtopf ausgeführt.

Zusammen mit der Interpretation aus dem letzten Abschnitt 9.5.6, lässt sich nun Postulat 3 folgendermassen präzisieren:

Das Ergebnis einer einzelnen Messung einer Observablen F ist ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{F} . Erhält man bei einer Messung den Eigenwert F_0 , so geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion $\psi(x, t)$ über. D.h. befindet sich das System vor der Messung einer Observablen F nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} , so ändert die Messung den

Zustand des System, sodass sich das System nach der Messung in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} befindet. Die Wahrscheinlichkeit w_i , welches Messresultat resultiert und damit welcher Eigenzustand das System nach der Messung einnimmt, ist bestimmt durch den Betrag der Koeffizienten c_i der Entwicklung des Zustands vor der Messung nach den Eigenfunktionen des Operators \hat{F} . Hingegen bleibt der Zustand des Systems unverändert, wenn dieser bereits vor der Messung der Observablen F einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} entspricht.

9.6 Verallgemeinerung auf Systeme mit vielen Freiheitsgraden

Der Formalismus, der hier am Beispiel der Bewegung eines einzelnen Teilchens (Massenpunkt) entwickelt wurde, gilt auch für Systeme mit beliebig vielen Freiheitsgraden. An die Stelle von x und p_x können auch die kanonisch konjugierten Variablen q_k und p_k treten. Ausser Ort und Impuls eines Teilchens können Paare von konjugierten Variablen auch andere physikalische Grössen beschreiben, wie zum Beispiel elektrische Ladung und magnetischer Fluss oder Teilchenzahl und Phase. Der Formalismus der Quantenmechanik gilt also sehr allgemein im Konfigurationsraum eines physikalischen Systems.

9.7 Zusammenfassung

- Die Grundlagen der Quantenmechanik wurde in den Jahren 1925 und 1926 entwickelt. Die Theorie basiert auf einigen wenigen grundlegenden Postulaten, mit deren Hilfe alle Beobachtungen von quantenmechanischen Phänomenen in der Natur korrekt beschrieben werden können. Bis heute hat noch kein Experiment den Vorhersagen der Quantenmechanik widersprochen.
- Das **erste Postulat** der Quantenmechanik lautet: Zu einem Teilchen (Massepunkt) gehört eine eindeutige, quadratisch integrable, im Allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\psi(x, t)$. Sie beschreibt den Zustand des Teilchens. Dabei gibt $\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ die Wahrscheinlichkeit an das Teilchen zur Zeit t zwischen x und $x + dx$ anzutreffen. Die Grösse $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ wird daher als Wahrscheinlichkeitsdichte bezeichnet.
- Die Wellenfunktion erfüllt die Bedingung $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx = 1$.
- Experimentell erfassbare Grössen werden in der Quantenmechanik durch Erwartungswerte charakterisiert. Der Erwartungswert einer Funktion $f(x, t)$, die eine physikalische Messgrösse beschreibt, ist für einen bestimmten Zeitpunkt t gegeben durch $\langle f(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)f(x, t)\psi(x, t)dx$.
- Anstelle der Ortskoordinate x kann auch der entsprechende Impuls p als Variable für die Wellenfunktion eingeführt werden und somit von der Ortsraumdarstellung in die Impulsraumdarstellung übergehen.

- Im Gegensatz zur klassischen Mechanik sind in der Quantenmechanik der Ort x und der Impuls p eines Teilchens nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmt. Diese Eigenschaft der Quantenmechanik wird als Heisenberg'sche Unschärferelation bezeichnet und lautet mathematisch ausgedrückt $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar$, wobei allgemein die Unschärfe Δf einer Grösse f bestimmt ist durch die Standardabweichung, die durch die Wurzel des Erwartungswerts der Quadrate der Abweichungen vom Erwartungswert gegeben ist
$$\Delta f = \sqrt{\langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle}.$$
- In der Quantenmechanik wird jede physikalische Grösse (Observable) durch einen entsprechenden Operator dargestellt. Ein quantenmechanischer Operator \hat{F} ist dabei definiert durch die Bedingung, dass für eine Funktion $\psi(x, t) \in L^2$ gilt $\hat{F}\psi = \varphi(x, t) \in L^2$. Dabei bezeichnet L^2 den Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen. Zudem sind quantenmechanische Operatoren linear, erfüllen das Distributiv- und Assoziativgesetz, erfüllen im Allgemeinen das Kommutativgesetz nicht und besitzen reelle Erwartungswerte.
- Ist die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ eines Teilchens bekannt, so ist der Zustand des Teilchens vollständig charakterisiert. Insbesondere ist es möglich die Erwartungswerte beliebiger Observablen auszurechnen und somit das Verhalten des Teilchens in einem Experiment vorauszusagen. Wie nun aber die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ bestimmt wird, beantwortet das **zweite Postulat** der Quantenmechanik: Die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ ist eine Lösung der Differentialgleichung

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (9.279)$$

Diese Gleichung wird nach Schrödinger die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung genannt.

- Ein Zustand, der dadurch gekennzeichnet ist, dass die Wahrscheinlichkeit $\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ das Teilchen zwischen x und $x + dx$ anzutreffen nicht von der Zeit t abhängt, heisst stationärer Zustand und hat im Allgemeinen die Form $\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}$. Für die Funktion $u(x, y, z)$ gilt dann die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(x, y, z) + V(x, y, z)u(x, y, z) = Eu(x, y, z). \quad (9.280)$$

- Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung erfüllen im Allgemeinen folgende Eigenschaften: $\psi(x, t)$ und $u(x)$ sind normierbar, streben mit $x \rightarrow \pm\infty$ genügend rasch gegen null (dasselbe gilt auch für die Ableitungen nach x) und sind für alle x stetig, eindeutig und endlich (dasselbe gilt auch für die Ableitungen nach x). Zudem gilt das Superpositionsprinzip, d.h. eine beliebige Linearkombination von Lösungen ist ebenfalls eine Lösung.

- Für ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t)$ ist der Erwartungswert $\langle F \rangle$ einer Observablen F scharf bestimmt, wenn bei wiederholter Messung an identisch gleich präparierten Teilchen immer der selbe Wert F_0 resultiert. Mathematisch bedeutet das, dass die Unschärfe ΔF verschwinden muss $(\Delta F)_\psi = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle_\psi} = 0$. Der Index ψ soll daran erinnern, dass diese Beziehung für ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t)$ gilt, denn es hängt vom Zustand ab, ob der Erwartungswert einer Observable einen scharfen Wert annimmt oder nicht.

Mit Hilfe des Operatorformalismus lässt sich eine einfache Bedingung angeben, wann der Erwartungswert $\langle F \rangle_\psi$ einer Observable F im Zustand $\psi(x, t)$ einen scharfen Wert besitzt: Sei der Zustand jedes betrachteten Teilchens beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im Ortsraum, dann gilt: Der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_\psi$ einer Observable $F(x, p)$ nimmt genau dann den scharfen Wert F_0 an, wenn die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ die Gleichung $\hat{F}\psi(x, t) = F_0\psi(x, t)$ erfüllt. Diese Gleichung wird als Eigenwertgleichung bezeichnet. Sie besagt, dass sich die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ bis auf den Faktor F_0 reproduziert, wenn man den Operator \hat{F} auf sie anwendet. Eine Wellenfunktion $\psi(x, t)$, die diese Gleichung erfüllt, ist eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} . Der scharfe Wert F_0 , den der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_\psi$ annimmt, wird Eigenwert des Operators \hat{F} genannt.

- Das **dritte Postulat** der Quantenmechanik lautet: Das Ergebnis einer einzelnen Messung einer Observablen F ist ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{F} . Erhält man bei einer Messung den Eigenwert F_0 , so geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion $\psi(x, t)$ über. D.h. befindet sich das System vor der Messung einer Observablen F nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} , so ändert die Messung den Zustand des System, sodass sich das System nach der Messung in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} befindet. Hingegen bleibt der Zustand des Systems unverändert, wenn dieser bereits vor der Messung der Observablen F einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} entspricht.
- Die Frage, ob Zustände $\psi(x, t)$ existieren, für die die Erwartungswerte von zwei Observablen gleichzeitig scharf sind, beantwortet folgender Satz: Die Erwartungswerte von zwei Observablen F und G eines Teilchens im Zustand $\psi(x, t)$ sind dann und nur dann gleichzeitig scharf, wenn die Anwendung des Kommutators der entsprechenden Operatoren \hat{F} und \hat{G} auf die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ null ergibt, d.h. $[\hat{F}, \hat{G}]\psi(x, t) = 0$.
- Zwei Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ nennt man im Variablenbereich $a \leq x \leq b$ orthogonal, wenn gilt $\int_a^b f^*(x)g(x)dx = 0$. Für die Wellenfunktionen $\psi(x, t)$ gilt der folgende Satz: Es seien $\psi_m(x, t)$ und $\psi_n(x, t)$ Eigenfunktionen des hermiteschen Operators \hat{F} , die zu verschiedenen Eigenwerten F_m und F_n gehören. Dann sind $\psi_m(x, t)$ und $\psi_n(x, t)$ orthogonal in ihrem räumlichen Existenzgebiet, d.h. $\int \psi_m^*(x, t)\psi_n(x, t)dx = 0$ für $m \neq n$.
- Häufig gehören zu einem Eigenwert F_m eines Operators \hat{F} mehrere ver-

schiedene Eigenfunktionen. In diesem Fall spricht man von Entartung. In diesem Fall gilt der folgende Satz: Eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 ist wieder eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 .

- Eigenfunktionen zum selben Eigenwert sind nicht notwendigerweise orthogonal. Im Allgemeinen ist es jedoch sehr hilfreich mit orthogonalen Eigenfunktionen rechnen zu können. Nach dem eben aufgeführten Satz ist es nun möglich aus Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, zum selben Eigenwert F_0 eines Operators \hat{F} neue Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, zum selben Eigenwert F_0 zu bilden, welche orthogonal sind. Eine Methode, die dies ermöglicht ist das Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren.
- Auch ein Zustand, der eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zu verschiedenen Eigenwerten ist, hat eine physikalische Bedeutung, denn es gilt: Wenn sich ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t) = c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t) + \dots + c_n\psi_n(x, t)$ befindet, der eine Linearkombination der orthogonalen Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ des Operators \hat{F} mit den Eigenwerten F_i ist, dann ist die Wahrscheinlichkeit w_i , dass eine Messung der Observablen F den Wert F_i liefert, gegeben durch $w_i = c_i^*c_i$.
- Es ist möglich Wellenfunktionen nach Eigenfunktionen zu entwickeln, denn es gilt der folgende Satz: Die Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ eines hermiteschen Operators \hat{F} bilden auch ein orthogonales Funktionensystem. Erfüllt dieses System die Vollständigkeitsrelation $\sum_i \psi_i^*(x', t)\psi_i(x, t) = \delta(x - x')$, so lässt sich jeder Zustand $\psi(x, t)$, in welchem sich das betrachtete quantenmechanische System befinden kann, als Linearkombination dieser Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ schreiben. Man spricht dann von einer Entwicklung der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ nach den Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ des Operators \hat{F} .
- Mit diesem Satz lässt sich das dritte Postulat der Quantenmechanik präzisieren: Das Ergebnis einer einzelnen Messung einer Observablen F ist ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{F} . Erhält man bei einer Messung den Eigenwert F_0 , so geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion $\psi(x, t)$ über. D.h. befindet sich das System vor der Messung einer Observablen F nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} , so ändert die Messung den Zustand des System, sodass sich das System nach der Messung in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} befindet. Die Wahrscheinlichkeit w_i , welches Messresultat resultiert und damit welcher Eigenzustand das System nach der Messung einnimmt, ist bestimmt durch den Betrag der Koeffizienten c_i der Entwicklung des Zustands vor der Messung nach den Eigenfunktionen des Operators \hat{F} . Hingegen bleibt der Zustand des Systems unverändert, wenn dieser bereits vor der Messung der Observablen F einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} entspricht.
- Der Formalismus, der hier am Beispiel der Bewegung eines einzelnen Teilchens (Massenpunkt) entwickelt wurde, gilt auch für Systeme mit beliebig

vielen Freiheitsgraden.

Kapitel 10

Der quantenmechanische harmonische Oszillator

In diesem Kapitel befassen wir uns mit den quantenmechanischen Eigenschaften eines der grundlegenden Modelle der Physik, dem *harmonischen Oszillator*. Ein harmonischer Oszillator ist ein physikalisches System in dem eine charakteristische Grösse, wie z.B. die Koordinate eines Teilchens, eine sinusförmige Zeitabhängigkeit zeigt, d.h. eine harmonische Schwingung ausführt. Diese Oszillationen werden durch eine in dieser charakteristischen Grösse linearen Rückstellkraft im Zusammenspiel mit der Trägheit des Systems verursacht. In der Natur gibt es sehr viele physikalische Systeme, die in guter Näherung als ein solches lineares Schwingungssystem betrachtet werden können: Mechanische Oszillatoren, z.B. das Federpendel, elektrische Oszillatoren, z.B. der LC-Schwingkreis, die Schwingungen zweiatomiger Moleküle oder Gitterschwingungen in einem Festkörper, um nur einige zu nennen.

Hier beginnen wir mit der klassischen Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators, die wir für das Beispiel des Federpendels formulieren. Es folgt dann die quantenmechanische Behandlung des harmonischen Oszillators, bei der wir die zugehörige Schrödinger-Gleichung lösen. Zum Abschluss des Kapitels vergleichen wir den klassischen mit dem quantenmechanischen Oszillator.

10.1 Klassische Bewegungsgleichung

Wir betrachten ein Federpendel (siehe Abb. 10.1), d.h. ein Teilchen der Masse m , welches an einer Feder mit Federkonstante k befestigt ist und Oszillationen um die Ruhelage $x = 0$ ausführt. Diese Schwingung um die Ruhelage kommt aufgrund der durch die Feder bewirkten linearen Kraft zustande. Diese Kraft

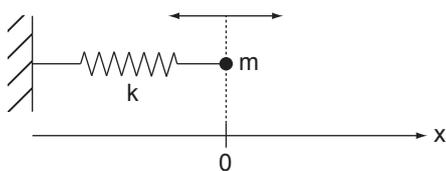


Abb. 10.1: Federpendel: Ein Teilchen der Masse m ist an einer Feder mit Federkonstante k befestigt und führt Oszillationen um die Ruhelage $x = 0$ aus.

wird *Rückstellkraft* genannt, da sie in jedem Punkt auf der x -Achse in Richtung Ruhelage zeigt und somit bei einer Auslenkung das Teilchen wieder in Richtung der Ruhelage zwingt. Für ein Federpendel ist diese Rückstellkraft F_k durch das sogenannte *Hookesche Gesetz* gegeben

$$F_k = -kx. \quad (10.1)$$

Sie ist wie bereits erwähnt linear in der Auslenkung x aus der Ruhelage. Die klassische Bewegungsgleichung lautet demzufolge

$$m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + kx = 0. \quad (10.2)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist eine harmonische Schwingung bei der Kreisfrequenz $\omega = \sqrt{k/m}$

$$x(t) = A \sin(\omega t + \phi) \quad (10.3)$$

mit Amplitude A und der Phase ϕ , die von den Anfangsbedingungen abhängen. Die Lösung verdeutlicht noch einmal, dass bei einem harmonischen Oszillator die Frequenz $\nu = \omega/2\pi$ unabhängig von der Amplitude A ist.

Diese grundlegenden Eigenschaften, die wir am Beispiel des Federpendels kennengelernt haben, liegen allen Systemen, welche durch ein Oszillatormodell beschrieben werden können, zugrunde. Jedes solche System führt eine Oszillation um eine Ruhelage, bewirkt durch eine lineare Rückstellkraft, aus, wobei die Oszillationsfrequenz für genügend kleine Auslenkungen unabhängig von der Amplitude ist.

Wie zu Beginn erwähnt, lassen sich zahlreiche physikalische Systeme angenähert als harmonische Oszillatoren beschreiben. Jedoch sind in realen Systemen die Rückstellkräfte häufig bei grösseren Auslenkungen nicht linear. Diese Nichtlinearität führt zu anharmonischen Oszillationen, bei denen das System Schwingungen bei einer Reihe von Frequenzen ausführt. In anderen Worten ein idealer harmonischer Oszillator, bei dem die Rückstellkraft für beliebig grosse Auslenkungen linear in der Auslenkung aus der Ruhelage ist, existiert nicht. Dennoch kann die Rückstellkraft auch für solche Systeme für genügend kleine Auslenkungen aus der Ruhelage linearisiert werden. Mathematisch bedeutet diese Linearisierung, dass die Rückstellkraft $F(x)$ um die Ruhelage x_0 bis zum linearen Term (Taylor-)entwickelt wird

$$\begin{aligned} F(x) &= F(x_0) + \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \right|_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots \\ &\sim \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=x_0} (x - x_0), \end{aligned} \quad (10.4)$$

wobei wir verwendet haben, dass in der Ruhelage x_0 keine Kraft auf das Teilchen wirkt, d.h. $F(x_0) = 0$. Wenn alle anderen Terme in dieser Entwicklung ausreichend klein sind, so lässt sich das System in guter Näherung als harmonischer Oszillator beschreiben.

10.2 Quantenmechanische Lösung

10.2.1 Formulierung der Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t). \quad (10.5)$$

Das Potential $V(x, t)$ (siehe Abb. 10.2) ergibt sich dabei aus der Integration über die Rückstellkraft $F_k = -kx$

$$V(x, t) = - \int_0^x F(x') dx' = \int_0^x kx' dx' = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2. \quad (10.6)$$

Wir sehen, dass das Potential zeitunabhängig ist und betrachten deshalb die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} u(x) = Eu(x) \text{ mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (10.7)$$

Diese Differentialgleichung lässt sich z.B. mit Hilfe eines Potenzreihenansatzes lösen (siehe Anhang E).

Hier betrachten wir jedoch eine häufig verwendete Lösungsmethode, bei der zunächst sogenannte Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eingeführt werden. Dazu schreiben wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung um, indem wir die beiden Operatoren

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (10.8)$$

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (10.9)$$

eingeführen, wobei $x_0 = \sqrt{\hbar/\omega m}$ die Oszillatoramplitude normiert.

Bevor wir die Schrödinger-Gleichung umschreiben, gehen wir zuerst auf einige wichtige Eigenschaften der Operatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger ein:

- a) Die beiden Operatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger sind nicht hermitesch. Jedoch ist \hat{b}^\dagger der adjungierte Operator zu \hat{b} :

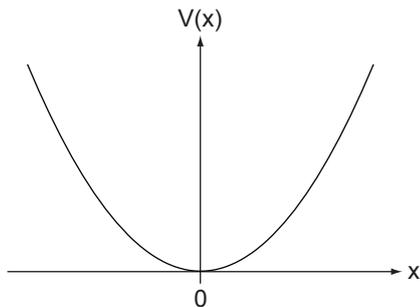


Abb. 10.2: Harmonisches Potential $V(x) = \omega^2 x^2 / 2$ als Funktion von x .

Definition 10.1 \hat{F}^\dagger heisst zu \hat{F} **adjungierter Operator**, wenn für beliebige Wellenfunktionen $\psi(x, t)$ und $\varphi(x, t)$ gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{F} \varphi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{F}^\dagger \psi(x, t) \right)^* \varphi(x, t) dx. \quad (10.10)$$

Dass die Relation (10.10) für die Operatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger erfüllt ist, zeigt folgende Rechnung

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{b} \varphi(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi(x, t) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{x}{x_0} \varphi(x, t) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x_0 \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x, t) dx \right). \end{aligned} \quad (10.11)$$

Partielle Integration für den zweiten Summanden liefert

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x_0 \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x, t) dx &= \underbrace{\psi^*(x, t) x_0 \varphi(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} x_0 \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \varphi(x, t) dx \end{aligned} \quad (10.12)$$

Einsetzen in (10.11) ergibt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{b} \varphi(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) \right)^* \varphi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{b}^\dagger \psi(x, t) \right)^* \varphi(x, t) dx. \end{aligned} \quad (10.13)$$

b) Die Operatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger erfüllen die folgenden Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{b}^\dagger, \hat{b}] \psi(x, t) &= \hat{b}^\dagger \hat{b} \psi(x, t) - \hat{b} \hat{b}^\dagger \psi(x, t) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{x}{x_0} \psi(x, t) + x_0 \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{x}{x_0} \psi(x, t) - x_0 \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{x_0^2} \psi(x, t) + x \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \psi(x, t) \right. \\ &\quad \left. - x \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - x_0^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial^2 x} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{x_0^2} \psi(x, t) - x \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + \psi(x, t) \right. \\ &\quad \left. + x \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - x_0^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial^2 x} \right) \\ &= -\psi(x, t). \end{aligned} \quad (10.14)$$

D.h. es gilt $[\hat{b}^\dagger, \hat{b}] = -1$. Analog folgen

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1, \quad (10.15)$$

$$[\hat{b}, \hat{b}] = 0, \quad (10.16)$$

$$[\hat{b}^\dagger, \hat{b}^\dagger] = 0. \quad (10.17)$$

Wir kommen nun zurück zu unserem ursprünglichen Ziel, der Formulierung der Schrödinger-Gleichung (10.7) mit Hilfe der Operatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger . Wir berechnen dazu den Ausdruck $\hbar\omega\hat{b}^\dagger\hat{b}u(x)$. Es ergibt sich mit $x_0 = \sqrt{\hbar/\omega m}$ (siehe Berechnung (10.14))

$$\begin{aligned} \hbar\omega\hat{b}^\dagger\hat{b}u(x) &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{x^2}{x_0^2}u(x) - u(x) - x_0^2\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}u(x) - \frac{\hbar\omega}{2}u(x). \end{aligned} \quad (10.18)$$

Damit hat die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators ausgedrückt in den Operatoren \hat{b} und \hat{b}^\dagger die folgende Form

$$\hbar\omega \left(\hat{b}^\dagger\hat{b} + 1/2 \right) u(x) = Eu(x). \quad (10.19)$$

Wir gehen noch einen Schritt weiter und schreiben

$$\underbrace{\hat{b}^\dagger\hat{b}}_{\equiv \hat{n}} u(x) = \underbrace{\left(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right)}_{\equiv n} u(x). \quad (10.20)$$

D.h. die Eigenfunktionen $u(x)$ des Hamilton-Operators sind Eigenfunktionen des Operators $\hat{n} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$ zum Eigenwert $n = E/(\hbar\omega) - 1/2$. Später werden wir erkennen, dass der Erwartungswert des Operators \hat{n} der Anzahl n der Quanten $\hbar\omega$ des harmonischen Oszillators entspricht.

Unser nächstes Ziel ist nun die Bestimmung der Eigenfunktionen $u_n(x)$ und der entsprechenden Eigenwerte n des Operators \hat{n} . Die Eigenfunktionen $u_n(x)$ sind identisch mit denen des Hamilton-Operators und die entsprechenden Energieeigenwerte E_n ergeben sich dann zu

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (10.21)$$

Dabei haben wir die Quantenzahl n für die Eigenfunktionen $u_n(x)$ und die Energieeigenwerte E_n eingeführt.

10.2.2 Berechnung des Grundzustands

Wir bestimmen den Grundzustand des Operators \hat{n} , d.h. die Eigenfunktion $u_n(x)$ zum niedrigst möglichen Eigenwert n . Dazu müssen wir als erstes den

niedrigst möglichen Eigenwert bestimmen. Da der Operator \hat{b}^\dagger der adjungierte Operator von \hat{b} ist, gilt

$$\begin{aligned} n &= n \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) n u_n(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \hat{n} u_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \hat{b}^\dagger \hat{b} u_n(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{b} u_n(x))^* \hat{b} u_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{b} u_n(x)|^2 dx \\ &\geq 0. \end{aligned} \tag{10.22}$$

Demzufolge ist der niedrigstmögliche Eigenwert $n = 0$. Nach (10.22) muss dann für die entsprechende Eigenfunktion $u_0(x)$ gelten $\hat{b} u_0(x) = 0$, d.h. wir erhalten folgende Differentialgleichung zur Bestimmung des Grundzustands $u_0(x)$

$$\left(\frac{x}{x_0^2} + \frac{\partial}{\partial x} \right) u_0(x) = 0. \tag{10.23}$$

Wir wählen den Ansatz $u_0(x) = e^{sx^2}$ und erhalten für die Bestimmung der Konstanten s die Gleichung $1/x_0^2 + 2s = 0$ mit der Lösung $s = -1/2x_0^2$. Damit ergibt sich

$$u_0(x) = C e^{-1/2(x/x_0)^2}. \tag{10.24}$$

Die Konstante C ergibt sich aus der Normierungsbedingung

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} u_0^*(x) u_0(x) dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x/x_0)^2} dx = C^2 \sqrt{\pi} x_0 \tag{10.25}$$

zu $C = (\sqrt{\pi} x_0)^{-1/2}$. Damit erhalten wir für den Grundzustand $u_0(x)$ den folgenden Ausdruck (siehe Abb. 10.3)

$$u_0(x) = (\sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} e^{-1/2(x/x_0)^2}. \tag{10.26}$$

10.2.3 Berechnung der restlichen Eigenzustände

Zur Bestimmung der weiteren Eigenfunktionen $u_n(x)$ zeigen wir zwei kleine Sätze.

Satz 10.1 *Ist $u_n(x)$ Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert n , so ist $\hat{b} u_n(x)$ eine Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $n - 1$, d.h. der Operator \hat{b} erniedrigt den Eigenwert n um 1. Daher wird \hat{b} **Vernichtungsoperator** genannt. Für die normierte Eigenfunktion $u_{n-1}(x)$ gilt*

$$u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{b} u_n(x), \quad n \geq 1. \tag{10.27}$$

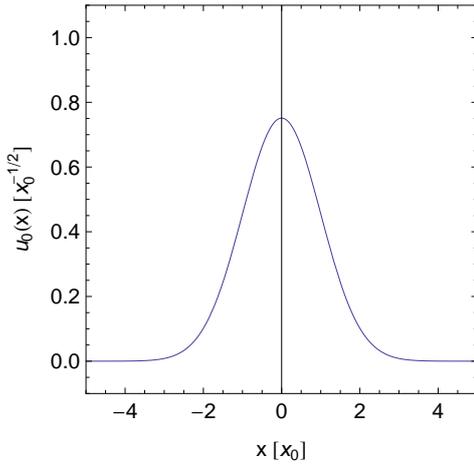


Abb. 10.3: Der Grundzustand des harmonischen Oszillators $u_0(x)$ als Funktion von x .

Beweis:

Wir wenden den Operator \hat{b} auf die Eigenwertgleichung (10.20) an

$$\hat{b}\hat{n}u_n(x) = \hat{b}nu_n(x). \quad (10.28)$$

Mit $\hat{n} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$ und (10.15) erhalten wir

$$\hat{n}\hat{b}u_n(x) = (n-1)\hat{b}u_n(x). \quad (10.29)$$

Mit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{b}u_n(x))^* (\hat{b}u_n(x)) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* \hat{b}^\dagger \hat{b} u_n(x) dx \\ &= n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* u_n(x) dx}_{=1} \\ &= n \end{aligned} \quad (10.30)$$

folgt für die normierte Eigenfunktion $u_{n-1}(x)$

$$u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{b}u_n(x), \quad n \geq 1. \quad (10.31)$$

□

Der entsprechende Satz für den Operator \hat{b}^\dagger lautet:

Satz 10.2 *Ist $u_n(x)$ Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert n , so ist $\hat{b}^\dagger u_n(x)$ eine Eigenfunktion von \hat{n} zum Eigenwert $n+1$, d.h. der Operator \hat{b}^\dagger erhöht den Eigenwert n um 1. Daher wird \hat{b}^\dagger **Erzeugungsoperator** genannt. Für die normierte Eigenfunktion $u_{n+1}(x)$ gilt*

$$u_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{b}^\dagger u_n(x), \quad n \geq 0. \quad (10.32)$$

Beweis:

Wir wenden den Operator \hat{b}^\dagger auf die Eigenwertgleichung (10.20) an

$$\hat{b}^\dagger \hat{n} u_n(x) = \hat{b}^\dagger n u_n(x). \quad (10.33)$$

Mit $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$ und (10.14) erhalten wir

$$\hat{n} \hat{b}^\dagger u_n(x) = (n+1) \hat{b}^\dagger u_n(x). \quad (10.34)$$

Mit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{b}^\dagger u_n(x) \right)^* \left(\hat{b}^\dagger u_n(x) \right) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* \hat{b} \hat{b}^\dagger u_n(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* \left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + 1 \right) u_n(x) dx \end{aligned} \quad (10.35)$$

$$\begin{aligned} &= (n+1) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* u_n(x) dx}_{=1} \\ &= n+1 \end{aligned} \quad (10.36)$$

folgt für die normierte Eigenfunktion $u_{n+1}(x)$

$$u_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{b}^\dagger u_n(x), \quad n \geq 0. \quad (10.37)$$

□

Nach Satz 10.2 ergeben sich nun die Eigenfunktionen $u_n(x)$ zu den Eigenwerten $n = 1, 2, 3, \dots$ durch Anwendung von \hat{b}^\dagger auf $u_0(x)$

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b}^\dagger u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^\dagger \right)^n u_0(x), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (10.38)$$

Wir zeigen nun, dass wir damit alle Eigenfunktionen gefunden haben, d.h. wir beweisen den folgenden Satz:

Satz 10.3 *Mit $u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^\dagger \right)^n u_0(x)$, $n \in \mathbb{N}_0$, haben wir alle Eigenfunktionen des Operators \hat{n} gefunden.*

Widerspruchsbeweis:

Wir nehmen an, dass ein Eigenwert $n = m + \alpha$ mit $0 < \alpha < 1$ und $m \in \mathbb{N}$ existiert und zeigen, dass diese Annahme auf einen Widerspruch führt. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{n} u_n(x) = (m + \alpha) u_n(x). \quad (10.39)$$

Mit (10.27) folgt

$$\hat{n} \left(\hat{b}^m u_n(x) \right) = \alpha \left(\hat{b}^m u_n(x) \right), \quad (10.40)$$

$$\hat{n} \left(\hat{b}^{m+1} u_n(x) \right) = \underbrace{(\alpha - 1)}_{<0} \left(\hat{b}^{m+1} u_n(x) \right). \quad (10.41)$$

Dies steht im Widerspruch zur Positivität der Eigenwerte von \hat{n} .

□

10.2.4 Zusammenfassung der Lösung - Hermite-Polynome

Fassen wir die Abschnitte 10.2.2 und 10.2.3 zusammen:

Die Eigenfunktionen $u_n(x)$ des Hamilton-Operators des harmonischen Oszillators lauten (siehe Abb. 10.4)

$$u_n(x) = (n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} (\hat{b}^\dagger)^n e^{-1/2(x/x_0)^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (10.42)$$

mit den Energieeigenwerten (siehe Tab. 10.1)

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (10.43)$$

Insbesondere sind die Eigenfunktionen $u_n(x)$ reell und je grösser die Anzahl der Nullstellen der Eigenfunktionen ist, umso höher liegt der entsprechende Energieeigenwert. Diese Regel gilt allgemein bei eindimensionalen Problemen.

Die Eigenfunktionen $u_n(x)$ lassen sich durch die sogenannten *Hermite-Polynome* $H_n(x)$ ausdrücken (siehe Anhang I.1). Es gilt

$$u_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} H_n(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2/2}, \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (10.44)$$

wobei die Hermite-Polynome $H_n(x)$ gegeben sind durch (siehe Tab. 10.1)

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}. \quad (10.45)$$

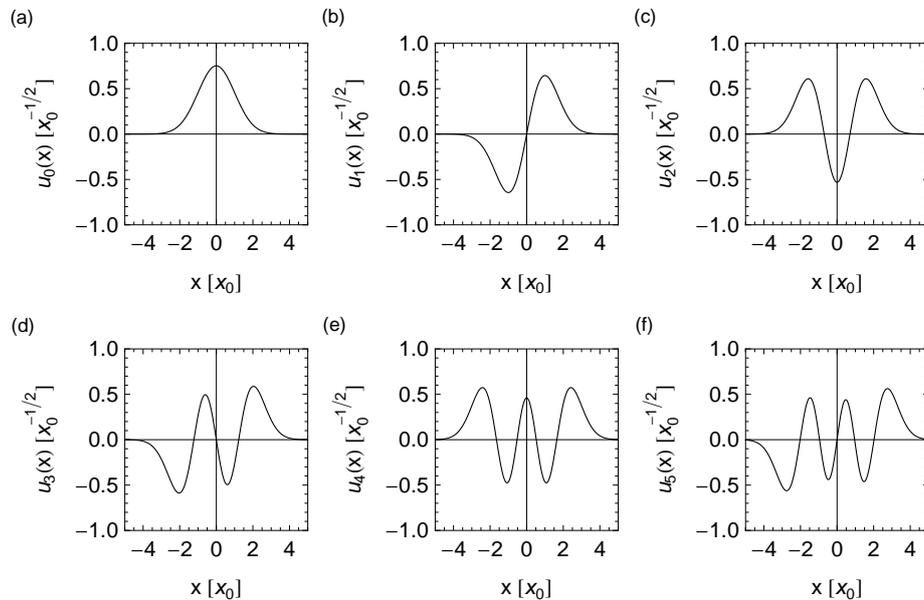


Abb. 10.4: Die Eigenfunktionen $u_n(x)$ des harmonischen Oszillators für die Quantenzahlen (a) $n = 0$, (b) $n = 1$, (c) $n = 2$, (d) $n = 3$, (e) $n = 4$ und (f) $n = 5$ als Funktion der Ortskoordinate x .

n	$H_n(x)$	E_n
0	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2x$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4x^2 - 2$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8x^3 - 12x$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$
4	$16x^4 - 48x^2 + 12$	$\frac{9}{2}\hbar\omega$
5	$32x^5 - 160x^3 + 120x$	$\frac{11}{2}\hbar\omega$
\vdots	\vdots	\vdots
n	$(-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}$	$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

Tab. 10.1: Übersicht über die Hermite-Polynome $H_n(x)$ und die entsprechenden Energieeigenwerten E_n des harmonischen Oszillators.

10.2.5 Die Nullpunktenergie

Die niedrigste Energie des harmonischen Oszillators ist klassisch $E = 0$, quantenmechanisch $E = \hbar\omega/2$, d.h. im Gegensatz zur klassischen Mechanik erhalten wir in der Quantenmechanik eine endliche Grundzustandsenergie, auch *Nullpunktenergie* genannt. In diesem Abschnitt gehen wir nun genauer auf diese Nullpunktenergie ein.

Wir bestimmen als erstes die Orts- und Impulsunschärfe Δx und Δp . Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ des Ortes erhalten wir

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) x u_n(x) dx \propto \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) u_n(x) dx = 0. \quad (10.46)$$

Demzufolge ergibt sich für die Ortsunschärfe Δx

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) x^2 u_n(x) dx} \\ &= \sqrt{\frac{x_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) (\hat{b}^2 + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^{\dagger 2}) u_n(x) dx} \\ &= \sqrt{\frac{x_0^2}{2} (0 + (n+1) + n + 0)} = x_0 \sqrt{n + \frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (10.47)$$

Analog erhalten wir für den Erwartungswert des Impulses $\langle p \rangle$ und die Impulsunschärfe Δp

$$\langle p \rangle = 0 \quad (10.48)$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{x_0} \sqrt{n + \frac{1}{2}}. \quad (10.49)$$

Damit erhalten wir im Grundzustand für die Orts- und Impulsunschärfe

$$\Delta x = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \quad (10.50)$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}x_0}. \quad (10.51)$$

Somit ist das Teilchen im Grundzustand nicht bei $x = 0$ lokalisiert, sondern ist über einen endlichen Bereich „verschmiert“, verbunden mit einem endlichen Impuls. Diesen Sachverhalt wird *Nullpunktschwankung* genannt.

Wir leiten zusätzlich eine Ungleichung für die Nullpunktsenergie ausgehend von der Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (10.52)$$

her. Die Wellenfunktion werden wir dazu nicht explizit berechnen. Aus Symmetriegründen gilt für den Grundzustand $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ und somit

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (10.53)$$

Damit erhalten wir für die Energie die folgende Ungleichung

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle \geq \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\langle p^2 \rangle}. \quad (10.54)$$

Wir bestimmen das Minimum der rechten Seite der Ungleichung indem wir die Ableitung nach $\langle p^2 \rangle$ null setzen

$$\frac{1}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{(\langle p^2 \rangle_{\min})^2} = 0. \quad (10.55)$$

Auflösen nach $\langle p^2 \rangle_{\min}$ ergibt

$$\langle p^2 \rangle_{\min} = \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (10.56)$$

Damit lautet die Ungleichung für die Energie

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (10.57)$$

Somit wird klar, dass die Nullpunktsenergie der kleinste Energiewert ist, der mit der Unschärferelation vereinbar ist.

10.2.6 Kohärente Zustände

Für die stationären Lösungen $u_n(x)$ gilt nach (10.46) $\langle x \rangle = 0$, d.h. in diesen stationären Zuständen führt der harmonische Oszillator einzeln keine Oszillation aus. Sie haben daher insbesondere nichts mit der klassischen Oszillationsbewegung gemeinsam. Das Ziel ist es nun Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu bestimmen, die eine periodische Oszillation darstellen, d.h. Zustände in denen der Erwartungswert des Ortes nicht verschwindet, sondern bzgl. der

Zeitabhängigkeit mit der klassischen Oszillationsbewegung übereinstimmt. Wir gehen dazu von den Eigenzuständen $u_\alpha(x)$ des Vernichtungsoperators \hat{b} aus

$$\hat{b}u_\alpha(x) = \alpha u_\alpha(x) \text{ mit } \alpha \in \mathbb{C}. \quad (10.58)$$

Wir entwickeln diese Zustände $u_\alpha(x)$ nach den stationären Zuständen $u_n(x)$. Nach Abschnitt 9.5.7 erhalten wir

$$u_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x), \quad (10.59)$$

wobei für die Entwicklungskoeffizienten c_n mit (9.278), (10.38), (10.58) und der Eigenschaft, dass \hat{b} der adjungierte Operator von \hat{b}^\dagger ist, gilt

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x) u_\alpha(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^\dagger\right)^n u_0(x) u_\alpha(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} u_0(x) \hat{b}^n u_\alpha(x) dx \\ &= \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_0(x) u_\alpha(x) dx}_{\equiv C}. \end{aligned} \quad (10.60)$$

Damit folgt

$$u_\alpha(x) = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n(x). \quad (10.61)$$

Die Konstante C ergibt sich aus der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} u_\alpha^*(x) u_\alpha(x) dx \\ &= C^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \\ &= C^2 e^{|\alpha|^2}. \end{aligned} \quad (10.62)$$

Damit erhalten wir

$$C = e^{-|\alpha|^2/2}. \quad (10.63)$$

Einsetzen in (10.61) liefert für die Zustände $u_\alpha(x)$ die folgende Entwicklung

$$u_\alpha(x) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n(x). \quad (10.64)$$

Die Zustände $\psi_\alpha(x, t)$ erhalten wir durch die Zeitentwicklung der stationären Zustände $u_n(x)$

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (10.65)$$

Mit $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ ergibt sich

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} u_n(x) e^{-i\omega t/2}. \quad (10.66)$$

Die Zustände $\psi_\alpha(x, t)$ werden *kohärente Zustände*¹ genannt und sind Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung. Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ ergibt sich mit $\alpha \equiv |\alpha| e^{i\delta}$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} u_\alpha^*(x, t) x u_\alpha(x, t) dx \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha^*(x, t) (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \psi_\alpha(x, t) dx \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} |\alpha| (e^{-i(\omega t - \delta)} + e^{i(\omega t - \delta)}) \\ &= \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t - \delta). \end{aligned} \quad (10.67)$$

D.h. der Erwartungswert des Ortes führt eine periodische Oszillation aus. Wir haben also mit diesen kohärenten Zuständen, Zustände des harmonischen Oszillators gefunden, in denen der Erwartungswert des Ortes die selbe Zeitabhängigkeit wie die klassische Schwingung zeigt.

10.3 Vergleich zwischen klassischem und quantenmechanischem harmonischen Oszillator

Zum Abschluss dieses Kapitels vergleichen wir den quantenmechanischen mit dem klassischen harmonischen Oszillator. Die klassische Bewegung ist beschrieben durch

$$x(t) = q_0 \sin(\omega t), \quad (10.68)$$

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 q_0^2, \quad (10.69)$$

wobei q_0 die Amplitude der Schwingung bezeichnet. Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W_{\text{kl}}(x) dx$ das Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ anzutreffen, ist gegeben durch

$$W_{\text{kl}}(x) dx = \frac{dt}{T/2}, \quad (10.70)$$

wobei dt die Aufenthaltsdauer in dx und $T = 2\pi/\omega$ die Periode ist. Mit (10.68) erhalten wir für dx den Ausdruck

$$dx = q_0 \omega \cos(\omega t) dt = q_0 \omega \sqrt{1 - (x/q_0)^2} dt. \quad (10.71)$$

¹Der Name kommt aus der Optik, da die Zustände $\psi_\alpha(x, t)$ eine wichtige Rolle für die Darstellung von kohärenten Lichtwellen spielen.

Einsetzen in (10.70) ergibt

$$W_{\text{kl}}(x) = \frac{1}{\pi q_0 \sqrt{1 - (x/q_0)^2}}. \quad (10.72)$$

Abb. 10.5 zeigt die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|u_n(x)|^2$ für die Quantenzahlen $n = 5$ und $n = 20$ zusammen mit der entsprechenden klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W_{\text{kl}}(x)$: Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W_{\text{kl}}(x)$ nimmt gegen die Umkehrpunkte $x = \pm q_0$ monoton zu (da sie umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit ist). Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|u_n(x)|^2$ oszilliert, wobei die Höhe der Maxima gegen die klassischen Umkehrpunkte zunimmt. Quantenmechanisch existiert zusätzlich eine endliche Wahrscheinlichkeit das Teilchen bei Amplituden grösser als den klassischen Umkehrpunkten $x = \pm q_0$ anzutreffen. Für sehr hohe Quantenzahlen n nähert sich die quantenmechanische der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit an. Die Oszillationen werden immer schwächer und die Wahrscheinlichkeit das Teilchen bei Amplituden grösser als den klassischen Umkehrpunkten $x = \pm q_0$ anzutreffen sinkt.

10.4 Zusammenfassung

- In der Natur gibt es sehr viele physikalische Systeme, die in guter Näherung durch das Modell des harmonischen Oszillators beschrieben werden können. Jedes solche System führt eine Oszillation um eine Ruhelage, bewirkt durch eine lineare Rückstellkraft, aus, wobei die Oszillatorfrequenz für genügend kleine Auslenkungen unabhängig von der Amplitude ist.

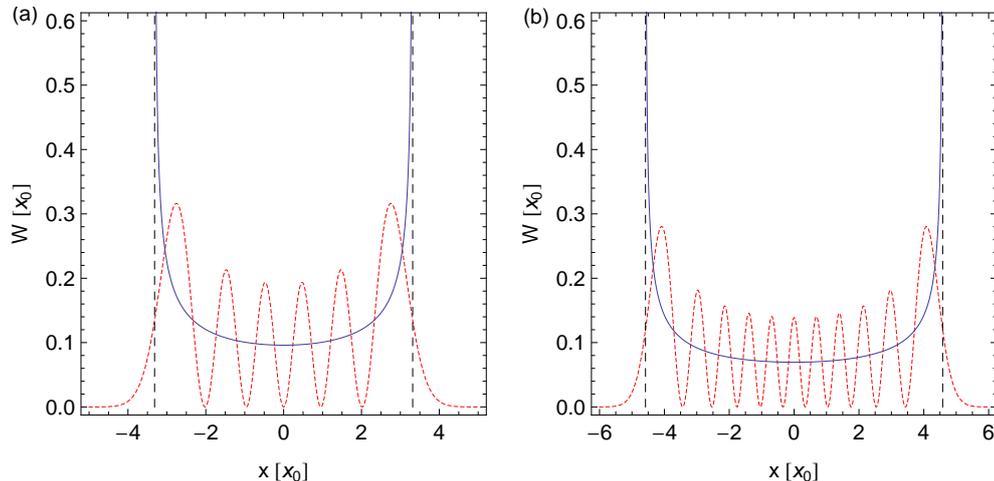


Abb. 10.5: Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|u_n(x)|^2$ (rot gepunktete Linie) und die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W_{\text{kl}}(x)$ (blaue durchgezogene Linie) als Funktion der Ortskoordinate x für die Quantenzahlen (a) $n = 5$ und (b) $n = 20$. Die schwarz gestrichelten Linien markieren die klassischen Umkehrpunkte bei $x = \pm q_0$.

- Ein typisches Beispiel ist das Federpendel, bei dem ein Teilchen der Masse m an einer Feder mit Federkonstante k befestigt ist und Oszillationen um die Ruhelage $x = 0$ ausführt. Die klassische Bewegungsgleichung eines solchen Teilchens lautet $m\partial^2 x/\partial t^2 + kx = 0$ mit der Lösung $x(t) = A \sin(\omega t + \phi)$, wobei $\omega = \sqrt{k/m}$ die Kreisfrequenz, A die Amplitude und ϕ die Phase bezeichnen.
- Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} u(x) = E u(x) \text{ mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (10.73)$$

Daraus folgen die Eigenzustände

$$u_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} H_n(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2/2}, \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (10.74)$$

wobei $x_0 = \sqrt{\hbar/\omega m}$ und die Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (10.75)$$

- Die niedrigste Energie des harmonischen Oszillators ist klassisch $E = 0$, quantenmechanisch $E = \hbar\omega/2$, d.h. im Gegensatz zur klassischen Mechanik erhalten wir in der Quantenmechanik eine endliche Grundzustandsenergie, auch *Nullpunktsenergie* genannt. Grund dafür sind sogenannte Nullpunktsschwankungen, d.h. das Teilchen ist im Grundzustand nicht bei $x = 0$ lokalisiert, sondern über einen endlichen Bereich „verschmiert“, verbunden mit einem endlichen Impuls. Zudem ist die Nullpunktsenergie der kleinste Energiewert, der mit der Unschärferelation vereinbar ist.
- Für die stationären Lösungen $u_n(x)$ gilt $\langle x \rangle = 0$, d.h. in diesen stationären Zuständen führt der harmonische Oszillator einzeln keine Oszillation aus. Sie haben daher insbesondere nichts mit der klassischen Oszillationsbewegung gemeinsam. Es lassen sich jedoch sogenannte kohärente Zustände $\psi_\alpha(x, t)$ finden, in denen Erwartungswert des Orts eine periodische Oszillation ausführt und somit die selbe Zeitabhängigkeit wie die klassische Schwingung zeigt.
- Der Unterschied zwischen klassischem und quantenmechanischem Oszillator kommt am besten aus dem Vergleich der entsprechenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten hervor: Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit nimmt gegen die Umkehrpunkte monoton zu. Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit oszilliert, wobei die Höhe der Maxima gegen die klassischen Umkehrpunkte zunimmt. Quantenmechanisch existiert zusätzlich eine endliche Wahrscheinlichkeit das Teilchen bei Amplituden grösser als den klassischen Umkehrpunkten anzutreffen. Für sehr hohe Quantenzahlen n nähert sich die quantenmechanische der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit an.

Kapitel 11

Das Wasserstoffatom

Das Verständnis des einfachsten Atoms, d.h. des Wasserstoffatoms, ist eine der Grundlagen zum Verständnis aller Atome. Die theoretische Behandlung des Wasserstoffatoms ist zudem eine der schönsten Illustrationen zur Anwendung der Quantenmechanik. Insbesondere können viele Begriffe, die dabei erarbeitet werden, auf andere Systeme übertragen werden.

Wie wir in Kapitel 8 gesehen haben, liefert das (semiklassische) Bohrsche Atommodell bereits eine gute Beschreibung der grundlegenden Eigenschaften des Spektrums des Wasserstoffatoms. In diesem Modell werden die Energieniveaus durch die Hauptquantenzahl n charakterisiert und die Frequenzen der Spektrallinien sind durch die Rydberg-Formel gegeben. Das Modell stösst jedoch bei der Beschreibung von Atomen mit mehreren Elektronen an seine Grenzen (siehe Abschnitt 8.6). Auch die Beschreibung des Wasserstoffspektrums ist nur begrenzt möglich, was bei einer detaillierten Betrachtung des Spektrums klar wird. Es treten viele nach dem Bohrschen Atommodell nicht erwartete Spektrallinien auf.

In diesem Kapitel kommen wir nun zu einer rein quantenmechanischen Behandlung des Wasserstoffatoms ausgehend von der Schrödinger-Gleichung. Wir werden sehen, dass im Vergleich zum Bohrschen Atommodell zusätzliche Quantenzahlen notwendig sind, um die Energieniveaus und die Spektrallinien zu beschreiben. Wie in Abschnitt 8.5 angedeutet, wird dabei der Bahndrehimpuls des Elektrons eine Rolle spielen. Ebenfalls einen Einfluss auf das Spektrum wird der Spin¹ des Elektrons und des Protons haben. Zusätzlich können von aussen angelegte elektrische und magnetische Felder, sowie die sogenannten Vakuumfluktuationen² die Energieniveaus und Spektrallinien beeinflussen.

Wir beginnen mit der Auflistung der Annahmen, die wir für unser Modell treffen werden und dem Aufstellen der Schrödinger-Gleichung. Anschliessend folgt das Lösen der Schrödinger-Gleichung und somit die Bestimmung der Wellenfunktionen und der Energieniveaus des Wasserstoffatoms.

¹Unter dem Spin versteht man den Eigendrehimpuls eines Teilchens. Der Spin ist eine relativistische quantenmechanische Eigenschaft und besitzt keine klassische Vergleichsgrösse.

²Für genauere Ausführungen wird auf weiterführende Literatur (z.B. zum Thema Quantenfeldtheorie) verwiesen.

11.1 Die Schrödinger-Gleichung

Das Wasserstoffatom besteht aus einem Kern (Proton) mit der Masse M und der Ladung $+e$ und aus einem Elektron der Masse m und der Ladung $-e$ (siehe Abb. 11.1). Für unser Modell zur Beschreibung des Wasserstoffatoms treffen wir die folgenden Annahmen:

1. Das Elektron wird als nicht-relativistisches Teilchen betrachtet.
2. Der Spin des Elektrons und das damit verbundene magnetische Moment wird vernachlässigt.
3. Der Spin des Protons und das damit verbundene magnetische Moment wird vernachlässigt.
4. Vakuumfluktuationen werden nicht berücksichtigt.
5. Die Wechselwirkung zwischen Elektron und Proton ist durch die Coulomb-Wechselwirkung gegeben, d.h. die potentielle Energie entspricht dem Coulomb-Potential $V_C(r)$ und nimmt daher die folgende Form an

$$V_C(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ mit } r = |\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (11.1)$$

Es ist jedoch zu bemerken, dass dieser Ausdruck nur dann für alle Abstände r gilt, wenn Kern und Elektron als Punktladungen betrachtet werden können. Wenn aber zum Beispiel der Kern einen endlichen Radius r_0 besitzt, dann ist die $1/r$ -Abhängigkeit als Näherung zu betrachten, die nur dann angewendet werden darf, wenn die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons innerhalb r_0 vernachlässigbar ist. Beim Wasserstoffatom ist die $1/r$ -Näherung für alle Zustände des Elektrons gerechtfertigt.

6. Die Masse M des Protons ist viel grösser als die Masse m des Elektrons. Aus diesem Grund vernachlässigen wir die Bewegung des Protons, d.h. das Proton ist in Ruhe. Soll die Kernbewegung berücksichtigt werden, so kann analog zu Abschnitt 8.4.2 die Elektronenmasse m durch die reduzierte Masse $\mu = Mm/(m + M)$ und zusätzlich die Koordinaten des Elektrons x , y und z durch Relativkoordinaten $x_r = x - X$, $y_r = y - Y$ und $z_r = z - Z$

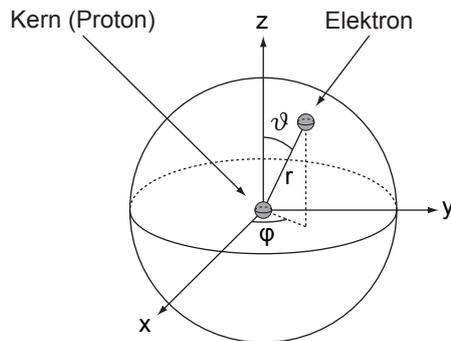


Abb. 11.1: Skizze eines Wasserstoffatoms: Ein Elektron umkreist den Kern (Proton). Dabei haben wir die Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) eingeführt.

ersetzt werden. Dabei bezeichnen X , Y und Z die Koordinaten des Protons und das Atom wird im Schwerpunktsystem betrachtet.

Da das Problem kugelsymmetrisch ist, führen wir Kugelkoordinaten ein (siehe Abb. 11.1). Es gilt

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (11.2)$$

$$\vartheta = \arccos\left(\frac{z}{r}\right), \quad (11.3)$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right). \quad (11.4)$$

Die potentielle Energie $V_C(r)$ hängt nicht explizit von der Zeit ab. Daher ist die Gesamtenergie E eine Konstante und es existieren stationäre Zustände der Form

$$\psi(r, \vartheta, \varphi, t) = u(r, \vartheta, \varphi)e^{-iEt/\hbar}, \quad (11.5)$$

wobei $u(r, \vartheta, \varphi)$ die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(r, \vartheta, \varphi) + V_C(r)u(r, \vartheta, \varphi) = Eu(r, \vartheta, \varphi) \quad (11.6)$$

erfüllt. Der Laplace-Operator Δ nimmt dabei in Kugelkoordinaten die folgende Form an (siehe Anhang F)

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (11.7)$$

Einsetzen von (11.1) und (11.7) in (11.6) ergibt für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) u(r, \vartheta, \varphi) \\ - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} u(r, \vartheta, \varphi) = Eu(r, \vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (11.8)$$

Bevor wir im nächsten Abschnitt die Schrödinger-Gleichung lösen, führen wir den Bahndrehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$ ein. Nach (9.68) lautet der Bahndrehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$ in Kugelkoordinaten

$$\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}. \quad (11.9)$$

Für das Quadrat des Bahndrehimpulsoperators $\hat{\vec{L}}^2$ ergibt sich damit (Ausführung der Rechnung siehe Anhang G)

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \quad (11.10)$$

Damit können wir die Schrödinger-Gleichung (11.8) in der folgenden Form schreiben

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2\right)u(r,\vartheta,\varphi) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}u(r,\vartheta,\varphi) = Eu(r,\vartheta,\varphi). \quad (11.11)$$

Für die Bahndrehimpulskomponenten \hat{L}_x , \hat{L}_y und \hat{L}_z , für das Quadrat des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}^2 , sowie den Hamilton-Operator $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_C$ des Wasserstoffatoms gelten dabei die folgenden Kommutatorrelationen (siehe Abschnitt 9.3.3 und Anhang H)

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad (11.12)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad (11.13)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y, \quad (11.14)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0, \quad (11.15)$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \quad (11.16)$$

Das bedeutet für das Wasserstoffatom, dass Funktionen existieren, die gleichzeitig Eigenfunktionen der Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z sind. D.h. die entsprechenden Observablen E , \vec{L}^2 und L_z sind gleichzeitig scharf bestimmt (siehe Abschnitt 9.5.4).

11.2 Lösung der Schrödinger-Gleichung durch Separation der Variablen

Als erstes multiplizieren wir die Schrödinger-Gleichung (11.8) mit $(-\frac{2m}{\hbar^2}r^2\sin^2\vartheta)$ und erhalten

$$\begin{aligned} &\left(\sin^2\vartheta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)u(r,\vartheta,\varphi) \\ &+ \frac{2mr^2\sin^2\vartheta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E\right)u(r,\vartheta,\varphi) = 0. \end{aligned} \quad (11.17)$$

Wir wählen für die Funktion $u(r,\vartheta,\varphi)$ den folgenden Produktansatz

$$u(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi). \quad (11.18)$$

Es sei bemerkt, dass ein solcher Ansatz allgemein für alle kugelsymmetrischen Potentiale $V(r)$ geeignet ist. Einsetzen des Ansatzes in (11.17) und Division durch $u(r,\vartheta,\varphi)$ liefert

$$\begin{aligned} &\underbrace{\frac{1}{R(r)}\sin^2\vartheta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)}_{R(r)\text{-abhängig}} + \underbrace{\frac{1}{\Theta(\vartheta)}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\Theta(\vartheta)}{\partial\vartheta}\right)}_{\Theta(\vartheta)\text{-abhängig}} \\ &+ \underbrace{\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}}_{\Phi(\varphi)\text{-abhängig}} + \underbrace{\frac{2mr^2\sin^2\vartheta}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E\right)}_{r\text{-abhängig}} = 0. \end{aligned} \quad (11.19)$$

Somit hängen die einzelnen Terme der Schrödinger-Gleichung nur von einer der Funktionen $R(r)$, $\Theta(\vartheta)$ oder $\Phi(\varphi)$ oder der Koordinate r ab. D.h. wir konnten durch unseren Produktansatz (11.18) die Schrödinger-Gleichung separieren. Wir ordnen nun die Gleichung (11.19) um, so dass der Term mit $\Phi(\varphi)$ auf der rechten Seite steht und sich alle anderen Terme auf der linken Seite befinden. Es ergibt sich

$$\underbrace{\frac{\sin^2 \vartheta}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta(\vartheta)} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta(\vartheta)}{\partial \vartheta} \right) + \frac{2mr^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right)}_{\equiv m_l^2} = - \underbrace{\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2}}_{\equiv m_l^2}. \quad (11.20)$$

Diese Gleichung kann nur dann gelten, wenn die linke und rechte Seite gleichzeitig identisch derselben Konstante sind. Wir wählen die Konstante m_l^2 . Auf die physikalische Bedeutung der Konstanten m_l werden wir im Folgenden eingehen. Somit lautet die Differentialgleichung zur Bestimmung von $\Phi(\varphi)$

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = m_l^2. \quad (11.21)$$

Die normierte Lösung ergibt sich zu

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi}, \quad (11.22)$$

wobei wir den Index m_l eingeführt haben. Der Vergleich mit Abschnitt 9.5.2 zeigt, dass $\Phi_{m_l}(\varphi)$ und daher auch $u(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi)$ Eigenfunktionen der z-Komponente des Bahndrehimpulsoperators $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ sind. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{L}_z \Phi_{m_l}(\varphi) = \hbar m_l \Phi_{m_l}(\varphi), \text{ bzw.} \quad (11.23)$$

$$\hat{L}_z u(r, \vartheta, \varphi) = \hbar m_l u(r, \vartheta, \varphi), \quad (11.24)$$

wobei aufgrund der Eindeutigkeit der Wellenfunktion $m_l \in \mathbb{Z}$. Demzufolge charakterisiert die Konstante m_l die Eigenwerte von \hat{L}_z und bestimmt damit die Werte, die der Erwartungswert der Observablen L_z annehmen kann. m_l wird *magnetische Quantenzahl* genannt.

Als nächstes betrachten wir die linke Seite der Gleichung (11.20). Umordnen und Division durch $(\sin^2 \vartheta)$ liefert

$$\underbrace{\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right)}_{\equiv l(l+1)} = - \underbrace{\frac{1}{\Theta(\vartheta)} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta(\vartheta)}{\partial \vartheta} \right)}_{\equiv l(l+1)} + \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta}. \quad (11.25)$$

Wie zuvor kann diese Gleichung nur dann gelten, wenn die linke und rechte Seite gleichzeitig identisch derselben Konstanten sind. Wir wählen die Konstante $l(l+1)$. Auf die physikalische Bedeutung dieser neuen Konstanten l werden wir in Abschnitt 11.2.2 eingehen. Somit ergeben sich für die Funktionen $R(r)$ und $\Theta(\vartheta)$ die folgenden Differentialgleichungen

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r) = 0. \quad (11.26)$$

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta(\vartheta)}{\partial \vartheta} \right) + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \Theta(\vartheta) = 0. \quad (11.27)$$

Aus dieser Darstellung wird insbesondere klar, dass nur die Radialkomponente $R(r)$ von $u(r, \vartheta, \varphi)$ explizit vom Potential abhängt. Wir bestimmen nun die Lösungen der Differentialgleichungen für die Funktionen $\Theta(\vartheta)$ und $R(r)$ einzeln.

11.2.1 Lösung für die Polarkomponente

Zur Bestimmung der Lösung für die Polarkomponente $\Theta(\vartheta)$ der Wellenfunktion $u(r, \vartheta, \varphi)$ differenzieren wir die Differentialgleichung (11.27) aus und erhalten

$$\frac{\partial^2 \Theta(\vartheta)}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial \Theta(\vartheta)}{\partial \vartheta} + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \Theta(\vartheta) = 0. \quad (11.28)$$

Wir betrachten nun Θ als Funktion der neuen Variablen $x = \cos \vartheta$. Die entsprechende Differentialgleichung für $\Theta(x)$ ergibt sich dann zu

$$(1-x^2) \frac{\partial^2 \Theta(x)}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial \Theta(x)}{\partial x} + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{1-x^2} \right) \Theta(x) = 0. \quad (11.29)$$

Lösungen dieser Differentialgleichung sind die *zugeordneten Legendre-Polynome* $P_l^{m_l}(x)$ (siehe Anhang I.3)

$$P_l^{m_l}(x) = (1-x^2)^{|m_l|/2} \frac{\partial^{|m_l|}}{\partial x^{|m_l|}} P_l(x), \quad (11.30)$$

wobei für die Quantenzahlen l und m_l gilt³

$$l \in \mathbb{N}_0, \quad (11.31)$$

$$m_l \in \mathbb{Z}, \quad (11.32)$$

$$|m_l| \leq l \quad (11.33)$$

und $P_l(x)$ die *Legendre-Polynome* sind (siehe Anhang I.2), welche sich als Lösung von (11.29) für $m_l = 0$ ergeben. Es gilt

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial^l}{\partial x^l} (x^2 - 1)^l. \quad (11.34)$$

³Nur in diesem Fall existieren für alle $x \in [-1, 1]$ nicht-singuläre Lösungen der Differentialgleichung (11.29).

Die zugeordnete Legendre-Polynome $P_l^{m_l}(x)$ sind reell und erfüllen die folgende Orthogonalitätsbedingung (siehe Gl. (I.33))

$$\int_{-1}^1 P_l^{m_l}(x) P_k^{n_k}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m_l|)!}{(l-|m_l|)!} \delta_{lk} \delta_{m_l n_k}. \quad (11.35)$$

Somit lautet die normierte Lösung für die Polarkomponente $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ der Wellenfunktion $u(r, \vartheta, \varphi)$ (siehe Tab. 11.1)

$$\begin{aligned} \Theta_{l,m_l}(\vartheta) &= \left(\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right)^{1/2} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \\ &= \left(\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right)^{1/2} (1 - \cos^2 \vartheta)^{|m_l|/2} \frac{\partial^{|m_l|}}{\partial \cos \vartheta^{|m_l|}} P_l(\cos \vartheta), \end{aligned} \quad (11.36)$$

wobei wir die Indizes l und m_l eingeführt haben und die Legendre-Polynome $P_l(\cos \vartheta)$ gegeben sind durch

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial^l}{\partial \cos \vartheta^l} (\cos^2 \vartheta - 1)^l. \quad (11.37)$$

l	m_l	$P_l(\cos \vartheta)$	$P_l^{m_l}(\cos \vartheta)$	$\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$
0	0	1	1	$\frac{1}{\sqrt{2}} P_0^0(\cos \vartheta)$
1	0	$\cos \vartheta$	$\cos \vartheta$	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} P_1^0(\cos \vartheta)$
	± 1		$\sin \vartheta$	$\frac{\sqrt{3}}{2} P_1^{\pm 1}(\cos \vartheta)$
2	0	$\frac{1}{2}(3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\frac{1}{2}(3 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{2}} P_2^0(\cos \vartheta)$
	± 1		$3 \cos \vartheta \sin \vartheta$	$\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{3}} P_2^{\pm 1}(\cos \vartheta)$
	± 2		$3 \sin^2 \vartheta$	$\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{3}} P_2^{\pm 2}(\cos \vartheta)$
3	0	$\frac{1}{2}(5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$	$\frac{1}{2}(5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$	$\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{2}} P_3^0(\cos \vartheta)$
	± 1		$\frac{3}{2} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1)$	$\frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{6}} P_3^{\pm 1}(\cos \vartheta)$
	± 2		$15 \cos \vartheta \sin^2 \vartheta$	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{15}} P_3^{\pm 2}(\cos \vartheta)$
	± 3		$15 \sin^3 \vartheta$	$\frac{\sqrt{7}}{12\sqrt{10}} P_3^{\pm 3}(\cos \vartheta)$

Tab. 11.1: Legendre-Polynome $P_l(\cos \vartheta)$, zugeordnete Legendre-Polynome $P_l^{m_l}(\cos \vartheta)$ und Lösungen für die Polarkomponente $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ für die Quantenzahlen $l = 0, 1, 2, 3$.

11.2.2 Gesamtlösung des winkelabhängigen Anteils der Wellenfunktion

Mit (11.22) und (11.36) haben wir die Lösungen für $\Phi_{m_l}(\varphi)$ und $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ gefunden. Die Gesamtlösung des winkelabhängigen Anteils der Wellenfunktion

$u(r, \vartheta, \varphi)$ entspricht dem Produkt dieser Funktionen. Es ergeben sich damit die sogenannten *Kugelfunktionen* $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ (siehe Tab. 11.2, Abb. 11.2, Abb. 11.3 und I.6)

$$Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{l,m_l}(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right)^{1/2} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) e^{im_l\varphi}. \quad (11.38)$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass die Funktionen $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ und $\Phi_{m_l}(\varphi)$ und damit auch die Kugelfunktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ für beliebige kugelsymmetrische Potentiale $V(r)$ gelten, da das Potential nur explizit in der Differentialgleichung für die Bestimmung der radialen Funktion $R(r)$ erscheint.

Zur Ermittlung der physikalischen Bedeutung der Quantenzahl l gehen wir zurück zur Formulierung (11.11) der Schrödinger-Gleichung und multiplizieren sie mit $(-2mr^2\hbar^2)$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) u(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 u(r, \vartheta, \varphi). \quad (11.39)$$

Einsetzen des Ansatzes $u(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta_{l,m_l}(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi) = R(r)Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ und Division durch $u(r, \vartheta, \varphi)$ ergibt

$$\underbrace{\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right)}_{=l(l+1)} = \frac{1}{Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi), \quad (11.40)$$

l	m_l	$Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	0	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \vartheta$
	± 1	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
	± 1	$\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	± 2	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
3	0	$\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$
	± 1	$\frac{\sqrt{21}}{8\sqrt{\pi}} (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$
	± 2	$\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 3	$\frac{\sqrt{35}}{8\sqrt{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$

Tab. 11.2: Kugelfunktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ für die Quantenzahlen $l = 0, 1, 2, 3$.

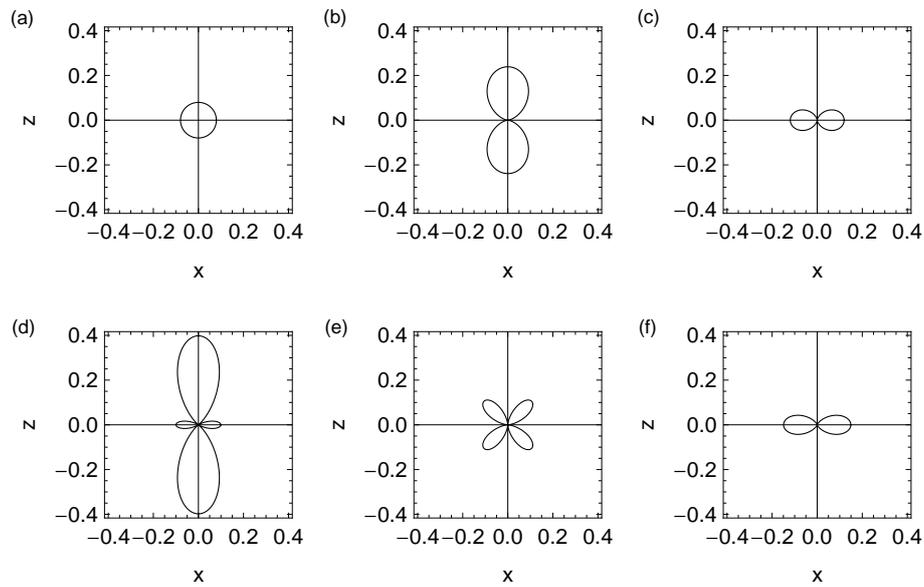


Abb. 11.2: Polardiagramme: Für jeden Wert des Winkels ϑ (φ wird 0 gesetzt) wird das entsprechende Betragsquadrat der Kugelfunktionen $|Y_{l,m_l}(\vartheta, 0)|^2$ für die Quantenzahlen (a) $l = 0$, $m_l = 0$, (b) $l = 1$, $m_l = 0$, (c) $l = 1$, $m_l = \pm 1$, (d) $l = 2$, $m_l = 0$, (e) $l = 2$, $m_l = \pm 1$ und (f) $l = 2$, $m_l = \pm 2$ aufgetragen.

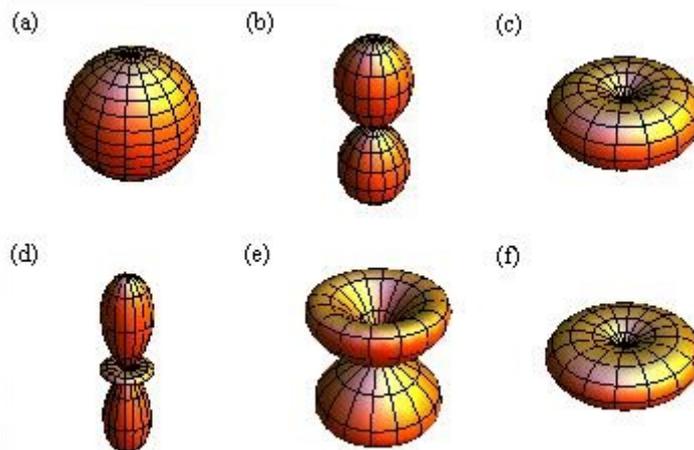


Abb. 11.3: 3D-Plots: Für jede Werte der Winkel ϑ und φ wird das entsprechende Betragsquadrat der Kugelfunktionen $|Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)|^2$ für die Quantenzahlen (a) $l = 0$, $m_l = 0$, (b) $l = 1$, $m_l = 0$, (c) $l = 1$, $m_l = \pm 1$, (d) $l = 2$, $m_l = 0$, (e) $l = 2$, $m_l = \pm 1$ und (f) $l = 2$, $m_l = \pm 2$ aufgetragen.

wobei der Vergleich mit (11.25) die linke Seite als $l(l+1)$ identifiziert. Damit

ergibt sich das folgende Resultat

$$\hat{L}^2 Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi), \text{ bzw.} \quad (11.41)$$

$$\hat{L}^2 u(r, \vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) u(r, \vartheta, \varphi). \quad (11.42)$$

D.h. die Kugelfunktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ und damit die Wellenfunktionen $u(r, \vartheta, \varphi)$ sind Eigenfunktionen des Quadrats des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}^2 zum Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$. Demzufolge charakterisiert die Quantenzahl l die Eigenwerte von \hat{L}^2 und bestimmt damit die Werte, die der Erwartungswert der Observablen \vec{L}^2 annehmen kann. l wird *Bahndrehimpulsquantenzahl* genannt. Zusammenfassend können wir für den Bahndrehimpuls eines Teilchen im kugelsymmetrischen Potential feststellen:

- Der Erwartungswert des Quadrats des Bahndrehimpulses $\langle \vec{L}^2 \rangle$ eines Teilchens, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential bewegt, kann nur die diskreten Eigenwerte $\hbar^2 l(l+1)$ mit $l \in \mathbb{N}$ annehmen. Die entsprechende Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{L}^2 u(r, \vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) u(r, \vartheta, \varphi). \quad (11.43)$$

- Der Erwartungswert der z-Komponente des Bahndrehimpulses $\langle L_z \rangle$ eines Teilchens, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential bewegt, kann nur die diskreten Eigenwerte $\hbar m_l$ mit $m_l \in \mathbb{Z}$ und $|m_l| \leq l$ annehmen. Die entsprechende Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{L}_z u(r, \vartheta, \varphi) = \hbar m_l u(r, \vartheta, \varphi), \quad (11.44)$$

- Die Wellenfunktionen $u(r, \vartheta, \varphi)$ sind gleichzeitig Eigenfunktionen der drei Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z .

Richtungsquantisierung des Bahndrehimpulses

Nach den vorangegangenen Ausführungen sind durch die Bahndrehimpulsquantenzahl l und die magnetische Quantenzahl m_l die Erwartungswerte der Observablen \vec{L}^2 und L_z bestimmt. Befindet sich das System in einem Eigenzustand, dann gilt

$$\langle \vec{L}^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1), \quad (11.45)$$

$$\langle L_z \rangle = \hbar m_l. \quad (11.46)$$

Die erste Gleichung bestimmt den Betrag des Bahndrehimpulsvektors $|\vec{L}|$. Es gilt

$$|\vec{L}| = \sqrt{\langle \vec{L}^2 \rangle} = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (11.47)$$

Abb. 11.4, in der die möglichen Bahndrehimpulsvektoren für die Bahndrehimpulsquantenzahlen $l = 1$ und $l = 2$ gezeichnet sind, bestätigt die Bedingung $|m_l| \leq l$. Insbesondere kann der Vektor \vec{L} aufgrund der Bedingungen (11.47) und (11.46) nie entlang der z-Achse zeigen. Dies ist im Einklang damit, dass nur eine einzige Komponente, die z-Komponente⁴, des Bahndrehimpulses scharf sein kann. Entlang der beiden dazu orthogonalen Raumrichtungen, x und y, ist der Bahndrehimpuls unscharf. In anderen Worten ausgedrückt, bedeutet das, dass wenn $|\vec{L}|$ und L_z festgelegt sind, dann sind L_x und L_y unbestimmbar.

Wir illustrieren diesen Sachverhalt graphisch (siehe Abb. 11.5): Der Vektor \vec{L} kommt auf einer Kugel zu liegen, deren Radius durch die Bahndrehimpulsquantenzahl l festgelegt ist (Radius = $\hbar\sqrt{l(l+1)}$). Die magnetische Quantenzahl m_l bestimmt die z-Komponente des Bahndrehimpulses zu $L_z = \hbar m_l$ und beschränkt dadurch den Aufenthaltsort des Vektors \vec{L} auf eine Kegelfläche innerhalb dieser Kugel. Jedoch weiss man nicht, wo innerhalb der Kegelfläche der Vektor \vec{L} zu liegen kommt.

11.2.3 Lösung für die radiale Funktion

Zur Bestimmung der radialen Funktion $R(r)$ gehen wir von der Differentialgleichung (11.26) aus, d.h. der Gleichung

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r) = 0. \quad (11.48)$$

In dieser Gleichung tritt der Energiewert E , sowie der Elektron-Kern-Abstand r auf. Deshalb werden die Lösungen Auskunft über die Energie des Atoms und dessen Grösse geben. Wir gehen dabei von gebundenen Zuständen, d.h. $E < 0$, aus.

Wir beginnen mit der Bestimmung der Funktion $R(r)$ indem wir in der Gleichung (11.48) $R(r) = P(r)/r$ setzen. Damit ergibt sich für die Funktion $P(r)$ die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 P(r)}{\partial r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) P(r) = 0. \quad (11.49)$$

Als nächstes betrachten wir die beiden Grenzfälle $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$:

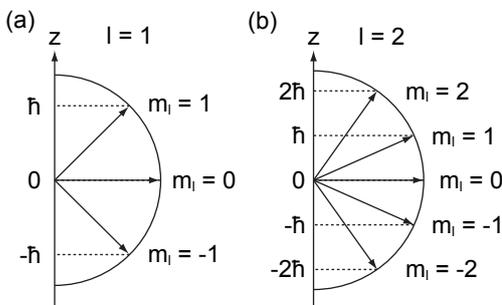


Abb. 11.4: Richtungsquantisierung des Bahndrehimpulses: Für die Bahndrehimpulsquantenzahlen (a) $l = 1$ und (b) $l = 2$ sind jeweils die möglichen Bahndrehimpulsvektoren im Bezug zur z-Achse eingezeichnet.

⁴Es ist in der Quantenmechanik üblich, diese Achse, längs der die Komponente des Bahndrehimpulses bestimmt ist bzw. gemessen wird, als z-Achse zu bezeichnen (siehe Abschnitt 9.5.3).

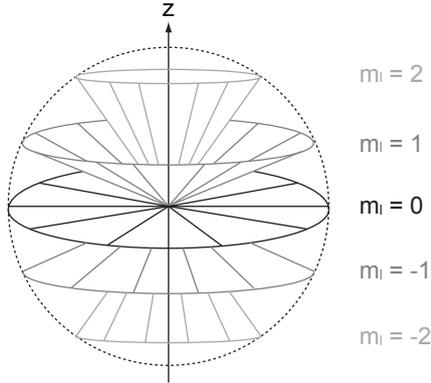
$l = 2$  $m_l = 2$ $m_l = 1$ $m_l = 0$ $m_l = -1$ $m_l = -2$

Abb. 11.5: Richtungsquantisierung des Bahndrehimpulses illustriert für die Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 2$. Durch die magnetische Quantenzahl m_l wird eine der 5 möglichen Kegelflächen ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2$) festgelegt, in der der Bahndrehimpulsvektor \vec{L} zu liegen kommt.

a) Für $r \rightarrow 0$ reduziert sich die Differentialgleichung (11.49) auf die Form

$$\frac{\partial^2 P(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} P(r) = 0 \quad (11.50)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$P(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}. \quad (11.51)$$

Aus der Randbedingung $P(0) = 0$ folgt $B = 0$ und damit $P(r) = Ar^{l+1}$ für $r \rightarrow 0$.

b) Für $r \rightarrow \infty$ reduziert sich die Differentialgleichung (11.49) auf die Form

$$\frac{\partial^2 P(r)}{\partial r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} P(r) = 0 \quad (11.52)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$P(r) = Ce^{-kr} + De^{kr} \text{ mit } k = \sqrt{2m(-E)}/\hbar. \quad (11.53)$$

Da die Funktion $P(r)$ normierbar sein muss, ist $D = 0$ und folglich $P(r) = Ce^{-kr}$ für $r \rightarrow \infty$.

Wir setzen unsere Rechnung fort indem wir die Variable r in (11.49) durch $r = x/k$ ersetzen. Gleichzeitig führen wir die Konstante $x_0 = -e^2 k / (4\pi\epsilon_0 E)$ ein. Es ergibt sich

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{x_0}{x} - 1 \right) P(x) = 0. \quad (11.54)$$

Wir wählen nun für $P(x)$ unter Berücksichtigung des Verhaltens für $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$ den folgenden Ansatz

$$P(x) = x^{l+1} e^{-x} Q(x). \quad (11.55)$$

Einsetzen in (11.54) ergibt

$$x \frac{\partial^2 Q(x)}{\partial x^2} + 2(l+1-x) \frac{\partial Q(x)}{\partial x} + (x_0 - 2(l+1)) Q(x) = 0. \quad (11.56)$$

Für $Q(x)$ wählen wir einen Potenzreihenansatz

$$Q(x) = \sum_{s=0}^{\infty} A_s x^s. \quad (11.57)$$

Damit erhalten wir aus (11.56)

$$\sum_{s=0}^{\infty} A_s [s(s-1)x^{s-1} + 2(l+1)sx^{s-1} - 2sx^s + (x_0 - 2(l+1))x^s] = 0. \quad (11.58)$$

Damit die Summe verschwindet, müssen die Koeffizienten jeder Potenz verschwinden. Daher erhalten wir die folgende Bedingung

$$[(s+1)s + 2(l+1)(s+1)] A_{s+1} + [-2s + x_0 - 2(l+1)] A_s = 0. \quad (11.59)$$

Damit ergibt sich zwischen den Koeffizienten die folgende Rekursionsrelation

$$A_{s+1} = \frac{2(s+l+1) - x_0}{(s+1)(s+2l+2)} A_s. \quad (11.60)$$

Für hohe Potenzen, d.h. für $s \rightarrow \infty$ ergibt sich somit das folgende Verhalten

$$\frac{A_{s+1}}{A_s} = \frac{2}{s}. \quad (11.61)$$

Wir vergleichen dieses Verhalten der Potenzreihe $Q(x)$ mit der Reihe

$$e^{2x} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} (2x)^s. \quad (11.62)$$

In diesem Fall ergibt sich für nachfolgende Koeffizienten das folgende Grenzverhalten

$$\frac{2^{s+1}/(s+1)!}{2^s/s!} = \frac{2}{s+1} \rightarrow \frac{2}{s} \quad (s \rightarrow \infty). \quad (11.63)$$

D.h. die Reihe $Q(x)$ würde wie $e^{2x} = e^{2kr}$ divergieren für $r \rightarrow \infty$, wenn sie nicht abbricht. Demzufolge würde $P(x)$ wie $e^x = e^{kr}$ divergieren für $r \rightarrow \infty$ und $R(r)$ wäre nicht normierbar und daher physikalisch nicht sinnvoll. Demzufolge muss die Reihe abbrechen. Nennen wir die höchste in der Reihe auftretende Potenz N , so ergibt sich die Abbruchbedingung $A_{N+1} = A_{N+2} = \dots = 0$ und damit

$$x_0 = 2(N+l+1) \text{ mit } N \in \mathbb{N}_0. \quad (11.64)$$

Die Zahl N wird *radiale Quantenzahl* genannt. Mit $x_0 = -\frac{e^2 k}{4\pi\epsilon_0 E}$ und $k = \sqrt{2m(-E)}/\hbar$ ergeben sich damit die folgenden diskreten Energiewerte

$$E = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{(N+l+1)^2}. \quad (11.65)$$

Mit der Rydberg-Energie $E_R = me^4/(32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2) = 13.6$ eV und der *Hauptquantenzahl* $n = N+l+1$ ergibt sich daraus für die Energiewerte E_n des Wasserstoffatoms (siehe Tab. 11.3)

$$E_n = -E_R \frac{1}{n^2} \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (11.66)$$

Dieses Ergebnis ist identisch zu dem des Bohrschen Atommodells. Damit hängen die Energiewerte E_n nur von der Hauptquantenzahl n ab. Bei festem n kann die Bahndrehimpulsquantenzahl l die Werte $0, 1, 2, \dots, n-1$ annehmen. Da zu jedem l für die magnetische Quantenzahl m_l $2l+1$ verschiedene Werte möglich sind, ergibt sich damit der folgende Grad der Entartung des Energiewerts E_n

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2, \quad (11.67)$$

d.h. es existieren jeweils n^2 verschiedene Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms, charakterisiert durch die Quantenzahlen n, l und m_l , mit derselben Energie E_n .

Die zu den Energiewerten E_n zugehörigen Funktionen $Q(x)$ und damit die Funktionen $P(x)$ und daraus schlussendlich die radiale Funktion $R(r)$ könnten mit Hilfe der Rekursionsrelation (11.60) bestimmt werden. Wir wählen hier jedoch einen anderen Weg: Wir schreiben die Gleichung (11.56) in eine Form, welche mit einer aus der Mathematik bekannten Differentialgleichung übereinstimmt und übernehmen die entsprechenden Lösungen. Die bekannte Gleichung

n	l	m_l	E_n	Entartung
1	0 (<i>s</i>)	0	E_1	1-fach
2	0 (<i>s</i>)	0	E_2	4-fach
	1 (<i>p</i>)	-1, 0, 1		
3	0 (<i>s</i>)	0	E_3	9-fach
	1 (<i>p</i>)	-1, 0, 1		
	2 (<i>d</i>)	-2, -1, 0, 1, 2		
4	0 (<i>s</i>)	0	E_4	16-fach
	1 (<i>p</i>)	-1, 0, 1		
	2 (<i>d</i>)	-2, -1, 0, 1, 2		
	3 (<i>f</i>)	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3		
n	$0, 1, 2, \dots, n-1$	$-l, \dots, -1, 0, 1, \dots, l$	E_n	n^2 -fach

Tab. 11.3: Übersicht über die Energiewerte E_n und den entsprechenden Quantenzahlen n, l und m_l des Wasserstoffatoms. Dabei haben wir die Werte, die die Bahndrehimpulsquantenzahl l annehmen kann, wie in der Literatur üblich, mit Buchstaben bezeichnet. Die Herkunft dieser Bezeichnungen ist historisch bedingt. Sie ergaben sich aus der Spektroskopie: *s* ($l=0$) steht für *sharp*, *p* ($l=1$) für *principal*, *d* ($l=2$) für *diffuse* und *f* ($l=3$) für *fundamental*. Anschließend werden die Bezeichnungen alphabetisch fortgesetzt: *g* für $l=5$, *h* für $l=6$, usw..

ergibt sich aus (11.56) durch die Substitution $y = 2x$, der Definition $x_0 = 2n$ und der Multiplikation mit $1/2$ zu

$$y \frac{\partial^2 Q(y)}{\partial y^2} + ((2l+1) + 1 - y) \frac{\partial Q(y)}{\partial y} + ((n+l) - (2l+1))Q(y) = 0. \quad (11.68)$$

Diese Gleichung entspricht mit $s = 2l+1$ und $r = n+l$ der Differentialgleichung der zugeordneten Laguerre-Polynomen $L_r^s(y)$ (siehe Anhang I.5)

$$y \frac{\partial^2 L_r^s(y)}{\partial y^2} + (s+1-y) \frac{\partial L_r^s(y)}{\partial y} + (r-s)L_r^s(y) = 0. \quad (11.69)$$

D.h. es gilt

$$Q(y) = AL_{n+l}^{2l+1}(y), \quad (11.70)$$

wobei A eine Normierungskonstante darstellt. Wir bestimmen nun ausgehend von (11.70) schrittweise die normierte radiale Funktion $R(r)$:

1. Mit $y = 2x$ ergibt sich aus (11.70) für $Q(x)$

$$Q(x) = AL_{n+l}^{2l+1}(2x). \quad (11.71)$$

2. Einsetzen in (11.55) liefert für $P(x)$

$$P(x) = x^{l+1}e^{-x}Q(x) = Ax^{l+1}e^{-x}L_{n+l}^{2l+1}(2x). \quad (11.72)$$

3. Mit $x = kr$ erhalten wir für $P(r)$ den Ausdruck

$$P(r) = A(kr)^{l+1}e^{-kr}L_{n+l}^{2l+1}(2kr). \quad (11.73)$$

4. Somit ergibt sich für die radiale Funktion $R(r)$

$$R(r) = \frac{P(r)}{r} = A \frac{(kr)^{l+1}}{r} e^{-kr} L_{n+l}^{2l+1}(2kr). \quad (11.74)$$

5. Der letzte Schritt beinhaltet die Bestimmung der Konstanten A und damit die Normierung der radialen Wellenfunktion $R(r)$. Wir setzen dazu die Wahrscheinlichkeit, dass das Wasserstoffatom und damit die Bahn des Elektrons einen Radius zwischen 0 und ∞ besitzt gleich 1

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty R(r)^2 r^2 dr \\ &= A^2 \int_0^\infty (kr)^{2l+2} e^{-2kr} \left(L_{n+l}^{2l+1}(2kr) \right)^2 dr \\ &\stackrel{(x=kr)}{=} \frac{A^2}{k} \int_0^\infty (x)^{2l+2} e^{-2x} \left(L_{n+l}^{2l+1}(2x) \right)^2 dx \\ &\stackrel{(y=2x)}{=} \frac{A^2}{2k} \left(\frac{1}{2} \right)^{2l+2} \int_0^\infty y^{(2l+1)+1} e^{-y} \left(L_{n+l}^{2l+1}(y) \right)^2 dy \end{aligned} \quad (11.75)$$

Auf diese radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit werden wir anschliessend bei der Auflistung der Eigenschaften der radialen Funktionen genauer eingehen. Die zugeordneten Laguerre-Polynome $L_r^s(y)$ erfüllen die Normierungsbedingung (siehe Gl. (1.60))

$$\int_0^\infty y^{s+1} e^{-y} (L_r^s(y))^2 dy = \frac{(2r-s+1)(r!)^3}{(r-s)!}, \quad (11.76)$$

womit folgt

$$1 = \frac{A^2}{2k} \left(\frac{1}{2}\right)^{2l+2} \frac{2n((n+l)!)^3}{(n-l-1)!}. \quad (11.77)$$

Daraus ergibt sich für die Konstante A

$$A = - \left(\frac{2k2^{2l+2}(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3} \right)^{1/2}. \quad (11.78)$$

Einsetzen in (11.74) liefert für die radiale Funktion $R_{n,l}(r)$

$$R_{n,l}(r) = - \left(\frac{(n-l-1)!(2k)^3}{2n((n+l)!)^3} \right)^{1/2} (2kr)^l e^{-kr} L_{n+l}^{2l+1}(2kr), \quad (11.79)$$

wobei wir die Quantenzahlen n und l als Indizes eingeführt haben. Für k erhalten wir mit (11.66)

$$k = \frac{\sqrt{2m(-E_n)}}{\hbar} = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2 n} = \frac{1}{a_0 n} \quad (11.80)$$

mit

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad (11.81)$$

dem *Bohrschen Radius*. Einsetzen in (11.79) liefert als Schlussresultat für die radiale Funktion $R_{n,l}(r)$ (siehe Tab. 11.4 und Abb. 11.6)

$$R_{n,l}(r) = - \left(\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3} \right)^{1/2} \left(\frac{2}{na_0} \right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-r/na_0} L_{n+l}^{2l+1}(2r/na_0). \quad (11.82)$$

Eigenschaften der radialen Funktionen

Die radialen Funktionen $R_{n,l}(r)$ haben die folgenden Eigenschaften:

- Der Faktor e^{-kr} bewirkt, dass die Funktionen $R_{n,l}(r)$ bei $r \rightarrow \infty$ verschwinden.

n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$R_{1,0}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
	1	$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$
3	0	$R_{3,0}(r) = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
	1	$R_{3,1}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0}$
	2	$R_{3,2}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{81\sqrt{15}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$

Tab. 11.4: Übersicht über die radialen Funktionen $R_{n,l}(r)$ für die Quantenzahlen $n = 1, 2, 3$.

- Alle Funktionen $R_{n,l}(r)$ für $l \geq 1$ besitzen am Ursprung ($r = 0$) eine Nullstelle.
- Die Funktionen $R_{n,l}(r)$ besitzen $N = n - l - 1$ Nullstellen, die Knotenpunkten in der Aufenthaltswahrscheinlichkeit entsprechen.
- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV$ das Elektron im Volumenelement dV am Ort (r, ϑ, φ) anzutreffen ist gegeben durch

$$|u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV = |R_{n,l}(r)|^2 |Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)|^2 d\varphi \sin \vartheta d\vartheta r^2 dr. \quad (11.83)$$

Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit ergibt sich durch Integration über ϑ und φ . Sie ist die Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Intervall dr in einem Abstand r vom Ursprung (Kern) zu finden. Da die Funktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ normiert sind, ist sie gegeben durch $|R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr$.

- Die radialen Funktionen $R_{n,l}(r)$ gelten nur für Potentiale $V(r) \propto -1/r$. Die Funktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ gelten hingegen für beliebige kugelsymmetrische Potentiale $V(r)$.
- Für Eielektronenatome mit Kernladung Ze ergeben sich die Energiewerte E_n zu

$$E_n = -E_R \frac{Z^2}{n^2}. \quad (11.84)$$

11.2.4 Porträts einiger Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms

Wir gehen nun kurz auf die Eigenschaften der s-, p- und d-Funktionen ein (siehe Tab. 11.5).

a) Die s-Funktionen

Die s-Funktionen sind definiert durch die Bedingung $l = 0$ und damit auch $m_l = 0$. Die entsprechende Kugelfunktion $Y_{0,0}(\vartheta, \varphi)$ ist konstant und

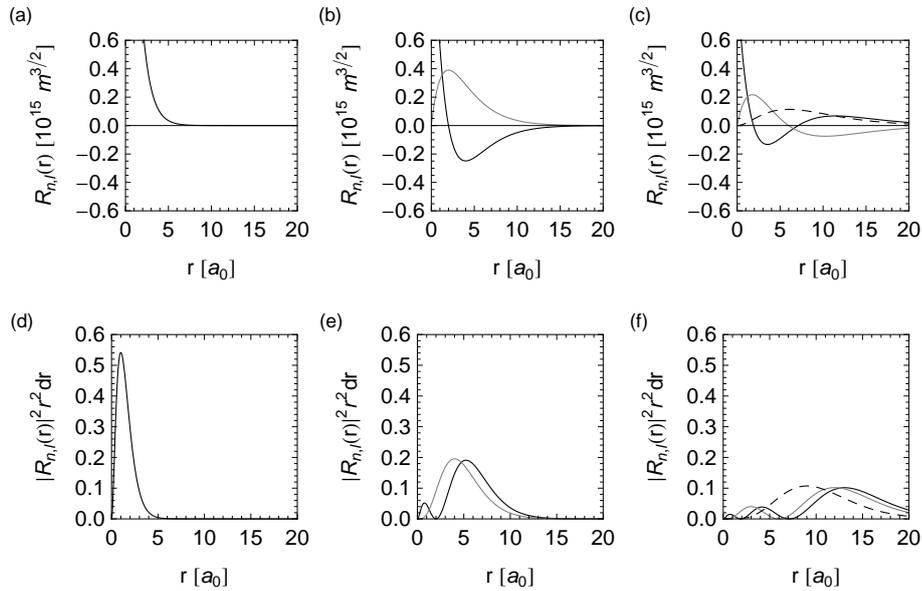


Abb. 11.6: Die radialen Funktionen $R_{n,l}(r)$ für die Quantenzahlen (a) $n = 1, l = 0$, (b) $n = 2, l = 0$ (schwarz) und $n = 2, l = \pm 1$ (grau), (c) $n = 3, l = 0$ (schwarz) und $n = 3, l = \pm 1$ (grau) und $n = 3, l = \pm 2$ (schwarz gestrichelt), sowie die entsprechenden radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $|R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr$ für die Quantenzahlen (d) $n = 1, l = 0$, (e) $n = 2, l = 0$ (schwarz) und $n = 2, l = \pm 1$ (grau), (f) $n = 3, l = 0$ (schwarz) und $n = 3, l = \pm 1$ (grau) und $n = 3, l = \pm 2$ (schwarz gestrichelt).

dementsprechend sind die s-Funktionen kugelsymmetrisch. Weitere Eigenschaften der s-Funktionen sind zudem, dass der Betrag des Bahndrehimpulses verschwindet, sie als einzige am Ort des Kerns nicht verschwinden und dass zu jedem Wert von n nur eine einzige s-Funktion gehört.

b) Die p-Funktionen

Die p-Funktionen sind definiert durch die Bedingung $l = 1$. Dann muss $n \geq 2$ sein oder in anderen Worten, es existieren keine 1p-Funktionen (Eigenfunktionen mit $l = 1$ für $n = 1$). Die magnetische Quantenzahl kann entsprechend die drei Werte $m_l = 0, \pm 1$ annehmen, d.h. zu jedem Wert von n gehören drei p-Funktionen.

c) Die d-Funktionen

Die d-Funktionen sind definiert durch die Bedingung $l=2$. Dann muss $n \geq 3$ sein oder in anderen Worten, es existieren keine 1d und 2d-Funktionen (Eigenfunktionen mit $l = 2$ für $n = 1$ und $n = 2$). Die magnetische Quantenzahl kann entsprechend die fünf Werte $m_l = 0, \pm 1, \pm 2$ annehmen, d.h. zu jedem Wert von n gehören fünf d-Funktionen.

n	l	m_l	$u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
		1	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \vartheta$
		± 1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
		1	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} \cos \vartheta$
		± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/3a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
		2	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
		± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
		± 2	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

Tab. 11.5: Die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2, 3$.

11.3 Zusammenfassung - Gesamtlösung

- Das Verständnis des Wasserstoffatoms ist eine der Grundlagen zum Verständnis aller Atome und zudem eine der schönsten Illustrationen der Quantenmechanik. Die rein quantenmechanische Betrachtung des Wasserstoffatoms ausgehend von der Schrödinger-Gleichung liefert die Antworten auf die mit dem Bohrschen-Atommodell unerklärten Aspekte.
- Das Wasserstoffatom besteht aus einem Kern (Proton) mit der Masse M und der Ladung $+e$ und aus einem Elektron der Masse m und der Ladung $-e$.
- Unserem Modell liegen im Wesentlichen folgende Annahmen zugrunde: Das Elektron wird als nicht-relativistisches Teilchen betrachtet, der Spin des Elektrons und des Protons und das damit verbundene magnetische Moment wird vernachlässigt, Vakuumfluktuationen werden nicht berücksichtigt, die Wechselwirkung zwischen Elektron und Proton ist durch die Coulomb-Wechselwirkung gegeben und das Proton befindet sich aufgrund der viel grösseren Masse im Vergleich zum Elektron in Ruhe.
- Unter diesen Annahmen ergeben sich für das Wasserstoffatom die folgenden Resultate:

- Die Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms ist gegeben durch

$$\hat{H}u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = E_n u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi), \quad (11.85)$$

mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$.

- Die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Hamilton-Operators \hat{H} lauten mit (11.38) und (11.82)

$$\begin{aligned} u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) &= R_{n,l}(r)Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) \\ &= R_{n,l}(r)\Theta_{l,m_l}(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3} \right)^{1/2} \left(\frac{2}{na_0} \right)^{3/2} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l e^{-r/na_0} \\ &\quad L_{n+l}^{2l+1}(2r/na_0)P_l^{m_l}(\cos \vartheta)e^{im_l\varphi}. \end{aligned} \quad (11.86)$$

Dabei ist zu bemerken, dass die radialen Funktionen $R_{n,l}(r)$ nur für Potentiale $V(r) \propto -1/r$ gelten. Die Funktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ gelten hingegen für beliebige kugelsymmetrische Potentiale $V(r)$.

- Mit (11.5) ergeben sich die Wellenfunktionen $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ zu

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t) = u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (11.87)$$

- Die Energiewerte E_n des Wasserstoffs sind gegeben durch

$$E_n = -E_R \frac{1}{n^2}, \quad (11.88)$$

wobei $E_R = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = 13.6$ eV die Rydberg-Energie bezeichnet.

- Die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ werden durch die Hauptquantenzahl n , die Bahndrehimpulsquantenzahl l und die magnetische Quantenzahl m_l beschrieben. Die Energiewerte E_n werden durch die Hauptquantenzahl n charakterisiert. Dabei gilt

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad (11.89)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad (11.90)$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (11.91)$$

- Zu einem bestimmten Energiewert E_n gehören jeweils n^2 Eigenfunktionen, d.h. die Energiewerte E_n sind n^2 -fach entartet.
- Die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Hamilton-Operators \hat{H} bilden ein Orthogonalsystem

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} u_{n,l,m_l}^*(r, \vartheta, \varphi) u_{n',l',m'_l}(r, \vartheta, \varphi) d\varphi \sin \vartheta d\vartheta r^2 dr \\ = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m_l,m'_l} \\ = \begin{cases} 1, & n = n', \quad l = l', \quad m_l = m'_l, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned} \quad (11.92)$$

- Die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Hamilton-Operators \hat{H} sind gleichzeitig Eigenfunktionen der Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z . Die entsprechenden Eigenwertgleichungen lauten

$$\hat{L}^2 u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi), \quad (11.93)$$

$$\hat{L}_z u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = \hbar m_l u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi). \quad (11.94)$$

Dementsprechend nehmen die Erwartungswerte des Quadrats des Bahndrehimpulses $\langle \vec{L}^2 \rangle$ und der z-Komponente des Bahndrehimpulses $\langle L_z \rangle$ eines Teilchen, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential $V(r)$ bewegt, nur die diskreten Werte $\hbar^2 l(l+1)$ bzw. $\hbar m_l$ an. Damit ist der Betrag $|\vec{L}|$ und die z-Komponente L_z des Bahndrehimpulses durch die Quantenzahlen l und m_l bestimmt. Die x- und y-Komponente sind unbestimmbar.

- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV$ das Elektron im Volumenelement dV am Ort (r, ϑ, φ) anzutreffen ist gegeben durch

$$|u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)|^2 dV = |R_{n,l}(r)|^2 |Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)|^2 d\varphi \sin \vartheta d\vartheta r^2 dr. \quad (11.95)$$

- Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit das Elektron im Intervall dr in einem Abstand r vom Ursprung (Kern) zu finden, ist gegeben durch $|R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr$.

Kapitel 12

Der Zeeman-Effekt

In diesem Kapitel befassen wir uns mit dem Einfluss eines externen Magnetfelds auf das Spektrum eines Atoms. Wir werden sehen, dass infolge dieser Beeinflussung die Entartung der Energieniveaus teilweise aufgehoben wird und als Folge davon die einzelnen Spektrallinien in mehrere Linien aufgespaltet werden. Dieser Effekt wird nach seinem Entdecker Pieter Zeeman *Zeeman-Effekt* genannt. 1902 erhielt er für diese Entdeckung gemeinsam mit Hendrik Antoon Lorentz den Nobelpreis in Physik.

Wir beginnen mit ein paar historischen Bemerkungen zur Entdeckung des Zeeman-Effekts. Anschliessend beschränken wir uns auf das Wasserstoffatom und betrachten ein semiklassisches Modell zur Beschreibung des Effekts, gefolgt von einer quantenmechanischen Behandlung. Am Ende des Kapitels steht die Zusammenfassung der Resultate und die Betrachtung des Zeeman-Effekts für das Spektrum des Wasserstoffatoms.

12.1 Historische Bemerkungen

Im Jahr 1862, also 25 Jahre vor der Entdeckung des Elektrons, untersuchte Michael Faraday in einem Experiment¹ die folgende Frage: Welchen Einfluss hat ein äusseres Magnetfeld auf das Linienspektrum, das von Gasflammen, die durch Alkali- und andere Salze gefärbt werden, emittiert wird? Das Auflösungsvermögen seines einfachen Prismenspektroskops genügte jedoch nicht, um einen Effekt zu finden.

Erst 1896 wurde das Experiment von Faraday von Zeeman wieder aufgegriffen. Mit seiner Messapparatur konnte er eine Verbreiterung der Spektrallinien nachweisen, die er folgendermassen deutete: Durch das äussere Magnetfeld kommt es zur Aufspaltung der einzelnen Linien in mehrere. Er war zudem in der Lage die Grössenordnung dieser Aufspaltung anzugeben.

Im selben Jahr² gab Lorentz eine Interpretation der Zeeman Aufspaltung. Er

¹Es sei bemerkt, dass das Faradays letztes Experiment war, welches er durchführte. Er litt zum Ende seines Lebens infolge schlechter Durchblutung des Gehirn an schwerem Gedächtnisschwund. Er starb daran 1867.

²Es ist zu bemerken, dass im Jahr 1896 das Elektron noch nicht als Bestandteil des Atoms erkannt wurde und die Entdeckung des Wirkungsquantums h durch Planck noch nicht stattgefunden hat.

nahm an, dass in Atomen Teilchen der Ladung q und der Masse m_0 sich auf einer Kreisbahn mit einem bestimmten Radius r_0 bewegen. Die Zentripetalbeschleunigung $a_Z = r_0\omega^2$ soll durch eine Zentripetalkraft \vec{F}_Z (unbekannten Ursprungs) erzeugt werden. Befindet sich nun dieses Atom in einem homogenen Magnetfeld \vec{B} , welches senkrecht zur Bahnrichtung der Ladung q gerichtet ist, so wirkt auf diese die Lorentz-Kraft \vec{F}_L in radialer Richtung nach aussen oder nach innen abhängig vom Umlaufsinn des Teilchens. Damit dieses auf seiner Bahn bleibt, muss im ersten Fall die Winkelgeschwindigkeit ω verkleinert, im zweiten Fall vergrössert werden. Der Betrag der Lorentz-Kraft \vec{F}_L ist dabei gegeben durch

$$F_L = |q(\vec{v} \times \vec{B})| = qvB = qr\omega B. \quad (12.1)$$

Es sei nun ω die Winkelgeschwindigkeit ohne Magnetfeld und $\omega + \delta\omega$ die Winkelgeschwindigkeit mit Magnetfeld. Die durch das Magnetfeld bewirkte Änderung $\delta\omega$ der Winkelgeschwindigkeit ergibt sich durch Gleichsetzen des Betrags $|\vec{F}_L|$ der Lorentz-Kraft mit der Änderung der Zentripetalkraft δF_Z , wobei δF_Z in erster Näherung gegeben ist durch

$$\delta F_Z \sim \frac{\partial F_Z}{\partial \omega} \delta\omega = 2m_0 r \omega \delta\omega. \quad (12.2)$$

Gleichsetzen mit (12.1) liefert

$$2m_0 r \omega \delta\omega \sim qr\omega B, \quad (12.3)$$

woraus wir für die durch das Magnetfeld bewirkte Änderung $\delta\omega$ der Winkelgeschwindigkeit das folgende Resultat erhalten

$$\delta\omega \sim \frac{qB}{2m_0}. \quad (12.4)$$

Wie wir in den folgenden Abschnitten sehen werden, stimmt dieses Resultat mit dem semiklassischen Modell (siehe Abschnitt 12.2) und auch der rein quantenmechanischen Herleitung (siehe Abschnitt 12.3) überein.

Diese Interpretation des Zeeman-Effekts von Lorentz steht im engen Zusammenhang mit der Entdeckung, dass das Elektron ein Bestandteil des Atoms ist: Joseph John Thomson bestimmte 1897 aus der Ablenkung eines Elektronenstrahls im elektrischen und magnetischen Feld das Verhältnis von Ladung zu Masse. Er verglich sein Ergebnis mit dem Verhältnis q/m_0 , das sich mit Hilfe der Interpretation von Lorentz aus der experimentellen Abschätzung der Zeeman-Aufspaltung $\delta\omega$ ergab und fand innerhalb der damals recht grossen Fehlerschranken Übereinstimmung. Seit jener Zeit weiss man, dass das Elektron ein Bestandteil des Atoms ist.

12.2 Semiklassisches Modell

Wie in der Einleitung des Kapitels erwähnt, beschränken wir uns im Folgenden auf die Behandlung des Wasserstoffatoms. Wir beginnen mit einer semiklassischen Behandlung. Dabei gehen wir vom Bohrschen Atommodell (siehe

Kapitel 8) aus, indem wir annehmen, dass sich im Wasserstoffatom das negativ geladene Elektron auf einer Kreisbahn um den positiv geladenen Kern bewegt (siehe Abb. 12.1). Durch dieses kreisende Elektron wird ein Kreisstrom I erzeugt, welcher ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$ antiparallel zur Flächennormalen \vec{n} hervorruft

$$\vec{\mu} = IA\vec{n}, \quad (12.5)$$

wobei A die von der Kreisbahn eingeschlossene Fläche bezeichnet. Der Strom I lässt sich durch die Elektronenladung $-e$ und die Umlauffrequenz ν ausdrücken und die Fläche A durch den Bahnradius r . Es ergibt sich

$$\vec{\mu} = IA\vec{n} = -e\nu\pi r^2\vec{n}. \quad (12.6)$$

Wir vergleichen diesen Ausdruck für das magnetische Moment $\vec{\mu}$ mit dem Bahndrehimpuls \vec{L} des Elektrons

$$\vec{L} = mvr\vec{n} = 2\pi m\nu r^2\vec{n} \quad (12.7)$$

und erhalten

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\vec{L}. \quad (12.8)$$

Das Verhältnis von magnetischem Moment $\vec{\mu}$ zu Bahndrehimpuls \vec{L} wird *gyromagnetisches Verhältnis* genannt und mit γ bezeichnet

$$\gamma = \frac{\mu}{L} = \frac{e}{2m}. \quad (12.9)$$

Das nächste Ziel ist die potentielle Energie V des Elektrons in einem homogenen externen Magnetfeld \vec{B} zu bestimmen. Sie ist gegeben durch

$$V = -\vec{\mu}\vec{B} = -\mu B \cos \vartheta, \quad (12.10)$$

wobei ϑ den Winkel zwischen magnetischem Moment $\vec{\mu}$ und Magnetfeld \vec{B} bezeichnet. Demzufolge erreicht die potentielle Energie V ihr Minimum für $\vartheta = 0$, d.h. wenn $\vec{\mu}$ parallel zu \vec{B} ausgerichtet ist und ihr Maximum für $\vartheta = \pi$, d.h. wenn

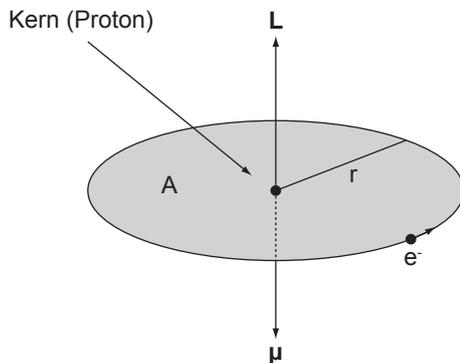


Abb. 12.1: Semiklassisches Modell des Zeeman-Effekts. Skizze eines Wasserstoffatoms: Ein Elektron umkreist den Kern auf einer Kreisbahn und ruft ein magnetisches Moment $\vec{\mu}$ hervor.

$\vec{\mu}$ antiparallel zu \vec{B} ausgerichtet ist. Mit (12.8) erhalten wir für die potentielle Energie V des Elektrons mit Bahndrehimpuls \vec{L}

$$V = \frac{e}{2m}LB \cos \vartheta. \quad (12.11)$$

Quantenmechanisch (siehe Abschnitt 11.2) ist die z-Komponente L_z des Bahndrehimpulses \vec{L} gegeben durch

$$L_z = L \cos \vartheta = m_l \hbar, \quad (12.12)$$

wobei die magnetische Quantenzahl m_l nur die diskreten Werte $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ annehmen kann. Somit ergibt sich für die potentielle Energie $V_{m_l}^{\text{semi}}$ des magnetischen Moments des Elektrons im Wasserstoffatom

$$V_{m_l}^{\text{semi}} = m_l \frac{e\hbar}{2m} B = m_l \mu_B B, \quad (12.13)$$

wobei $\mu_B = e\hbar/(2m) = 5.79 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}$ das *Bohr-Magneton* bezeichnet, wir den Index m_l eingeführt haben und der obere Index semi andeuten soll, dass unsere Herleitung semiklassisch erfolgte. $V_{m_l}^{\text{semi}}$ wird Zeeman-Energie genannt. Damit ergibt sich für die Energiewerte E_{n,m_l}^{semi} des Wasserstoffatoms (siehe Abschnitt 11.2.3) im homogenen externen Magnetfeld \vec{B} die folgende Korrektur

$$E_{n,m_l}^{\text{semi}} = E_n + V_{m_l}^{\text{semi}} = -\frac{E_R}{n^2} + m_l \mu_B B = -\frac{E_R}{n^2} + m_l \hbar \omega_L, \quad (12.14)$$

wobei $\omega_L = eB/(2m)$ die *Larmor-Frequenz* bezeichnet und wir für die Energiewerte den zusätzlichen Index m_l eingeführt haben. Das bedeutet, dass durch ein homogenes externes Magnetfeld \vec{B} die durch die magnetische Quantenzahl m_l bewirkte $(2l + 1)$ -fache Entartung der Energiewerte E_n aufgehoben wird (siehe Abb. 12.2). Die *s*-Niveaus ($l = 0, m_l = 0$) werden durch das Magnetfeld nicht beeinflusst. Die *p*-Niveaus ($l = 1, m_l = 0, \pm 1$) werden in drei und die *d*-Niveaus ($l = 2, m_l = 0, \pm 1, \pm 2$) in fünf Niveaus mit Abstand $\Delta = \mu_B B$ aufgespaltet.

12.3 Quantenmechanische Betrachtung

Wir starten mit der allgemeinen Hamilton-Funktion H für ein Teilchen der Ladung q und der Masse m im Magnetfeld \vec{B} (für eine Motivation verweisen wir

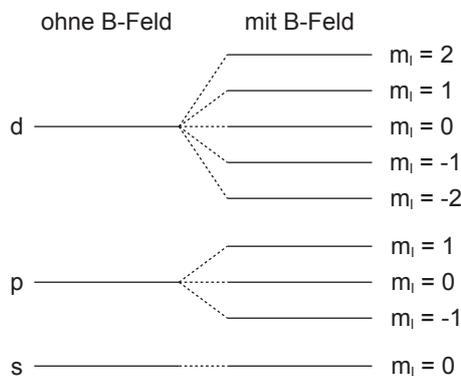


Abb. 12.2: Zeeman-Effekt: Aufspaltung der *s*-, *p*-, *d*-Energieniveaus des Wasserstoffatoms im homogenen externen Magnetfeld (Hinweis: Abbildung ist nicht massstabsgerecht).

auf Anhang J)

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 \quad \text{mit } \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (12.15)$$

wobei \vec{A} das sogenannte *Vektorpotential* bezeichnet. Mit $\hat{p} = (\hbar/i)\vec{\nabla}$ erhalten wir für den entsprechenden Hamilton-Operator \hat{H} den folgenden Ausdruck

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{\hbar q}{2mi} (\vec{\nabla} \vec{A} + \vec{A} \vec{\nabla}) + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2. \quad (12.16)$$

Wir verwenden nun (für die Fortsetzung des Buchs) die sogenannte Coulomb-Eichung³ $\vec{\nabla} \vec{A} = 0$ und erhalten

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{i\hbar q}{m} \vec{A} \vec{\nabla} + \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2. \quad (12.17)$$

Wir kommen nun zum Spezialfall eines Elektrons (Ladung $q = -e$) im homogenen Magnetfeld \vec{B} . Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wählen wir \vec{B} entlang der z-Achse, d.h. $\vec{B} = (0, 0, B)$. Das entsprechende Vektorpotential \vec{A} können wir schreiben als

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{B}) = -\frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} \right) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} yB \\ -xB \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (12.18)$$

da

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = -\frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \times \begin{pmatrix} yB \\ -xB \\ 0 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix} = \vec{B}. \quad (12.19)$$

Einsetzen von (12.18) in (12.17) liefert für den Hamilton-Operator \hat{H} eines Elektrons im homogenen Magnetfeld

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{i\hbar e}{2m} \begin{pmatrix} yB \\ -xB \\ 0 \end{pmatrix} \vec{\nabla} + \frac{e^2}{8m} \begin{pmatrix} yB \\ -xB \\ 0 \end{pmatrix}^2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{eB}{2m} \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \underbrace{\frac{eB}{2m} \hat{L}_z}_{(1)} + \underbrace{\frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2)}_{(2)}, \end{aligned} \quad (12.20)$$

wobei wir im letzten Schritt benützt haben, dass $\hat{L}_z = (x\partial/\partial y - y\partial/\partial x)$.

³Die Coulomb-Eichung ist eine mögliche Eichtransformation. Allgemein resultiert aus einer solchen Transformation des Hamilton-Operators und damit der Schrödinger-Gleichung ein zusätzlicher orts- und zeitabhängiger Phasenfaktor der Wellenfunktion. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion, d.h. die physikalisch bedeutungsvolle Wahrscheinlichkeitsdichte, bleibt jedoch unverändert.

Wir vergleichen die Grössenordnungen der Terme (1) und (2) des Hamilton-Operators \hat{H} von Elektronen in Atomen. Wir benützen dazu, dass $B = |\vec{B}| \sim 1$ T, $\langle \hat{L}_z \rangle \sim \hbar \sim 10^{-34}$ Js, $e \sim 10^{-19}$ C, $m \sim 10^{-31}$ kg, $x, y \sim 10^{-9}$ m und erhalten

$$\left| \frac{eB}{2m} \langle \hat{L}_z \rangle \right| \sim 10^3 \left| \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \right|. \quad (12.21)$$

Demzufolge können wir Term (2) gegenüber Term (1) für ein Elektron in Atomen unter dem Einfluss eines homogenen externen Magnetfelds vernachlässigen. Damit lautet der Hamilton-Operator \hat{H} für das Wasserstoffatom im homogenen externen Magnetfeld

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m} \hat{L}_z \quad \text{mit} \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (12.22)$$

Nach Abschnitt 11.3 sind die Wellenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ sowohl Eigenfunktionen des Hamilton-Operators \hat{H}_0 mit den Eigenwerten $E_n = -E_R/n^2$ als auch des Operators \hat{L}_z mit den Eigenwerten $\hbar m_l$. Deshalb gilt

$$\begin{aligned} \hat{H} u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) &= \left(\hat{H}_0 + \frac{eB}{2m} \hat{L}_z \right) u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) \\ &= \left(-\frac{E_R}{n^2} + \frac{eB}{2m} \hbar m_l \right) u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) \\ &= \underbrace{\left(-\frac{E_R}{n^2} + \hbar \omega_L m_l \right)}_{=E_{n,m_l}} u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (12.23)$$

Folglich sind die Energiewerte E_{n,m_l} des Wasserstoffatoms im homogenen externen Magnetfeld gegeben durch

$$E_{n,m_l} = -\frac{E_R}{n^2} + \hbar \omega_L m_l. \quad (12.24)$$

Dieses Resultat stimmt mit dem semiklassischen Resultat (12.14) überein.

12.4 Das Spektrum des Wasserstoffatoms im Magnetfeld (Auswahlregeln)

Wir betrachten nun den Effekt eines homogenen externen Magnetfelds auf das Spektrum des Wasserstoffatoms. Die semiklassische Behandlung (siehe Abschnitt 12.2) und die quantenmechanische Behandlung (siehe Abschnitt 12.3) haben gezeigt, dass die Existenz eines homogenen externen Magnetfelds die Aufspaltung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms zur Folge hat. Diese Aufspaltung der Energieniveaus führt zu zusätzlichen Übergängen und damit zu zusätzlichen Spektrallinien im Spektrum des Wasserstoffatoms. Jedoch ist die Anzahl

der Übergänge durch die sogenannten *Auswahlregeln* (siehe Abschnitt 15.3) beschränkt. Diese geben Auskunft, ob ein Übergang zwischen zwei Energieniveaus unter Emission oder Absorption eines Photons möglich ist oder nicht. Beim Wasserstoffatom lauten die Auswahlregeln:

Der Übergang zwischen zwei Energieniveaus E_{n,l,m_l} und E_{n',l',m'_l} des Wasserstoffatoms unter Emission oder Absorption eines Photons ist möglich, falls die Unterschiede der entsprechenden Quantenzahlen $\Delta n = n - n'$, $\Delta l = l - l'$ und $\Delta m_l = m_l - m'_l$ die folgenden Bedingungen erfüllen

$$\Delta n \text{ beliebig,} \tag{12.25}$$

$$\Delta l = \pm 1, \tag{12.26}$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \tag{12.27}$$

Da der Abstand $\Delta = \mu_B B$ benachbarter Zeeman-Energieniveaus von den Quantenzahlen n und l unabhängig ist, spalten sich die Frequenzen der erlaubten Übergänge durch den Einfluss eines homogenen externen Magnetfelds in drei Frequenzen auf (siehe Abb. 12.3). Diese drei Frequenzen werden *Lorentzsches Triplett* genannt. Ist die Frequenz der Spektrallinie ohne Magnetfeld ω , dann sind die Frequenzen im Lorentzsches Triplett gegeben durch

$$\omega - \omega_L, \omega, \omega + \omega_L \text{ mit } \omega_L = \frac{eB}{2m}, \tag{12.28}$$

wie Lorentz schon auf rein klassischem Weg herausfand (siehe Abschnitt 12.1).

Wenn das Lorentzsche Triplett auftritt, dann spricht man vom *normalen Zeeman-Effekt*. Die Gründe für diese Bezeichnung sind rein historisch. Es sei

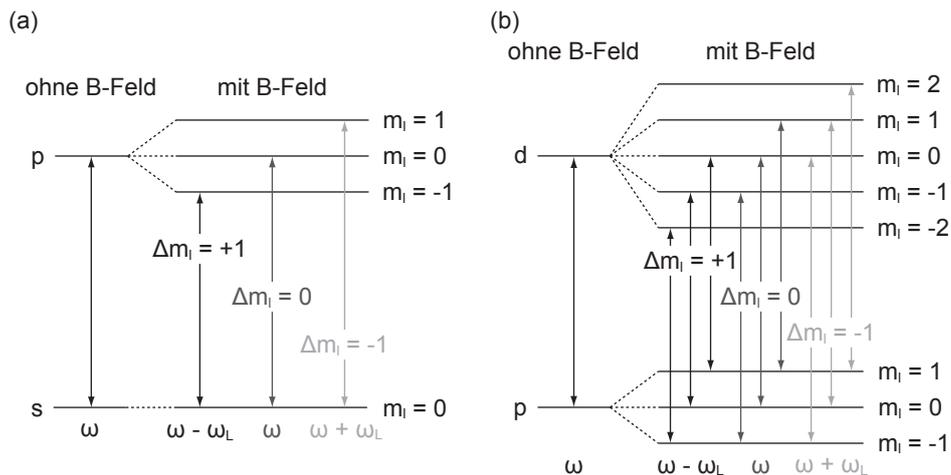


Abb. 12.3: Zeeman-Effekt: Illustration der Auswahlregeln im Energiediagramm für das Wasserstoffatom für die Übergänge zwischen (a) p - und s -Niveaus und (b) d - und p -Niveaus (Hinweis: Abbildung ist nicht massstabsgerecht).

an dieser Stelle bemerkt, dass der normale Zeeman-Effekt nur ein Spezialfall des sogenannten *anomalen Zeeman-Effekts* ist, bei dem der Spin des Elektrons (siehe Kapitel 13) mitberücksichtigt wird. Beim Wasserstoffatom ist deshalb in der Realität die Aufspaltung komplizierter und nicht alleine durch den Bahndrehimpuls erklärbar.

12.5 Zusammenfassung

- Unter dem Einfluss eines externen Magnetfelds wird die Entartung der Energieniveaus eines Atoms teilweise aufgehoben. Als Folge davon werden die Spektrallinien im Spektrum eines Atoms in mehrere Linien aufgespalten. Dieser Effekt wird nach seinem Entdecker Zeeman-Effekt genannt.
- Die erste Interpretation des Zeeman-Effekts lieferte Lorentz im Jahr 1896, für die er zusammen mit Zeeman 1902 den Nobelpreis in Physik erhielt. Sein Resultat steht im engen Zusammenhang mit der Entdeckung, dass das Elektron ein Bestandteil des Atoms ist.
- Das semiklassische Modell, beruhend auf dem Bohrschen Atommodell, sowie die rein quantenmechanische Betrachtung ergeben für die Energiewerte E_{n,m_l} des Wasserstoffatoms im homogenen externen Magnetfeld

$$E_{n,m_l} = -\frac{E_R}{n^2} + \hbar\omega_L m_l, \quad (12.29)$$

wobei $\omega_L = eB/(2m)$ die Larmor-Frequenz bezeichnet. Das bedeutet, dass durch ein homogenes externes Magnetfeld \vec{B} die durch die magnetische Quantenzahl m_l bewirkte $(2l + 1)$ -fache Entartung der Energiewerte E_n aufgehoben wird.

- Die Aufspaltung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms im homogenen externen Magnetfeld führt zu zusätzlichen Übergängen und damit zu zusätzlichen Spektrallinien im Spektrum des Wasserstoffatoms. Die Anzahl der Übergänge wird jedoch durch die sogenannten Auswahlregeln beschränkt. Für das Wasserstoffatom lauten diese: Δn beliebig, $\Delta l = \pm 1$, $\Delta m_l = 0, \pm 1$. Der Abstand $\Delta = \mu_B B$ benachbarter Zeeman-Energieniveaus ist von den Quantenzahlen n und l unabhängig, weshalb sich die Frequenzen der erlaubten Übergänge durch den Einfluss eines homogenen externen Magnetfelds in drei Frequenzen aufspalten. Diese drei Frequenzen werden Lorentzsches Triplett genannt.
- Der in diesem Kapitel behandelte Zeeman-Effekt wird normaler Zeeman-Effekt genannt und ist ein Spezialfall, des anomalen Zeeman-Effekts, bei dem der Spin des Elektrons mitberücksichtigt wird.

Kapitel 13

Der Spin des Elektrons

Wie in Abschnitt 12.4 angedeutet, ist in der Realität die Aufspaltung der Spektrallinien im homogenen externen Magnetfeld nicht alleine durch den normalen Zeeman-Effekt erklärbar. Es sind Aufspaltungen in vier, sechs oder mehr Linien beobachtbar, deren Abstand nicht durch den normalen Zeeman-Effekt erklärt werden können. Im Weiteren kann bereits ohne Anlegen eines externen Magnetfelds eine Aufspaltung diverser Spektrallinien in Doppellinien beobachtet werden. Auf diese sogenannte *Feinstruktur* und dessen Erklärung gehen wir in diesem und in den folgenden Kapiteln näher ein.

Wir befassen uns als erstes mit ein paar Experimenten, die auf das Auftreten einer Feinstruktur in atomaren Spektren hinweisen und die zur *Hypothese des Elektronspins* geführt haben. Anschliessend betrachten wir die Einbindung dieser neuen Grösse in den bisher kennengelernten Formalismus der Quantenmechanik und einer möglichen mathematischen Formulierung für den Elektronspin mittels den sogenannten *Pauli-Matrizen*.

In Kapitel 14 widmen wir uns dann der Wechselwirkung zwischen dem Elektronspin und dem Bahndrehimpuls des Elektrons, d.h. der sogenannten *Spin-Bahn-Kopplung* und damit der Erklärung der im Experiment beobachteten Feinstruktur. Im Weiteren befassen wir uns mit dem Einfluss eines externen Magnetfelds auf das Spektrum eines Atoms unter Einbezug des Elektronspins, d.h. dem sogenannten *anomalen Zeeman-Effekt*.

13.1 Experimentelle Beobachtungen

Eine experimentelle Beobachtung, die auf das Auftreten einer Feinstruktur in atomaren Spektren hinweist, ist zum Beispiel die ohne externen Felder beobachtete Aufspaltung der ersten Linie der Balmer-Serie ($n = 3 \rightarrow n = 2$) des Wasserstoffatoms bei der Wellenlänge $\lambda = 656.3$ nm in eine Doppellinie mit Wellenlängenabstand $\Delta\lambda = 0.14$ nm.

Diese Aufspaltung wird auch bei der gelben Linie der Natrium-Dampflampe beobachtet. Diese Linie entspricht dem Übergang $3p \rightarrow 3s$ und ist in der Spektroskopie unter dem Namen Natrium-*D*-Linie bekannt. Das Experiment zeigt, dass sie aus zwei Linien besteht, D_1 mit $\lambda = 589.6$ nm und D_2 mit $\lambda = 589.0$ nm. Die Untersuchung der weiteren Übergänge $np \rightarrow 3s$ zeigt auch lauter Dop-

pellinien, deren Abstand mit steigender Hauptquantenzahl n systematisch abnimmt. Aus dieser Systematik kann man schliessen, dass es die p -Niveaus sind, die aufgespalten sind und nicht das $3s$ -Niveau. Ganz allgemein findet man bei wasserstoffähnlichen Atomen, dass alle Niveaus, die Zuständen mit $l \neq 0$ entsprechen in zwei Niveaus aufgespalten sind.

Die beim Wasserstoffatom und der Natrium-Dampfampe beobachtete Aufspaltung einzelner Spektrallinien in Doppellinien ist ein Anzeichen dafür, dass die drei Quantenzahlen n , l und m_l , die den drei Freiheitsgraden eines Massepunkts entsprechen, nicht zur Beschreibung des Zustands eines Elektrons genügen. Es muss eine vierte Quantenzahl, die wir m_s nennen, eingeführt werden. Die Doppellinien deuten an, dass diese neue Quantenzahl m_s zwei Werte annehmen kann.

An dieser Stelle gerät man in Versuchung zu vermuten, dass die neue Quantenzahl damit zusammenhängen könnte, dass man das Elektron bisher als Massepunkt und nicht als einen Körper endlicher Ausdehnung aufgefasst hat. Jedoch würde dies zu drei weiteren Freiheitsgraden und damit drei zusätzlichen Quantenzahlen führen. Die Begründung der neuen Quantenzahl lieferten Samuel Abraham Goudsmit und George Eugene Uhlenbeck in einer von ihnen 1925 formulierten Hypothese:

Hypothese des Elektronspins

Das Elektron verhält sich als ob es einen Eigendrehimpuls hätte, dessen z -Komponente zwei diskrete Werte (charakterisiert durch die Quantenzahl m_s) annehmen kann. Dieser Eigendrehimpuls wird *Spin* genannt und mit \vec{S} bezeichnet.

Bevor wir uns der Einbindung dieser neuen Grössen in den Formalismus der Quantenmechanik zuwenden, befassen wir uns mit einem Experiment, das einen weiteren Hinweis auf die Existenz des Elektronspins liefert.

13.1.1 Das Stern-Gerlach-Experiment

Otto Stern und Walther Gerlach führten im Jahr 1922 Experimente mit Atomstrahlen durch. Bei ihrem Experiment (siehe Abb. 13.1) erzeugten sie in einer hochevakuierten Apparatur einen Silber-Atomstrahl, indem sie aus einem kleinen Ofen durch ein Blendensystem hindurch Silber-Dampf austreten liessen. Dieser Atomstrahl wurde durch ein stark inhomogenes Magnetfeld (mit

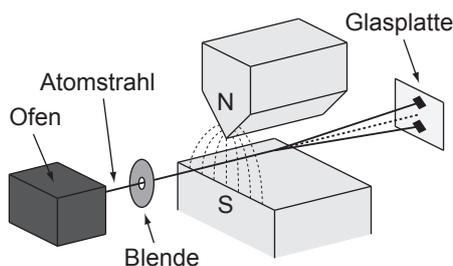


Abb. 13.1: Stern-Gerlach-Experiment: Ein aus einem Ofen durch ein Blendensystem austretender Silber-Atomstrahl wird durch ein starkes inhomogenes Magnetfeld geschickt und auf einer Glasplatte aufgefangen.

$B_z \gg B_x, B_y$) hindurchgeschickt und dann auf einer Glasplatte aufgefangen. Dabei wirkt auf ein Atom die folgende Kraft

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}(-\vec{\mu}\vec{B}) \sim \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{e}_z. \quad (13.1)$$

Bei ausgeschaltetem Magnetfeld läuft der Strahl, wie zu erwarten ist, geradeaus und es entsteht ein Silberfleck auf der Glasplatte, welcher der Blendengeometrie entspricht. Bei eingeschaltetem Magnetfeld würde man nach den bisherigen Erläuterungen zum Zeeman-Effekt (siehe Kapitel 12) eine Aufspaltung in eine ungerade Anzahl (genauer $2l + 1$) von Strahlen und damit Flecken auf der Glasplatte erwarten. Die von Stern und Gerlach in ihrem Experiment verwendeten Silberatome bestehen aus mehreren gefüllten Elektronenschalen und einem Elektron, welches sich im $5s$ -Zustand ($l = 0$) befindet. Der Gesamtdrehimpuls der Elektronen, der „gefüllten“ Schalen, verschwindet. Demzufolge können diese in unseren Betrachtungen vernachlässigt werden und wir können uns alleine auf das äusserste Elektron konzentrieren. Für dieses gilt $l = 0$ ($5s$ -Zustand) und demzufolge würde man keine Aufspaltung erwarten. Wäre das äusserste Elektron angeregt und befindet sich in einem $5p$ -Zustand ($l = 1$), dann würde man als Folge des Zeeman-Effekts eine Aufspaltung in drei Strahlen (Flecken) erwarten.

Das Experiment zeigt jedoch eine Aufspaltung in zwei Strahlen (Flecken). Folglich muss das Elektron einen inneren Bahndrehimpuls (Spin) besitzen, dessen z -Komponente zwei diskrete Werte annehmen kann.

13.2 Einbindung in den Formalismus der Quantenmechanik

Bevor wir uns mit der Einbindung des Elektronspins in den Formalismus der Quantenmechanik befassen, versuchen wir eine klassische Motivation zu geben. Die Idee ist, den Spin (Eigendrehimpuls) und das entsprechende magnetische Moment durch die Rotation des Elektrons um eine feste Achse zu erklären. Schätzt man jedoch die Grösse des Elektrons mit $r_e < 10^{-16}$ m ab, so müsste die Rotationsfrequenz, die benötigt wird, um den beobachteten Bahndrehimpuls und das magnetische Moment zu erklären, so hoch sein, dass die Rotationsgeschwindigkeit am Äquator des Elektrons die Lichtgeschwindigkeit überschreiten würde. Folglich scheitert eine klassische Motivation und wir halten fest:

Es existiert keine klassische Erklärung für das Phänomen des Elektronspins.

Wir kommen zur quantenmechanischen Behandlung. Obwohl kein klassisches Pendant existiert, entsprechen die Eigenschaften des Elektronspins \vec{S} den Eigenschaften des Bahndrehimpulses \vec{L} des Elektrons. Die Einbindung in den Formalismus der Quantenmechanik ergibt sich daher im Wesentlichen aus der Analogie zum Bahndrehimpuls \vec{L} . Jedoch wird sich zeigen, dass die Analogie auch ihre Grenzen hat.

1. Der Spinoperator und die Spinwellenfunktion

Der Bahndrehimpulsoperator \hat{L} ist allgemein als Differentialoperator darstellbar (siehe Abschnitt 9.3.2)

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y\partial/\partial z - z\partial/\partial y \\ z\partial/\partial x - x\partial/\partial z \\ x\partial/\partial y - y\partial/\partial x \end{pmatrix}. \quad (13.2)$$

und wirkt auf die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$.

Im Gegensatz dazu lässt sich der Spinoperator \hat{S} nicht durch einen Differentialoperator darstellen. Dem inneren Freiheitsgrad des Elektrons entspricht nicht eine Raumkoordinate, sondern eine klassisch nicht deutbare *Spinvariable* σ . Jedoch gilt die Analogie insofern, dass wie zu den Ortskoordinaten x, y, z die Ortswellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ gehört, der Spinvariablen σ eine *Spinwellenfunktion* $\chi(\sigma)$ entspricht. Der Spinoperator \hat{S} wirkt auf diese Spinfunktion.

2. Kommutationsregeln

Die Heisenbergsche Unschärferelation steckt in den Kommutationsregeln. Diese sind sozusagen eine physikalische Charakterisierung der Operatoren. Entsprechend der Analogie zwischen Spin und Bahndrehimpuls ergeben sich daher für den Spinoperator \hat{S} die selben Kommutationsregeln wie für den Bahndrehimpulsoperator \hat{L} (siehe Abschnitt 9.3.3). Es gilt

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad \rightarrow \quad [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \quad (13.3)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad \rightarrow \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad (13.4)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad \rightarrow \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y. \quad (13.5)$$

3. Eigenwertgleichungen und Eigenfunktionen

Für den Bahndrehimpulsoperator \hat{L} gelten die folgenden Eigenwertgleichungen (siehe Abschnitt 11.2.2)

$$\hat{L}_z\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t) = \hbar m_l\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t), \quad (13.6)$$

$$\hat{L}^2\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t) = \hbar^2 l(l+1)\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t), \quad (13.7)$$

wobei wir die Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ in Abhängigkeit von Kugelkoordinaten r, φ und ϑ ausgedrückt haben. Für die beiden Quantenzahlen l und m_l gilt dabei

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1), \quad (13.8)$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (13.9)$$

Dementsprechend gibt es für ein festes l ($2l+1$) Eigenfunktionen von \hat{L}_z . Weiter gilt, dass die Quantenzahlen n, l und m_l verändert werden können, zum Beispiel durch die Einstrahlung von Photonen und dass sich die

Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(r, \vartheta, \varphi, t)|^2 dV$ sich für grosse Quantenzahlen der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit nähert, d.h. es gilt das *Korrespondenzprinzip*.

Analog gelten für den Spinoperator \hat{S} die folgenden Eigenwertgleichungen

$$\hat{S}_z \chi_{m_s}(\sigma) = \hbar m_s \chi_{m_s}(\sigma), \quad (13.10)$$

$$\hat{S}^2 \chi_{m_s}(\sigma) = \hbar^2 s(s+1) \chi_{m_s}(\sigma), \quad (13.11)$$

wobei die Quantenzahl m_s ($2s+1$) Werte annehmen kann. Nach der von Goudsmit und Uhlenbeck formulierten Hypothese des Elektronspins muss also gelten $(2s+1) = 2$ und demzufolge $s = 1/2$ als einziger möglicher Wert für s und $m_s = \pm 1/2$. Wir halten fest:

Der Spin des Elektrons wird durch die Quantenzahlen $s = 1/2$ und $m_s = \pm 1/2$ charakterisiert. Wir sagen, das Elektron besitzt den Spin $1/2$. Entsprechend gelten die folgenden Eigenwertgleichungen

$$\hat{S}_z \chi_{\pm 1/2}(\sigma) = \pm \frac{1}{2} \hbar \chi_{\pm 1/2}(\sigma), \quad (13.12)$$

$$\hat{S}^2 \chi_{\pm 1/2}(\sigma) = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{\pm 1/2}(\sigma). \quad (13.13)$$

Der Zustand $\chi_{+1/2}(\sigma)$ wird als „*spin up*“ und der Zustand $\chi_{-1/2}(\sigma)$ als „*spin down*“ bezeichnet.

Im Gegensatz zu den Quantenzahlen n , l und m_l , ist also s unveränderlich¹. Weiter ist der Übergang zu hohen Quantenzahlen nicht möglich, der Spin hat kein klassisches Analogon.

4. Das magnetische Moment

Obwohl der Spin klassisch nicht erfasst werden kann, ist es manchmal ganz nützlich, wenn man sich unter dem Elektron ein rotierendes geladenes Kügelchen vorstellt. Aufgrund dieser Vorstellung erwartet man zum Beispiel ein dem Spin entsprechendes magnetisches Moment $\vec{\mu}^{(s)}$. Jedoch zeigt sich hier, dass die Analogie zum Bahndrehimpuls \vec{L} ihre Grenzen hat. Denn es gilt für die z-Komponente des magnetischen Moments μ_z (siehe Abschnitt 12.2) bzw. $\mu_z^{(s)}$ hervorgerufen durch den Bahndrehimpuls \vec{L} bzw. Spin \vec{S} des Elektrons

$$\mu_z = -\mu_B m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad (13.14)$$

$$\mu_z^{(s)} = -g_0 \mu_B m_s, \quad m_s = \pm 1/2, \quad (13.15)$$

wobei $g_0 = 2.00231923$ *gyromagnetischer Faktor* genannt wird. Damit ist das gyromagnetische Verhältnis γ , d.h. das Verhältnis zwischen magnetischem Moment und Bahndrehimpuls bzw. Spin, beim Spin des Elektrons mehr als doppelt so gross wie beim Bahndrehimpuls².

¹Aus diesem Grund verzichten wir auch auf den Index s bei den Eigenfunktionen $\chi_{m_s}(\sigma)$.

²Es gilt: $\gamma_{\text{Spin}} = g_0 \mu_B / \hbar$ und $\gamma_{\text{Bahndrehimpuls}} = \mu_B / \hbar$.

5. Die Zeeman-Aufspaltung

Nach Abschnitt 12.3 gilt für das Elektron des Wasserstoffatoms unter Vernachlässigung des Spins im Zustand $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$: Die Energieniveaus $E_n = -E_R/n^2$ charakterisiert durch die Quantenzahl n spalten sich im homogenen externen Magnetfeld \vec{B} in $(2l + 1)$ Niveaus $E_{n,m_l} = -E_R/n^2 + \mu_B B m_l$ charakterisiert durch die Quantenzahlen n und m_l mit Abstand $\Delta = \mu_B B$ auf. Der entsprechende Hamilton-Operator \hat{H} ist gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m} \hat{L}_z \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (13.16)$$

Entsprechend gilt für ein freies Elektron der festen Energie E mit Spin σ im Zustand $\chi_{m_s}(\sigma)$: Das Energieniveau E spaltet sich in zwei Niveaus $E_{m_s=+1/2} = E + g_0 \mu_B B/2$ und $E_{m_s=-1/2} = E - g_0 \mu_B B/2$ auf charakterisiert durch die Quantenzahl m_s mit dem folgenden Abstand

$$\Delta^{(s)} = g_0 \mu_B B. \quad (13.17)$$

Der entsprechende Hamilton-Operator \hat{H} ist gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g_0 \frac{eB}{2m} \hat{S}_z \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (13.18)$$

Bemerkung

Es sei bemerkt, dass das Elektron nicht das einzige Elementarteilchen ist, das einen Spin aufweist. Das Proton und das Neutron besitzen ebenfalls den Spin $1/2$. Die entsprechenden magnetischen Momente μ_p und μ_n sind unterschiedlich, jedoch beide von der Grössenordnung des Kernmagnetons

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p}, \quad (13.19)$$

wobei m_p die Masse des Protons bezeichnet. Das Kernmagneton μ_K ist 1836 mal kleiner als das Bohr-Magneton μ_B . Interessant ist dabei vor allem auch die Tatsache, dass das Neutron, obwohl es keine Ladung besitzt ein magnetisches Moment aufweist.

Neben den Elementarteilchen besitzen auch einige Atomkerne einen Spin. Es existieren Kerne mit ganzzahligem $(1, 2, 3, \dots)$ und Kerne mit halbzahligem $(1/2, 3/2, 5/2, \dots)$ Spin. Alle Atomkerne mit Spin besitzen ein entsprechendes magnetisches Moment, das von der Grössenordnung von μ_K ist. Dabei hängt das Verhältnis zwischen Spin und magnetischem Moment jeweils von der Kernsorte ab.

13.3 Die Pauli-Matrizen

Als nächstes lernen wir eine elegante mathematische Darstellung für den Elektronspin \vec{S} kennen. Der Spin ist eine physikalische Observable und deshalb ist

der entsprechende Operator \hat{S}_z hermitesch. Nach Satz 9.5 lässt sich demnach jede beliebige Spinfunktion $\chi(\sigma)$ als Linearkombination der beiden orthogonalen (siehe Satz 9.3) und normierten Eigenfunktionen $\chi_{+1/2}(\sigma)$ und $\chi_{-1/2}(\sigma)$ schreiben

$$\chi(\sigma) = \alpha_+ \chi_{+1/2}(\sigma) + \alpha_- \chi_{-1/2}(\sigma), \quad (13.20)$$

wobei $\alpha_+, \alpha_- \in \mathbb{C}$ und aufgrund der Normierung

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1. \quad (13.21)$$

In anderen Worten: Die Eigenfunktionen $\chi_{+1/2}(\sigma)$ und $\chi_{-1/2}(\sigma)$ bilden die Basis des zweidimensionalen Raums der Spinfunktionen $\chi(\sigma)$ und wir können sie als zweidimensionale Spaltenvektoren schreiben

$$\chi_{+1/2}(\sigma) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi_{-1/2}(\sigma) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (13.22)$$

Entsprechend lautet nach (13.20) die allgemeine Spinfunktion $\chi(\sigma)$ in dieser Darstellung

$$\chi(\sigma) = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}. \quad (13.23)$$

In dieser Darstellung entsprechen die Operatoren \hat{S}_x , \hat{S}_y und \hat{S}_z Matrizen. Es gilt

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (13.24)$$

wobei σ_x , σ_y und σ_z den sogenannten *Pauli-Matrizen* entsprechen und gegeben sind durch (für eine Herleitung der Pauli-Matrizen verweisen wir auf Anhang K)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (13.25)$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass wenn wir nicht die z-Achse ausgezeichnet hätten, sondern die x- oder y-Achse, dann wäre nicht \hat{S}_z , sondern entsprechend \hat{S}_x oder \hat{S}_y diagonal. Der Spinoperator \hat{S} lautet entsprechend

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \quad (13.26)$$

und das Quadrat \hat{S}^2 des Spinoperators

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (13.27)$$

13.3.1 Leiteroperatoren

Oft werden zusätzlich die sogenannten *Leiteroperatoren* \hat{S}_+ und \hat{S}_- eingeführt, die, wie wir sehen werden, einen Zustandswechsel bewirken.

Definition 13.1 Die *Leiteroperatoren* \hat{S}_+ und \hat{S}_- sind definiert als

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad (13.28)$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \quad (13.29)$$

In Matrixschreibweise ergeben sich mit (13.24) folgende Darstellungen

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (13.30)$$

$$\hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (13.31)$$

Die Anwendung der Leiteroperatoren auf die beiden Zustände $(1, 0)$ und $(0, 1)$ ergibt somit

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad (13.32)$$

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (13.33)$$

$$\hat{S}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (13.34)$$

$$\hat{S}_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \quad (13.35)$$

Wir sehen, wie zu Beginn angedeutet, dass die Leiteroperatoren \hat{S}_+ und \hat{S}_- einen Zustandswechsel bewirken. Genauer ausgedrückt, erhöht der Operator \hat{S}_+ die dem Zustand entsprechende Quantenzahl m_s um 1 und der Operator \hat{S}_- erniedrigt sie um 1. Entsprechend wird in Analogie zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator (siehe Kapitel 10) \hat{S}_+ *Erzeugungsoperator* und \hat{S}_- *Verichtungsoperator* genannt.

13.4 Zusammenfassung

- Verschiedene experimentelle Beobachtungen wie die Aufspaltung der ersten Linie der Balmer-Serie des Wasserstoffatoms oder der gelben Linie der Natrium-Dampfampe in eine Doppellinie weisen auf das Auftreten einer Feinstruktur in atomaren Spektren hin. Diese Resultate führten zur Hypothese des Elektronspins: Das Elektron verhält sich als ob es einen Eigendrehimpuls hätte, dessen z-Komponente zwei diskrete Werte (charakterisiert durch die Quantenzahl m_s) annehmen kann. Dieser Eigendrehimpuls wird Spin genannt und mit \vec{S} bezeichnet.

- Die Hypothese des Elektronspins wird durch das Stern-Gerlach-Experiment bestätigt, bei dem ein Silber-Atomstrahl ein starkes inhomogenes Magnetfeld passiert und dadurch - gegen die bisherigen Vermutungen - in zwei Strahlen aufgespaltet wird.
- Es zeigt sich, dass für das Phänomen des Elektronspins keine klassische Erklärung existiert. Dennoch entsprechen die Eigenschaften des Elektronspins im Wesentlichen denjenigen des Bahndrehimpulses des Elektrons. Tab. 13.1 zeigt eine Gegenüberstellung der wichtigsten Eigenschaften des Elektronspins und des Bahndrehimpulses.

	Bahndrehimpuls \vec{L}	Spin \vec{S}
Operator	\hat{L}	\hat{S}
Wellenfunktion	$\psi(x, y, z, t)$	$\chi(\sigma)$
Kommutationsregeln	$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$ $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$	$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$ $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$ $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$
Eigenfunktionen	$\psi_{n,l,m_l}(x, y, z, t)$	$\chi_{m_s}(\sigma)$
Eigenwerte	$\hat{L}_z: \hbar m_l$ $\hat{L}^2: \hbar^2 l(l+1)$	$\hat{S}_z: \hbar m_s$ $\hat{S}^2: 3/4\hbar^2$
Quantenzahlen	$n \in \mathbb{N}$ $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$	$s = 1/2$ $m_s = \pm 1/2$
magnetisches Moment	$\mu_z = -\mu_B m_l$	$\mu_z^{(s)} = -g_0 \mu_B m_s$
Zeeman-Aufspaltung	$\Delta = \mu_B B$	$\Delta^{(s)} = g_0 \mu_B B$

Tab. 13.1: Gegenüberstellung der wichtigsten Eigenschaften des Bahndrehimpulses \vec{L} und des Elektronspins \vec{S} , wobei σ eine klassisch nicht deutbare Spinvariable, $\mu_B = e\hbar/(2m)$ das Bohr-Magneton und $g_0 = 2.00231923$ der gyromagnetischer Faktor ist.

- Neben dem Elektron besitzen auch das Proton und das Neutron den Spin 1/2. Ebenfalls einen Spin weisen Atomkerne auf.
- Eine elegante mathematische Darstellung für den Elektronspin sind die sogenannten Pauli-Matrizen. Dieser Darstellung zugrunde liegt die Tatsache, dass jede beliebige Spinfunktion als Linearkombination der beiden orthogonalen und normierten Eigenfunktionen $\chi_{+1/2}(\sigma)$ und $\chi_{-1/2}(\sigma)$ geschrieben werden kann. Der Raum der Spinfunktionen ist demzufolge zweidimensional mit den Eigenfunktionen $\chi_{+1/2}(\sigma)$ und $\chi_{-1/2}(\sigma)$ als Basis. Eine beliebige Spinfunktion kann deshalb als zweidimensionaler Spaltenvektor geschrieben werden und die Operatoren $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}$ und \hat{S}^2 als Matrizen.

Kapitel 14

Die Spin-Bahn-Kopplung

Wie in Kapitel 13 angedeutet, befassen wir uns in diesem Kapitel mit der Wechselwirkung zwischen dem Elektronspin und dem Bahndrehimpuls des Elektrons. Diese Wechselwirkung wird *Spin-Bahn-Kopplung* genannt und liefert die Erklärung der im Experiment beobachteten *Feinstruktur*. D.h. sie erklärt z.B. die Aufspaltung der ersten Linie der Balmer-Serie ($n = 3 \rightarrow n = 2$) des Wasserstoffatoms oder die Aufspaltung der Natrium-D-Linie in zwei Linien.

Wir beginnen mit einer klassischen Beschreibung und geben eine Abschätzung der Grössenordnung der Spin-Bahn-Kopplung an. Anschliessend erfolgt ein kurzer Abriss der quantenmechanischen Behandlung und zum Abschluss des Kapitels befassen wir uns mit dem Einfluss eines externen Magnetfelds auf das Energiediagramm eines Atoms unter Einbezug des Elektronspins, d.h. dem sogenannten *anomalen Zeeman-Effekt*.

14.1 Semiklassisches Modell

Wir zeigen in einem semiklassischen Modell wie man die Aufspaltung der Energieniveaus mit Bahndrehimpulsquantenzahl $l \neq 0$ bei Einelektronenatomen und damit insbesondere beim Wasserstoffatom, mit der Hilfe der Hypothese des Elektronspins erklären kann. Dazu betrachten wir eine Momentaufnahme eines Atoms mit einem Elektron, das den Kern der Ladung $+Ze$ umkreist einerseits aus der Sicht eines Beobachters im Ruhesystem des Kerns (siehe Abb. 14.1(a)) und andererseits aus der Sicht eines Beobachters im Ruhesystem des Elektrons (siehe Abb. 14.1(b)). In diesem rotierenden Bezugssystem des Elektrons erzeugt die Bahnbewegung des positiv geladenen Kerns ein Magnetfeld \vec{B} . Dieses wechselwirkt mit dem magnetischen Moment $\mu_z^{(s)}$ des Elektronspins und daher erhält das Elektron die zusätzliche potentielle Energie $V_{m_s}^{\text{semi}}$, welche nach Abschnitt 13.2 gegeben ist durch

$$V_{m_s}^{\text{semi}} = -\mu_z^s B = g_0 \mu_B m_s B. \quad (14.1)$$

D.h. jeder elektronische Zustand in einem Einelektronensystem mit nichtverschwindendem Bahndrehimpuls spaltet aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung in zwei Zustände mit unterschiedlicher Energie auf. Auf die Begründung und die

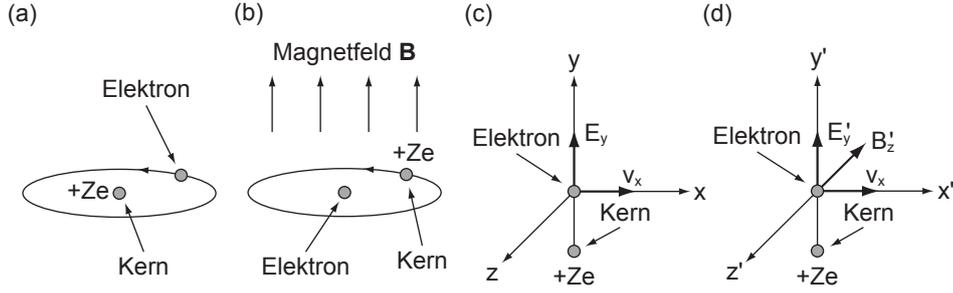


Abb. 14.1: Illustration der Spin-Bahn-Kopplung bei wasserstoffähnlichen Atomen mit Kernladung Ze : Aus der Sicht eines Beobachters (a), (c) im Ruhesystem des Kern und (b), (d) im Ruhesystem des Elektrons.

Bestimmung des Magnetfelds, welches ein Beobachter im Ruhesystem des Elektrons wahrnimmt und die daraus resultierende Aufspaltung der Energieniveaus gehen wir nun etwas genauer ein.

Im Ruhesystem xyz des Kerns (siehe Abb. 14.1(c)) befindet sich das Elektron im betrachteten Augenblick im Ursprung. Einfachheit halber nehmen wir an, dass die Geschwindigkeit des Elektrons in diesem Moment entlang der x -Achse gerichtet sei. Ein in diesem System xyz ruhender Beobachter sagt dann, dass der Kern ein elektrisches Feld erzeugt, das im Ursprung parallel zur y -Achse gerichtet ist und den Betrag $E_y = Ze/(4\pi\epsilon_0 r^2)$ hat, wobei r der Abstand zwischen Kern und Elektron ist. In dieser Betrachtung vernachlässigen wir das (kleine) magnetische Moment des Kerns und deshalb nimmt der Beobachter im Ruhesystem des Kerns kein Magnetfeld wahr.

Wir wechseln nun zu einem Beobachter im Ruhesystem $x'y'z'$ des Elektrons (siehe Abb. 14.1(d)) und fragen uns, welche elektromagnetischen Felder dieser wahrnimmt. Die Anwendung der Transformationsformeln der speziellen Relativitätstheorie ergeben für die Komponenten des Magnetfelds B'_x , B'_y und B'_z , welches der Beobachter im Ruhesystem $x'y'z'$ des Elektrons feststellt

$$B'_x = B_x = 0, \quad (14.2)$$

$$B'_y = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \left(B_y + \frac{1}{c^2} v E_z \right) = 0, \quad (14.3)$$

$$B'_z = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \left(B_z - \frac{1}{c^2} v E_y \right) \sim -\frac{1}{c^2} v E_y, \quad (14.4)$$

wobei $v = v_x$ und wir im letzten Schritt die Näherung $v^2/c^2 \ll 1$ getroffen haben. Der Beobachter im Ruhesystem $x'y'z'$ des Elektrons stellt also ein Feld \vec{B}' fest, das senkrecht steht auf $\vec{v} = (v_x, 0, 0)$ und $\vec{E} = (0, E_y, 0)$. Allgemein können wir dies durch ein Vektorprodukt ausdrücken. Es gilt

$$\vec{B}' = \frac{1}{c^2} (\vec{E} \times \vec{v}) = \frac{1}{mc^2} (\vec{E} \times \vec{p}), \quad (14.5)$$

wobei wir die Geschwindigkeit \vec{v} durch den Impuls \vec{p} ausgedrückt haben. Das elektrische Feld \vec{E}' im System $x'y'z'$ ist in der Näherung $v^2/c^2 \ll 1$ identisch

mit dem elektrischen Feld \vec{E} im System xyz , denn es gilt

$$E'_x = B_x = 0, \quad (14.6)$$

$$E'_y = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} (E_y - vB_z) \sim E_y, \quad (14.7)$$

$$E'_z = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} (E_z + vB_y) = 0. \quad (14.8)$$

Das Magnetfeld \vec{B}' , welches das Elektron aufgrund seiner Relativbewegung zum Kern wahrnimmt, hat zur Folge, dass das Elektron in den beiden Spinzuständen, die durch die Quantenzahl $m_s = \pm 1/2$ charakterisiert sind, verschiedene Energie hat. Die Aufspaltung $\Delta^{(s)}$ ist nach (13.17) gegeben durch

$$\Delta^{(s)} = g_0 \mu_B |\vec{B}'|. \quad (14.9)$$

Mit (14.5), $\vec{E} = Ze\vec{r}/(4\pi\epsilon_0 r^3)$ und $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \Delta^{(s)} &= g_0 \mu_B \frac{1}{mc^2} |\vec{E} \times \vec{p}| \\ &= g_0 \mu_B \frac{1}{mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r^2} \left| \frac{\vec{r}}{r} \times \vec{p} \right| \\ &= g_0 \mu_B \frac{1}{mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r^3} |\vec{L}|. \end{aligned} \quad (14.10)$$

Dieser Ausdruck ist nicht ganz korrekt, da wir angenommen haben, dass sich das Elektron geradlinig bewege. Da das Elektron aufgrund des Spins einen kleinen Kreisel darstellt, spielt es eine Rolle, ob es geradeaus läuft oder den Atomkern umkreist, wie von Llewellyn Thomas um 1926 gezeigt wurde. Die Berücksichtigung dieser sogenannten *Thomas-Präzession* reduziert die Aufspaltung $\Delta^{(s)}$ um einen Faktor zwei¹. Demzufolge lautet die korrekte Formel²

$$\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}} = \frac{g_0}{2} \mu_B \frac{1}{mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r^3} |\vec{L}|. \quad (14.11)$$

Die Energiedifferenz $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ wird *Spin-Bahn-Aufspaltung* genannt, weshalb wir den Index SB hinzugefügt haben. Den oberen Index s haben wir durch den oberen Index semi ersetzt, der andeuten soll, dass unsere Herleitung semiklassisch erfolgte. Diese Spin-Bahn-Aufspaltung erklärt insbesondere die Aufspaltung der Spektrallinien beim Wasserstoffatom und die Aufspaltung der Natrium-D-Linie.

14.1.1 Grössenordnung der Spin-Bahn-Kopplung

Ausgehend von der Formel (14.5) für die Spin-Bahn-Aufspaltung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ schätzen wir die Grössenordnung der Spin-Bahn-Kopplung auf der Grundlage des Bohrschen Atommodells (siehe Kapitel 8) für ein Einelektronenatom ab. D.h. wir nehmen an, dass das Elektron den Kern (Ladung Ze) auf einer Kreisbahn mit Radius $r = a_0 n^2$ (8.27) umkreist und einen Bahndrehimpuls $|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ (11.47)

¹Die Herleitung der Thomas-Präzession erfordert eine aufwendige relativistische Berechnung. Wir verweisen dazu auf weiterführende Literatur [2].

²Zur Zeit der Entdeckung des Elektronspins herrschte anfänglich eine grosse Konfusion, da der Faktor g_0 sehr nahe bei zwei liegt und sich in guter Näherung gegen den Thomas-Faktor verkürzen lässt.

besitzt. Damit ergibt sich für die Spin-Bahn-Aufspaltung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ die folgende Abschätzung

$$\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}} = \frac{g_0}{2} \mu_{\text{B}} \frac{1}{mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{a_0^3 n^6} \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (14.12)$$

Einsetzen von $\mu_{\text{B}} = e\hbar/2m$ und $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2)$ ergibt

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}} &= \frac{\sqrt{l(l+1)}}{n^6} \frac{g_0}{2} Z \underbrace{\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}}_{=E_{\text{R}}} \underbrace{\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\right)^2}_{=\alpha^2} \\ &= \frac{\sqrt{l(l+1)}}{n^6} \frac{g_0 Z E_{\text{R}} \alpha^2}{2} \\ &\sim \frac{\sqrt{l(l+1)}}{n^6} \frac{Z E_{\text{R}}}{137^2} \\ &= \frac{\sqrt{l(l+1)}}{n^6} \cdot Z \cdot 7.24 \cdot 10^{-4} \text{ eV}, \end{aligned} \quad (14.13)$$

wobei wir verwendet haben, dass $g_0 \sim 2$, die *Feinstrukturkonstante* $\alpha \sim 1/137$ (siehe Gl. (8.50)) und die Rydberg-Energie $E_{\text{R}} = 13.6 \text{ eV}$ (siehe Abschnitt 11.2.3). Da man die Spin-Bahn-Aufspaltung Feinstruktur nennt, ergibt sich in diesem Zusammenhang die Begründung des Namen Feinstrukturkonstante für α .

Bemerkungen

- Das einfache semiklassische Modell sagt voraus, dass die Spin-Bahn-Aufspaltung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ für Eielektronenatome mit steigender Kernladungszahl Z zunimmt, was im Experiment bestätigt wird. Insbesondere wird dieser Effekt auch bei den Alkali-Atomen (siehe Abschnitt 16.4.1) beobachtet.
- Ebenfalls erwartet man, dass die Spin-Bahn-Aufspaltung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ verschwindet, wenn die Bahndrehimpulsquantenzahl l und somit der Betrag des Bahndrehimpulses gleich null ist. Tatsächlich trifft dies zu, die Spin-Bahn-Kopplung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ verschwindet für s -Zustände. Dies kommt auch im Erwartungswert $\langle r \rangle$ für den Bahnradius zum Ausdruck, der für s -Zustände verschwindet. Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass das Verschwinden der z -Komponente des Bahndrehimpulses ($m_l = 0$) keine ausreichende, sondern nur eine notwendige Bedingung für das Verschwinden der Spin-Bahn-Aufspaltung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ darstellt.
- Zum Beispiel beträgt die Spin-Bahn-Aufspaltung des Wasserstoffatoms ($Z = 1$) für den $2p$ -Zustand $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}} = 1.60 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$.

14.2 Quantenmechanische Beschreibung

Die bisherigen Betrachtungen beruhen im Wesentlichen auf dem Bohrschen Atommodell. Jedoch ist dieses Modell und daher auch die Ausführungen in Abschnitt 14.1 zur Spin-Bahn-Kopplung nur begrenzt gültig (siehe Abschnitt 8.6).

Abhilfe schafft nur die rein quantenmechanische Beschreibung, auf die wir nun in diesem Abschnitt eingehen werden. Wir beschränken uns dabei auf die Behandlung des Wasserstoffatoms (Einelektronenatom mit Kernladungszahl $Z = 1$).

14.2.1 Der Hamilton-Operator der Spin-Bahn-Kopplung

Zur Bestimmung des Hamilton-Operators \hat{H}_{SB} der Spin-Bahn-Kopplung des Wasserstoffatoms stellen wir als erstes die entsprechende Hamilton-Funktion H_{SB} auf. Sie ist gegeben durch die Energie des magnetischen Moments (in Analogie zu Gl. (12.8))

$$\vec{\mu} = -g_0 \frac{e}{2m} \vec{S} \quad (14.14)$$

des Elektronenspins \vec{S} im Magnetfeld (siehe Gl. (14.5))

$$\vec{B} = \frac{1}{c^2} (\vec{E} \times \vec{v}), \quad (14.15)$$

welches das Elektron in seinem Ruhesystem wahrnimmt. Damit ergibt sich mit $\vec{v} = \vec{p}/m$, $\vec{E} = e\vec{r}/(4\pi\epsilon_0 r^3)$ und $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ für die Hamilton-Funktion H_{SB} den folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned} H_{\text{SB}} &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \\ &= g_0 \frac{e}{2m} \vec{S} \cdot \frac{1}{c^2} (\vec{E} \times \vec{v}) \\ &= g_0 \frac{e}{2m} \vec{S} \cdot \frac{1}{mc^2} (\vec{E} \times \vec{p}) \\ &= g_0 \frac{e}{2m} \vec{S} \cdot \frac{1}{mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r^3} (\vec{r} \times \vec{p}) \\ &= g_0 \frac{e^2}{8\pi m^2 c^2 \epsilon_0 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L} \\ &= g_0 \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}, \end{aligned} \quad (14.16)$$

wobei $\mu_0 = 1/(\epsilon_0 c^2) = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Vs}/(\text{Am})$ die *magnetische Feldkonstante* ist. Analog zu Abschnitt 14.1 reduziert die Berücksichtigung der Thomas-Präzession diesen Ausdruck um zwei und wir erhalten für den Hamilton-Operator \hat{H}_{SB} der Spin-Bahn-Kopplung

$$\hat{H}_{\text{SB}} = \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \hat{S} \cdot \hat{L}. \quad (14.17)$$

Damit ergibt sich für den Hamilton-Operator \hat{H} des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SB}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \hat{S} \cdot \hat{L}, \quad (14.18)$$

wobei wir den Hamilton-Operator ohne Spin-Bahn-Kopplung mit \hat{H}_0 bezeichnet haben.

14.2.2 Verknüpfung der Spinvariablen mit der Ortswellenfunktion

Ein Elektron mit Spin wird durch die Ortsvariablen x , y und z , sowie die klassisch nicht deutbare, abstrakte Spinvariable σ beschrieben (siehe Kapitel 13). Diese kann nur zwei verschiedene Werte annehmen, die wir mit „ \uparrow “ und „ \downarrow “ bezeichnen. Diese Eigenschaft widerspiegelt sich auch in den Eigenwerten des Operators \hat{S}_z , welche gegeben sind durch $+\hbar/2$ und $-\hbar/2$.

Wie zu den Ortsvariablen x , y und z die Ortswellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ gehört, ist der Spinvariablen σ die abstrakte Spinwellenfunktion $\chi(\sigma)$ zugeordnet. Es stellt sich nun die Frage, wie diese beiden bisher unabhängig voneinander betrachteten Systeme (Ort und Spin) kombiniert werden können. Oder in anderen Worten: Das Ziel ist, dass wir den Zustand eines Elektrons, welches durch die Variablen x , y , z und σ beschrieben wird, durch eine Gesamtwellenfunktion $\psi(x, y, z, \sigma, t)$ charakterisieren können, die die Spinvariable σ enthält und folgendermassen zu deuten ist:

$\psi^*(x, y, z, \sigma, t)\psi(x, y, z, \sigma, t)dxdydz$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass man ein Elektron zur Zeit t im Volumenelement $dxdydz$ am Ort (x, y, z) mit dem Wert σ der Spinvariablen antrifft. Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit, dass man das Elektron zur Zeit t im besagten Volumenelement antrifft entweder mit dem Wert „ \uparrow “ oder „ \downarrow “ der Spinvariablen gegeben durch

$$\psi^*(x, y, z, \uparrow, t)\psi(x, y, z, \uparrow, t)dxdydz + \psi^*(x, y, z, \downarrow, t)\psi(x, y, z, \downarrow, t)dxdydz. \quad (14.19)$$

Dieser Ausdruck erfüllt die Normierungsbedingung, d.h. das Integral über den gesamten Ortsraum ergibt 1.

Im Zusammenhang mit der Verknüpfung der Spinvariablen σ mit der Ortswellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ ergeben sich wie zum Teil schon angedeutet die folgenden Fragen:

1. Darf die Spinvariable σ als von den Ortskoordinaten x , y , z unabhängige Variable betrachtet werden?
2. Wie hängen die Ortswellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ und die Spinwellenfunktion $\chi(\sigma)$ mit der Wellenfunktion $\psi(x, y, z, \sigma, t)$ zusammen?
3. Wie berechnet man Erwartungswerte, Eigenwerte und Eigenfunktionen von Operatoren für das Gesamtsystem Ort und Spin?

Wir werden hier auf diese Fragen eingehen. Wie in Kapitel 11 wechseln wir dazu von den kartesischen Ortskoordinaten x , y und z zu den Kugelkoordinaten r , ϑ und φ , d.h. das Elektron des Wasserstoffatoms wird durch die Ortskoordinaten r , ϑ und φ und die Spinvariable σ charakterisiert.

Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung

Wir vernachlässigen in einem ersten Schritt die Spin-Bahn-Kopplung und werden sie erst in den nächsten Abschnitten wieder in unsere Betrachtungen einbinden. Damit ist die Frage 1 beantwortet, da in diesem Fall die Spinvariable σ von den Ortsvariablen r , ϑ und φ unabhängig ist. Wir kommen nun zu den Fragen 2 und 3.

Die Gesamtwellenfunktion des Wasserstoffatoms

Wie erwähnt ist unser Ziel, die Wellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ als Funktion der Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ und der Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ des Wasserstoffatoms auszudrücken. Die Frage, die sich nun stellt, ist nach welchen Kriterien wir dabei vorgehen müssen. Dabei wird sich die Tatsache, dass bei vernachlässigter Spin-Bahn-Kopplung die beiden Spinoperatoren \hat{S}^2 und \hat{S}_z einzeln mit den Ortsoperatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z kommutieren, als entscheidend erweisen.

Zur Festlegung eines Kriteriums betrachten wir das Ort- und Spinsystem nochmals einzeln und untersuchen, durch was ein Zustand im jeweiligen System eindeutig bestimmt ist. Im Ortssystem gibt es verschiedene Möglichkeiten einen Zustand eindeutig festzulegen:

1. Angabe der Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$.
2. Angabe der Quantenzahlen n , l und m_l .
3. Angabe der Werte der Observablen Energie E_n , Quadrat des Bahndrehimpulsvektors \vec{L}^2 und z-Komponente des Bahndrehimpulsvektors L_z , d.h. Angabe der Eigenwerte zur gemeinsamen Eigenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ der kommutierenden Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z . In anderen Worten, ein Zustand wird durch die Angabe der Eigenwerte der drei kommutierenden Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z vollständig beschrieben. Man sagt dann: Die drei Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z bilden einen *vollständigen Satz kommutierender Operatoren*.

Analog ergeben sich für das Spinsystem die folgenden Möglichkeiten einen Zustand eindeutig festzulegen:

1. Angabe der Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$.
2. Angabe der Quantenzahlen s und m_s .
3. Angabe der Werte der Observablen Quadrat des Spinvektors \vec{S}^2 und z-Komponente des Spinvektors S_z , d.h. Angabe der Eigenwerte zur gemeinsamen Eigenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ der kommutierenden Operatoren \hat{S}^2 und \hat{S}_z . In anderen Worten, ein Zustand wird durch die Angabe der Eigenwerte der zwei kommutierenden Operatoren \hat{S}^2 und \hat{S}_z vollständig beschrieben. Man sagt dann: Die zwei Operatoren \hat{S}^2 und \hat{S}_z bilden einen *vollständigen Satz kommutierender Operatoren*.

Daraus wird ersichtlich, dass die den Zustand beschreibende Wellenfunktion Eigenfunktion eines vollständigen Satzes kommutierender Operatoren ist. Wir haben nun also ein Kriterium gefunden, mit dem wir die Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ in Verbindung mit der Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ und der Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ bringen können.

Der naheliegendste Ansatz für einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren für das Gesamtsystem (Ort und Spin) ist, den vollständigen Satz der kommutierenden Operatoren des Ortssystems \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z mit dem des Spinsystems \hat{S}^2 und \hat{S}_z zusammenzufügen. Tatsächlich ist dies bei vernachlässigter Spin-Bahn-Kopplung der richtige Ansatz, da in diesem Fall das Ort- und Spinsystem zwei unabhängige Systeme darstellen und daher die Spinoperatoren \hat{S}^2 und \hat{S}_z einzeln mit den Ortsoperatoren \hat{H} , \hat{L}^2 und \hat{L}_z kommutieren. Folglich ist die Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ so durch die Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ und Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ auszudrücken, dass diese gleichzeitig Eigenfunktion der Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 und \hat{S}_z ist.

Aufgrund der Unabhängigkeit von Ort- und Spinsystem ist nun auch dieser letzte Schritt einfach. Wir werden zeigen, dass sich die Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ als Produkt von Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ und Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ schreiben lässt, d.h. dass

$$\begin{aligned}\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t) &= \psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)\chi_{m_s}(\sigma) \\ &= u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar}.\end{aligned}\quad (14.20)$$

Wir überprüfen die Richtigkeit dieser Darstellung, indem wir die Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 und \hat{S}_z auf die durch (14.20) definierte Funktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ anwenden:

a) *Hamilton-Operator*

Aufgrund der vernachlässigten Spin-Bahn-Kopplung ist der Hamilton-Operator \hat{H} nach (11.6) gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\quad (14.21)$$

und hängt folglich nicht von der Spinvariable σ , sondern nur von den Ortsvariablen r , ϑ und φ ab. Daher wirkt \hat{H} nur auf den ortsabhängigen Teil $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ der Wellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$, d.h. wir erhalten mit (11.85)

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t) &= (\hat{H}u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi))\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= (E_n u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi))\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= E_n \psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t).\end{aligned}\quad (14.22)$$

b) *Quadrat des Bahndrehimpulsoperators*

Analog erhalten wir mit (11.93)

$$\begin{aligned}\hat{L}^2\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t) &= (\hat{L}^2u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi))\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= (\hbar^2l(l+1)u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi))\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \hbar^2l(l+1)\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t).\end{aligned}\quad (14.23)$$

c) *z-Komponente des Bahndrehimpulsoperators*

Analog erhalten wir mit (11.94)

$$\begin{aligned}\hat{L}_z\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t) &= (\hat{L}_zu_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi))\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \hbar m_l u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)\chi_{m_s}(\sigma)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \hbar m_l \psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t).\end{aligned}\quad (14.24)$$

d) *Quadrat des Spinoperators*

Analog erhalten wir mit (13.11)

$$\begin{aligned}\hat{S}^2\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t) &= (\hat{S}^2\chi_{m_s}(\sigma))u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= (\hbar^2s(s+1)\chi_{m_s}(\sigma))u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \hbar^2s(s+1)\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t).\end{aligned}\quad (14.25)$$

e) *z-Komponente des Spinoperators*

Analog erhalten wir mit (13.10)

$$\begin{aligned}\hat{S}_z\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t) &= (\hat{S}_z\chi_{m_s}(\sigma))u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= (\hbar m_s \chi_{m_s}(\sigma))u_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi)e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= \hbar m_s \psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t).\end{aligned}\quad (14.26)$$

Somit ist die Richtigkeit der Darstellung (14.20) der Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t)$ gezeigt: Die Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r,\vartheta,\varphi,\sigma,t)$ ist das Produkt aus Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi,t)$ und Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$. Dies ist die Antwort auf die Frage 2. Diese Begründung der Gesamtwellenfunktion zeigt zudem, dass Erwartungswerte, Eigenwerte und Eigenfunktionen von Operatoren für das Gesamtsystem Ort und Spin sich aufgrund der Tatsache berechnen lassen, dass Spinoperatoren nur auf die Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ wirken und die Ortsoperatoren nur auf die Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi,t)$.

14.2.3 Der Gesamtdrehimpuls eines Eielektronensystems

Es wird sich im Hinblick auf die quantenmechanische Behandlung der Spin-Bahn-Kopplung (siehe Abschnitt 14.2.4) und die Betrachtung von Mehrelektronenatomen (siehe Kapitel 16) als hilfreich erweisen, den Gesamtdrehimpuls \vec{J} einzuführen:

Definition 14.1 Der **Gesamtdrehimpuls** \vec{J} eines *Einelektronensystems* ist definiert als Summe von Bahndrehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S}

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (14.27)$$

Der entsprechende Gesamtdrehimpulsoperator \hat{J} ergibt sich analog zu

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \quad (14.28)$$

Die im letzten Abschnitt 14.2.2 kennengelernten Produktwellenfunktionen $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t) = \psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)\chi_{m_s}(\sigma)$ sind zwar auch Eigenfunktionen der z-Komponente des Gesamtdrehimpulsoperators $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ zum Eigenwert $\hbar(m_l + m_s)$, jedoch nicht vom Quadrat des Gesamtdrehimpulsoperators \hat{J}^2 , da

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_z] \neq 0 \text{ und } [\hat{J}^2, \hat{S}_z] \neq 0. \quad (14.29)$$

Jedoch ist es für die zu Beginn erwähnten Fragestellungen von Vorteil mit Zuständen zu rechnen, die auch Eigenfunktion von \hat{J}^2 sind. Wir wechseln daher vom bisherigen vollständigen Satz kommutierender Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 und \hat{S}_z zum neuen ebenfalls vollständigen Satz kommutierender Operatoren \hat{H} , \hat{J}^2 , \hat{L}^2 , \hat{S}^2 und \hat{J}_z und suchen die entsprechenden Eigenfunktionen $\Psi_{n,l,j,m_j}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ mit den Eigenwerten E_n , $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar^2 s(s+1)$ und $\hbar m_j$. D.h. unsere Aufgaben sind:

1. Bestimmung der Werte, die die neue Quantenzahl j annehmen kann. Dadurch sind dann auch die Werte von $m_j = m_l + m_s$ bestimmt

$$m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (14.30)$$

2. Ausdrücken der neuen Eigenfunktionen $\Psi_{n,l,j,m_j}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ durch die Produktwellenfunktionen $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$.

Wir verzichten hier auf eine ausführliche Herleitung und geben direkt die Lösung für das Wasserstoffatom an³:

1. Die Quantenzahl j kann die Werte $l \pm s$ annehmen, d.h. $j = l \pm 1/2$, wobei $j \geq 0$.

³Für eine ausführliche Herleitung verweisen wir auf weiterführende Literatur [11].

2. Die Eigenfunktionen Ψ_{n,l,j,m_j} sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \Psi_{n,l,j=l+1/2,m_j} &= \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}}\psi_{n,l,m_l=m_j-1/2,m_s=1/2} \\ &\quad + \sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}}\psi_{n,l,m_l=m_j+1/2,m_s=-1/2}, \end{aligned} \quad (14.31)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{n,l,j=l-1/2,m_j} &= -\sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}}\psi_{n,l,m_l=m_j-1/2,m_s=1/2} \\ &\quad + \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}}\psi_{n,l,m_l=m_j+1/2,m_s=-1/2}, \end{aligned} \quad (14.32)$$

dabei haben wir für eine bessere Übersichtlichkeit auf das Aufführen der unabhängigen Variablen $r, \vartheta, \varphi, \sigma$ und t verzichtet.

Wir betrachten als Beispiel den $1p$ -Zustand, d.h. $l = 1$ und $s = 1/2$. Die Quantenzahl j kann dann die beiden Werte $j = l + s = 3/2$ und $j = l - s = 1/2$ annehmen. Die entsprechenden Eigenfunktionen Ψ_{n,l,j,m_j} sind in Tab. 14.1 dargestellt und Abb. 14.2 zeigt die graphische Darstellung der entsprechenden Gesamtdrehimpulsvektoren im Bezug zur z -Achse.

j	m_j	Ψ_{n,l,j,m_j}
3/2	-3/2	$\Psi_{n,1,3/2,-3/2} = \psi_{n,1,1,1/2}$
	-1/2	$\Psi_{n,1,3/2,-1/2} = \sqrt{2/3}\psi_{n,1,0,1/2} + \sqrt{1/3}\psi_{n,1,1,-1/2}$
	1/2	$\Psi_{n,1,3/2,1/2} = \sqrt{1/3}\psi_{n,1,-1,1/2} + \sqrt{2/3}\psi_{n,1,0,-1/2}$
	3/2	$\Psi_{n,1,3/2,3/2} = \psi_{n,1,-1,-1/2}$
1/2	-1/2	$\Psi_{n,1,1/2,1/2} = -\sqrt{1/3}\psi_{n,1,0,1/2} + \sqrt{2/3}\psi_{n,1,1,-1/2}$
	1/2	$\Psi_{n,1,1/2,-1/2} = -\sqrt{2/3}\psi_{n,1,-1,1/2} + \sqrt{1/3}\psi_{n,1,0,-1/2}$

Tab. 14.1: Die Eigenfunktionen Ψ_{n,l,j,m_j} des vollständigen Satzes von kommutierenden Operatoren $\hat{H}, \hat{J}^2, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ und \hat{J}_z zu den entsprechenden Quantenzahlen j und m_j für den $1p$ -Zustand.

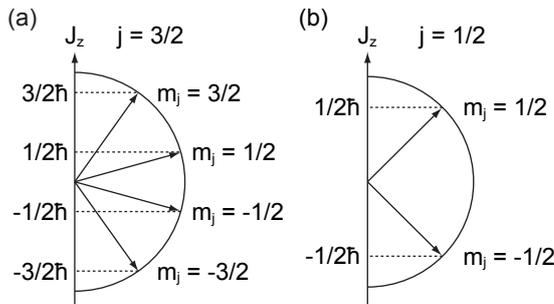


Abb. 14.2: Richtungsquantisierung des Gesamtdrehimpulses für den $1p$ -Zustand: Für die Quantenzahlen (a) $j = 3/2$ und (b) $j = 1/2$ sind jeweils die möglichen Gesamtdrehimpulsvektoren im Bezug zur z -Achse eingezeichnet.

14.2.4 Semiklassisches Modell der Spin-Bahn-Kopplung

Bevor wir auf die rein quantenmechanische Behandlung eingehen werden, befassen wir uns mit einem weiteren semiklassischen Modell der Spin-Bahn-Kopplung.

Als erstes drücken wir den Hamilton-Operator \hat{H}_{SB} , welcher die Spin-Bahn-Kopplung beschreibt, durch den Gesamtdrehimpulsoperator \hat{J} aus und zeigen, dass die Wellenfunktionen Ψ_{n,l,j,m_j} Eigenfunktionen von \hat{H}_{SB} sind. Da die Operatoren \hat{S} und \hat{L} kommutieren, gilt

$$\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{S} \cdot \hat{L} \quad (14.33)$$

und damit

$$\hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \quad (14.34)$$

Einsetzen in (14.17) liefert

$$\hat{H}_{\text{SB}} = \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \quad (14.35)$$

und damit

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{SB}} \Psi_{n,l,j,m_j} &= \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \Psi_{n,l,j,m_j} \\ &= \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \Psi_{n,l,j,m_j} \\ &= \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \Psi_{n,l,j,m_j}. \end{aligned} \quad (14.36)$$

Damit sind die Eigenfunktionen Ψ_{n,l,j,m_j} Eigenfunktionen des Hamilton-Operators \hat{H}_{SB} mit den Eigenwerten

$$E_{\text{SB}}^{\text{semi}} = \frac{a_{\text{SB}}}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4), \quad (14.37)$$

wobei die *Spin-Bahn-Kopplungskonstante* a_{SB} gegeben ist durch

$$a_{\text{SB}} = \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0 \hbar^2}{8\pi m^2 r^3}. \quad (14.38)$$

Indem wir den klassischen Bahnradius r stehengelassen und in die Spin-Bahn-Kopplungskonstante a_{SB} integriert haben, sind wir an dieser Stelle von der rein quantenmechanischen Behandlung abgekommen und zu einer semiklassischen Betrachtung übergegangen.

Die Wellenfunktionen Ψ_{n,l,j,m_j} sind Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H_0 zum Eigenwert $E_n = -E_{\text{R}}/n^2$. Mit (14.37) ergibt sich somit für die Eigenwerte des Gesamt-Hamilton-Operators $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SB}}$ und damit für die Energiewerte $E_{n,l,j}^{\text{semi}}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung

$$E_{n,l,j}^{\text{semi}} = E_n + E_{\text{SB}}^{\text{semi}} = -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} + \frac{a_{\text{SB}}}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4), \quad (14.39)$$

wobei wir für die Energiewerte neu die Indizes l und j eingeführt haben. Wir werden als nächstes diese semiklassische Betrachtung fortsetzen und die daraus abgeleiteten Konsequenzen für das Energiediagramm des Wasserstoffatoms betrachten.

Das Energiediagramm des Wasserstoffatoms

Die Energiewerte $E_{n,l,j}^{\text{semi}}$ des Wasserstoffatoms hängen neu zusätzlich von den Quantenzahlen l und j ab. Für feste Quantenzahlen n und l ergibt sich mit Ausnahme für die s -Zustände ($l = 0$) damit eine Aufspaltung in zwei Energiewerte $E_{n,l,j=l+1/2}^{\text{semi}}$ und $E_{n,l,j=l-1/2}^{\text{semi}}$. Die Energiedifferenz Δ_l^{semi} dieser beiden Zustände ist gegeben durch

$$\Delta_l^{\text{semi}} = E_{n,l,j=l+1/2}^{\text{semi}} - E_{n,l,j=l-1/2}^{\text{semi}} = a_{\text{SB}} \left(l + \frac{1}{2} \right). \quad (14.40)$$

Wir führen nun eine neue in der Literatur übliche Symbolik für die Benennung der Zustände ein:

Ein Zustand mit Hauptquantenzahl n , Bahndrehimpulsquantenzahl l , Spinquantenzahl s und Gesamtdrehimpulsquantenzahl j erhält folgende Bezeichnung

$$n^{2s+1}l_j, \quad (14.41)$$

wobei für l jeweils der entsprechende Buchstabe s ($l = 0$), p ($l = 1$), ... einzusetzen ist.

In Tab. 14.2 sind die Zustände $n^{2s+1}l_j$ und die entsprechenden Energiewerte $E_{n,l,j}^{\text{semi}}$ des Wasserstoffatoms ($s = 1/2$) für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2$ und 3 zusammengestellt. Das entsprechende Energiediagramm (siehe Abb. 14.3) lässt die Spin-Bahn-Kopplung-Aufspaltung für Zustände mit Bahndrehimpulsquantenzahl $l > 0$ erkennen.

n	l	j	$n^{2s+1}l_j$	$E_{n,l,j}^{\text{semi}}$	
1	0	1/2	$1^2s_{1/2}$	$-E_{\text{R}}$	
2	0	1/2	$2^2s_{1/2}$	$-E_{\text{R}}/4$	
		1	1/2	$2^2p_{1/2}$	$-E_{\text{R}}/4 - a_{\text{SB}}$
		3/2	$2^2p_{3/2}$	$-E_{\text{R}}/4 + a_{\text{SB}}/2$	
3	0	1/2	$3^2s_{1/2}$	$-E_{\text{R}}/9$	
		1	1/2	$3^2p_{1/2}$	$-E_{\text{R}}/9 - a_{\text{SB}}$
		3/2	$3^2p_{3/2}$	$-E_{\text{R}}/9 + a_{\text{SB}}/2$	
	2	3/2	$3^2d_{3/2}$	$-E_{\text{R}}/9 - 3a_{\text{SB}}/2$	
		5/2	$3^2d_{5/2}$	$-E_{\text{R}}/9 + a_{\text{SB}}$	

Tab. 14.2: Die Zustände $n^{2s+1}l_j$ und die entsprechenden Energiewerten $E_{n,l,j}^{\text{semi}}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2$ und 3 .

14.2.5 Rein quantenmechanische Betrachtung der Spin-Bahn-Kopplung

Da wir die wesentlichen Merkmale der Spin-Bahn-Kopplung und deren Auswirkungen auf das Energiediagramm des Wasserstoffatoms bereits mit unserem

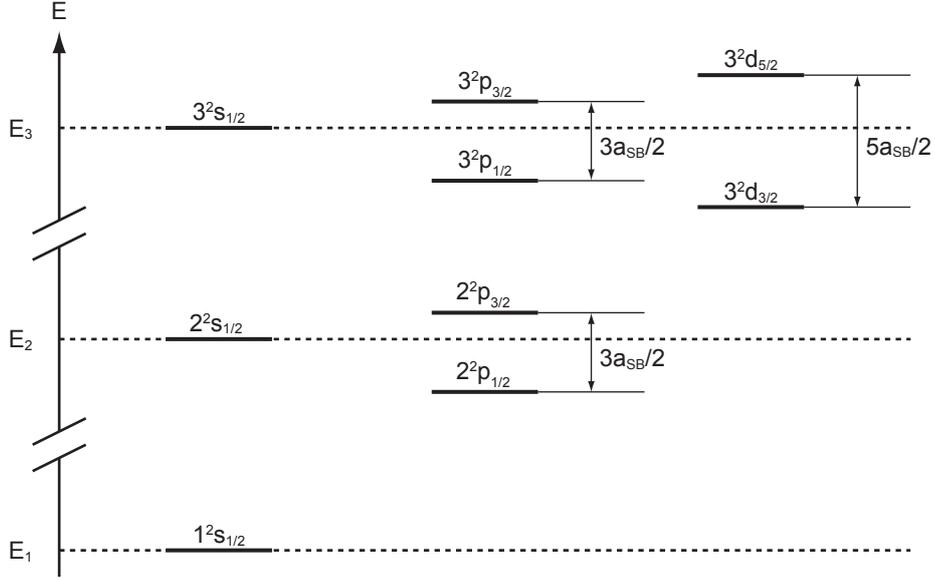


Abb. 14.3: Energiediagramm des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2$ und 3 . Die gestrichelten Linien geben die Energierterme $E_n = -E_R/n^2$ bei vernachlässigter Spin-Bahn-Kopplung an.

semiklassischen Modell beschreiben konnten, werden wir nur einen kurzen Überblick über die wesentlichen Schritte und Resultate der quantenmechanischen Berechnung geben und für genauere Ausführungen auf weiterführende Literatur [11] verweisen.

Die rein quantenmechanische Behandlung erfolgt innerhalb der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie indem man vom Hamilton-Operator \hat{H}_0 ausgeht und den Hamilton-Operator \hat{H}_{SB} der Spin-Bahn-Kopplung als Störung einführt. Die Energieverschiebung $\Delta E_{SB}^{(1)}$ in 1. Ordnung ist dabei durch den Erwartungswert $\langle H_{SB} \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}$ gegeben⁴. Mit (14.17) und $g_0 \sim 2$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{SB}^{(1)} &= \langle H_{SB} \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} \\
 &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi_{n,l,j,m_j}^* \hat{H}_{SB} \Psi_{n,l,j,m_j} d\varphi \sin \vartheta d\vartheta r^2 dr \\
 &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi_{n,l,j,m_j}^* \left(\frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \hat{S} \cdot \hat{L} \right) \Psi_{n,l,j,m_j} d\varphi \sin \vartheta d\vartheta r^2 dr \\
 &= \frac{e^2 \mu_0 \hbar^2}{16\pi m^2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}. \quad (14.42)
 \end{aligned}$$

Wir verzichten auf die Berechnung des Erwartungswerts $\langle 1/r^3 \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}$ und ge-

⁴Die Berechnung des Erwartungswerts muss für Eigenfunktionen des ungestörten Hamilton-Operators erfolgen.

ben hier nur das Resultat wider. Es ergibt sich

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} = \frac{m^3 c^3 \alpha^3}{\hbar^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}. \quad (14.43)$$

Einsetzen in (14.42) liefert

$$\Delta E_{\text{SB}}^{(1)} = \frac{mc^2 \alpha^4}{4n^3 l(l+1/2)(l+1)} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4). \quad (14.44)$$

Es sei bemerkt, dass dieser Ausdruck für $l = 0$ divergiert und daher nur für $l > 0$ gilt. Für $l = 0$ verschwindet $\Delta E_{\text{SB}}^{(1)}$. Damit ergeben sich unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung die folgenden Energiewerte $E_{n,l,j}^{(1)}$ für das Wasserstoffatom

$$\begin{aligned} E_{n,l,j}^{(1)} &= E_n + \Delta E_{\text{SB}}^{(1)} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} + \frac{mc^2 \alpha^4}{4n^3 l(l+1/2)(l+1)} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4), \quad l \neq 0. \end{aligned} \quad (14.45)$$

14.2.6 Die Feinstrukturaufspaltung des Wasserstoffatoms

Wir haben bisher davon gesprochen, dass die Spin-Bahn-Kopplung für die Feinstruktur verantwortlich ist. Um genau zu sein, ist dies nicht ganz korrekt, da neben der Energiekorrektur $\Delta E_{\text{SB}}^{(1)}$, bewirkt durch die Spin-Bahn-Kopplung, noch zwei weitere Korrekturterme existieren. Alle drei Korrekturen werden unter dem Namen *relativistische Korrekturen* zusammengefasst und bewirken die Feinstrukturaufspaltung. Wir geben als nächstes eine kurze Auflistung der beiden zusätzlichen Korrekturterme an und gehen dann auf die Gesamtlösung für die relativistisch korrigierten Energiewerte des Wasserstoffatoms ein.

1. Relativistische Korrektur

Bisher haben wir das Elektron als nicht-relativistisches Teilchen betrachtet. Entwickelt man jedoch den relativistischen Ausdruck für die Energie E für kleine Werte von \vec{p}^2 ergibt sich

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} = mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{(\vec{p}^2)^2}{m^3 c^2} + \dots \quad (14.46)$$

Terme höherer Ordnung können vernachlässigt werden, wenn $E_{\text{kin}} \ll mc^2$, d.h. $v/c \ll 1$, was beim Wasserstoffatom für kleine Werte der magnetischen Quantenzahl m_l gegeben ist. Damit ergibt sich zum Hamilton-Operator \hat{H}_0 als Störung der relativistische Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{\text{R}} = -\frac{1}{8} \frac{(\hat{p}^2)^2}{m^3 c^2}. \quad (14.47)$$

Die entsprechende Energiewertkorrektur 1. Ordnung ist gegeben durch

$$\Delta E_{\text{R}}^{(1)} = \langle H_{\text{R}} \rangle_{\psi_{n,l,m_l,m_s}} = -\frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (14.48)$$

2. Darwin-Term

Das Elektron des Wasserstoffatoms ist nicht genau lokalisiert sondern schwankt bzgl. seiner Position im Bereich von $\hbar/(mc)$. Diese „Zitterbewegung“ wird durch den zusätzlichen Hamilton-Operator \hat{H}_{D} berücksichtigt, welcher gegeben ist durch

$$\hat{H}_{\text{D}} = \frac{\pi\hbar^2\epsilon_0^2}{2m^2c^3} \delta^{(3)}(\hat{\vec{r}}), \quad (14.49)$$

wobei $\delta^{(3)}(\hat{\vec{r}})$ den Diracschen Deltaoperator in drei Dimensionen bezeichnet. Damit ergibt sich in 1. Ordnung der folgende Korrekturterm

$$\Delta E_{\text{D}}^{(1)} = \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \delta_{l,0}. \quad (14.50)$$

D.h. der Darwin-Term liefert nur einen Beitrag für $l = 0$.

Die drei Korrekturen $\Delta E_{\text{SB}}^{(1)}$, $\Delta E_{\text{R}}^{(1)}$ und $\Delta E_{\text{D}}^{(1)}$ führen zusammen zu folgendem Ausdruck für die Energiewerte $E_{n,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen

$$\begin{aligned} E_{n,j}^{(1)} &= E_n + \Delta E_{\text{SB}}^{(1)} + \Delta E_{\text{R}}^{(1)} + \Delta E_{\text{D}}^{(1)} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} + \frac{mc^2\alpha^4}{4n^3l(l+1/2)(l+1)} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \\ &\quad - \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \delta_{l,0} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} + \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{2l(l+1/2)(l+1)} - \frac{1}{l+1/2} + \frac{3}{4n} + \delta_{l,0} \right) \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} + \frac{mc^2\alpha^4}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right) \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right). \end{aligned} \quad (14.51)$$

D.h. die Energiewerte $E_{n,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms hängen nur von den Quantenzahlen n und j , aber nicht von der Bahndrehimpulsquantenzahl l ab⁵. Die Berücksichtigung aller drei relativistischen Korrekturen liefert also eine Korrektur gegenüber dem Ausdruck (14.45) für die Energiewerte $E_{n,l,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung. Die korrigierten Energiewerte $E_{n,j}^{(1)}$ zu den Zuständen $n^{2s+1}l_j$ des Wasserstoffatoms für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2$ und 3 sind in Tab. 14.3 zusammengestellt. Das entsprechende Energiediagramm (siehe Abb. 14.4) gibt die Feinstrukturaufspaltung beim Wasserstoffatom wieder.

n	l	j	$n^{2s+1}l_j$	$E_{n,j}^{(1)}$
1	0	1/2	$1^2s_{1/2}$	$-E_R(1 + \alpha^2/4)$
2	1	1/2	$2^2s_{1/2}$	$-E_R/4(1 + 5\alpha^2/16)$
		3/2	$2^2p_{1/2}$	$-E_R/4(1 + 5\alpha^2/16)$
		3/2	$2^2p_{3/2}$	$-E_R/4(1 + \alpha^2/16)$
3	1	1/2	$3^2s_{1/2}$	$-E_R/9(1 + \alpha^2/4)$
		3/2	$3^2p_{1/2}$	$-E_R/9(1 + \alpha^2/4)$
		3/2	$3^2p_{3/2}$	$-E_R/9(1 + \alpha^2/12)$
	2	3/2	$3^2d_{3/2}$	$-E_R/9(1 + \alpha^2/12)$
		5/2	$3^2d_{5/2}$	$-E_R/9(1 + \alpha^2/36)$

Tab. 14.3: Die Zustände $n^{2s+1}l_j$ und die entsprechenden Energiewerten $E_{n,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der drei relativistischen Korrekturen Spin-Bahn-Kopplung, Relativistische Korrektur und Darwin-Term für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2$ und 3.

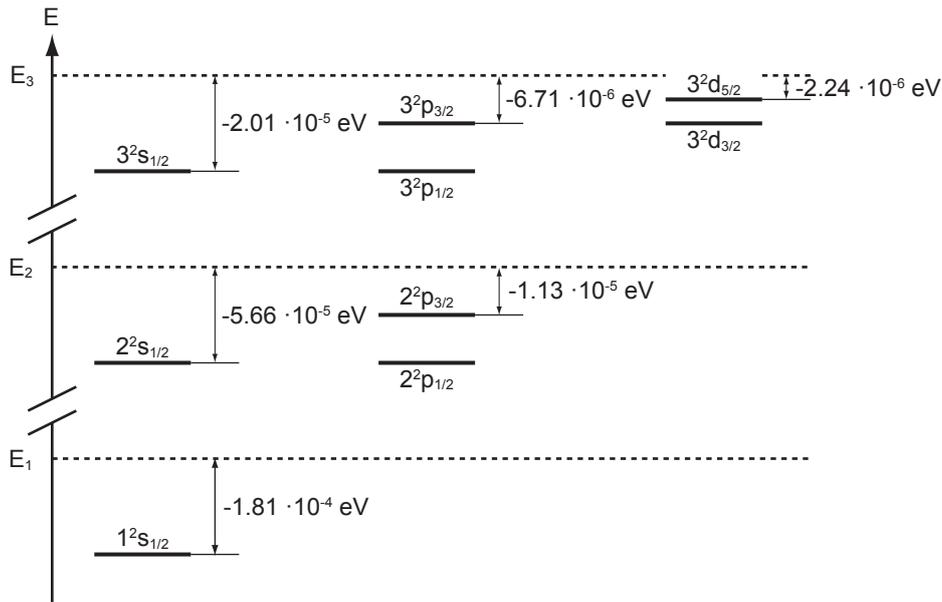


Abb. 14.4: Energiediagramm des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der drei relativistischen Korrekturen Spin-Bahn-Kopplung, Relativistische Korrektur und Darwin-Term für die Hauptquantenzahlen $n = 1, 2$ und 3. Die gestrichelten Linien geben die Energieterme $E_n = -E_R/n^2$ an.

⁵Diese Aussage gilt nur für das Wasserstoffatom bzw. für Einelektronenatome und nicht für Mehrelektronenatome. Dort haben Zustände mit verschiedenen Werten für l aber gleichem n und j unterschiedliche Energien.

Neben diesen relativistischen Korrekturen, welche für die Feinstrukturaufspaltung des Wasserstoffatoms verantwortlich sind, ergeben sich noch weitere Korrekturen, wenn man noch zusätzlich den Kern-Spin berücksichtigt. Diese Korrekturen bestimmen die sogenannte *Hyperfeinstruktur*.

14.3 Der anomale Zeeman-Effekt

In Kapitel 12 haben wir den sogenannten *normalen Zeeman-Effekt* besprochen, d.h. den Effekt eines homogenen externen Magnetfelds auf die Energieniveaus und damit das Spektrum des Wasserstoffatoms unter Vernachlässigung des Elektronspins. Wir berücksichtigen nun den Elektronspin, d.h. wir betrachten den Effekt eines homogenen externen Magnetfelds \vec{B} auf die Energieniveaus $E_{n,j}$ (siehe Gl. (14.51)) des Wasserstoffatoms.

Der Gesamt-Hamilton-Operator \hat{H} setzt sich nun aus \hat{H}_0 den drei relativistischen Korrekturen \hat{H}_{SB} , \hat{H}_{R} und \hat{H}_{D} , sowie dem Zeeman-Term \hat{H}_{Z} zusammen. Mit $\mu_{\text{B}} = e\hbar/(2m)$, (13.16) und (13.18) ist \hat{H}_{Z} gegeben durch

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{Z}} &= \frac{eB}{2m}(\hat{L}_z + g_0\hat{S}_z) \sim \frac{eB}{2m}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \\ &= \frac{eB}{2m}(\hat{J}_z + \hat{S}_z),\end{aligned}\quad (14.52)$$

wobei wir angenommen haben, dass $g_0 \sim 2$. Wir beschränken uns hier auf den Fall kleiner Magnetfelder, d.h. $B < 10$ T. In diesem Fall können wir den Zeeman-Term \hat{H}_{Z} als Störung gegenüber dem Hamilton-Operator $\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SB}} + \hat{H}_{\text{R}} + \hat{H}_{\text{D}}$ betrachten und die durch das homogene externe Magnetfeld \vec{B} bewirkte Energieverschiebung $\Delta E_{\text{Z}}^{(1)}$ mittels Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie berechnen. Dann ist $\Delta E_{\text{Z}}^{(1)}$ gegeben durch den Erwartungswert $\langle \hat{H}_{\text{Z}} \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}$ des Zeeman-Terms⁶ und wir erhalten mit (14.52)

$$\begin{aligned}\Delta E_{\text{Z}}^{(1)} &= \langle \hat{H}_{\text{Z}} \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} \\ &= \frac{eB}{2m} \langle \hat{J}_z + \hat{S}_z \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} \\ &= \frac{eB}{2m} \left(\hbar m_j + \langle \hat{S}_z \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} \right).\end{aligned}\quad (14.53)$$

Wir verzichten hier auf die Berechnung des Erwartungswerts $\langle \hat{S}_z \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}$ und geben direkt das Resultat für $s = 1/2$ an

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_z \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} &= \hbar m_j \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \\ &= \hbar m_j \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}.\end{aligned}\quad (14.54)$$

⁶Die Zustände Ψ_{n,l,j,m_j} sind Eigenzustände des ungestörten Hamilton-Operators $\hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SB}} + \hat{H}_{\text{R}} + \hat{H}_{\text{D}}$ und eignen sich daher für die Berechnung des Erwartungswerts.

Für genaue Ausführungen verweisen wir auf weiterführende Literatur [11]. Einsetzen in (14.53) liefert

$$\begin{aligned} \Delta E_Z^{(1)} &= \frac{eB}{2m} \hbar m_j \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \right) \\ &= \mu_B B m_j g_j, \end{aligned} \tag{14.55}$$

wobei der Landé-Faktor g_j gegeben ist durch

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}. \tag{14.56}$$

Wir fassen zusammen:

Für die Energiewerte $E_{n,l,j,m_j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen im homogenen externen Magnetfeld \vec{B} ergibt sich das folgende Schlussresultat

$$\begin{aligned} E_{n,l,j,m_j}^{(1)} &= E_n + \Delta E_{\text{SB}}^{(1)} + \Delta E_{\text{R}}^{(1)} + \Delta E_{\text{D}}^{(1)} + \Delta E_Z^{(1)} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} - \frac{E_{\text{R}}\alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \mu_B B m_j g_j, \end{aligned} \tag{14.57}$$

wobei der Landé-Faktor g_j gegeben ist durch

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}. \tag{14.58}$$

Abb. 14.5 zeigt die durch den anomalen Zeeman-Effekt bewirkte Aufspaltung der Zustände $2^2s_{1/2}$, $2^2p_{1/2}$ und $2^2p_{3/2}$ des Wasserstoffatoms.

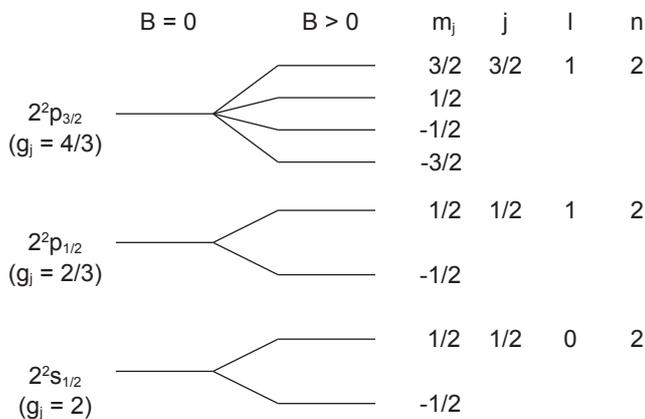


Abb. 14.5: Aufspaltung der Zustände $2^2s_{1/2}$, $2^2p_{1/2}$ und $2^2p_{3/2}$ des Wasserstoffatoms aufgrund des anomalen Zeeman-Effekts.

14.4 Zusammenfassung

- Die Wechselwirkung zwischen dem Elektronspin und dem Bahndrehimpuls des Elektrons wird Spin-Bahn-Kopplung genannt und liefert die Erklärung der im Experiment beobachteten Feinstruktur, wie z.B. die Aufspaltung der ersten Linie der Balmer-Serie des Wasserstoffatoms in eine Doppellinie.
- Das einfache semiklassische Modell, das im Wesentlichen auf dem Bohrschen Atommodell beruht, liefert für die Spin-Bahn-Aufspaltung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$ den Ausdruck

$$\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}} = \frac{\sqrt{l(l+1)} g_0 Z E_{\text{R}} \alpha^2}{n^6 2}. \quad (14.59)$$

Das Modell zeigt damit in Übereinstimmung mit dem Experiment, dass die Spin-Bahn-Aufspaltung mit steigender Kernladungszahl Z zunimmt und für den Wert null für die Bahndrehimpulsquantenzahl l verschwindet. Zudem liefert es die Größenordnung für die Spin-Bahn-Aufspaltung. Für den $2p$ -Zustand des Wasserstoffatoms erhalten wir zum Beispiel einen Wert von der Größenordnung $\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}} \sim 1.60 \cdot 10^{-5}$ eV.

- Der quantenmechanischen Beschreibung des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung liegt der folgende Hamilton-Operator zugrunde

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{SB}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{g_0}{2} \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m^2 r^3} \hat{S} \cdot \hat{L}. \quad (14.60)$$

- Unter Berücksichtigung des Elektronspins ist es von Vorteil die Ortswellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ und die Spinwellenfunktion $\chi(\sigma)$ zu einer Gesamtwellenfunktion $\psi(x, y, z, \sigma, t)$ zu kombinieren. Unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung können Ort- und Spinsystem voneinander unabhängig betrachtet werden und die Gesamtwellenfunktion $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ des Wasserstoffatoms lässt sich dann als Produkt von Ortswellenfunktion $\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t)$ und Spinwellenfunktion $\chi_{m_s}(\sigma)$ schreiben.
- Im Hinblick auf die quantenmechanische Behandlung der Spin-Bahn-Kopplung und die Betrachtung von Mehrelektronenatomen ist es hilfreich einen Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ einzuführen. Die Produktwellenfunktionen $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ sind zwar auch Eigenfunktionen der z-Komponente des Gesamtdrehimpulsoperators \hat{J}_z , jedoch nicht vom Quadrat des Gesamtdrehimpulsoperators \hat{J}^2 . Daher wechselt man vom bisherigen vollständigen Satz kommutierender Operatoren \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z , \hat{S}^2 und \hat{S}_z zum neuen ebenfalls vollständigen Satz kommutierender Operatoren \hat{H} , \hat{J}^2 , \hat{L}^2 , \hat{S}^2 und \hat{J}_z . Die entsprechenden Eigenfunktionen $\Psi_{n,l,j,m_j}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ mit den Eigenwerten E_n , $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar^2 s(s+1)$ und $\hbar m_j$ lassen sich als Linearkombination der Produktwellenfunktionen $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$ schreiben. Die neuen Quantenzahlen j und m_j können dabei die Werte $j = l \pm 1/2$, wobei $j \geq 0$ bzw. $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ annehmen.

- Mit diesen Grundlagen ergibt sich nach der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (1. Ordnung) für die Energiewerte $E_{n,l,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung

$$\begin{aligned} E_{n,l,j}^{(1)} &= E_n + \Delta E_{\text{SB}}^{(1)} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} + \frac{mc^2\alpha^4}{4n^3l(l+1/2)(l+1)}(j(j+1) - l(l+1) - 3/4), \quad l \neq 0. \end{aligned} \quad (14.61)$$

D.h. für feste Quantenzahlen n und l ergibt sich mit Ausnahme für die s -Zustände ($l = 0$) eine Aufspaltung in zwei Energiewerte.

- In der Literatur wird für einen Zustand mit Hauptquantenzahl n , Bahndrehimpulsquantenzahl l , Spinquantenzahl s und Gesamtdrehimpulsquantenzahl j die Bezeichnung $n^{2s+1}l_j$ verwendet.
- Um genau zu sein, existieren neben der Energiekorrektur $\Delta E_{\text{SB}}^{(1)}$, bewirkt durch die Spin-Bahn-Kopplung, noch zwei weitere Korrekturterme: Der relativistische Korrekturterm und der Darwin-Term. Alle drei Korrekturen werden unter dem Namen relativistische Korrekturen zusammengefasst und bewirken die Feinstrukturaufspaltung. Für die Energiewerte $E_{n,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen ergibt sich nach der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (1. Ordnung)

$$\begin{aligned} E_{n,j}^{(1)} &= E_n + \Delta E_{\text{SB}}^{(1)} + \Delta E_{\text{R}}^{(1)} + \Delta E_{\text{D}}^{(1)} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right). \end{aligned} \quad (14.62)$$

D.h. die Energiewerte $E_{n,j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms hängen nur von den Quantenzahlen n und j , aber nicht von der Bahndrehimpulsquantenzahl l ab. Diese Aussage gilt nur für das Wasserstoffatom bzw. für Einelektronenatome und nicht für Mehrelektronenatome. Dort haben Zustände mit verschiedenen Werten für l aber gleichem n und j unterschiedliche Energien.

- Für die Energiewerte $E_{n,l,j,m_j}^{(1)}$ des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen im homogenen externen Magnetfeld \vec{B} ergibt sich nach der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (1. Ordnung)

$$\begin{aligned} E_{n,l,j,m_j}^{(1)} &= E_n + \Delta E_{\text{SB}}^{(1)} + \Delta E_{\text{R}}^{(1)} + \Delta E_{\text{D}}^{(1)} + \Delta E_{\text{Z}}^{(1)} \\ &= -\frac{E_{\text{R}}}{n^2} - \frac{E_{\text{R}}\alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \mu_{\text{B}} B m_j g_j, \end{aligned} \quad (14.63)$$

wobei der Landé-Faktor g_j gegeben ist durch

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)}. \quad (14.64)$$

Das bedeutet, dass durch ein homogenes externes Magnetfeld \vec{B} die durch die Quantenzahl m_j bewirkte Entartung der Energiewerte $E_{n,j}^{(1)}$ aufgehoben wird. Dieser Effekt wird anomaler Zeeman-Effekt genannt.

Kapitel 15

Eigenschaften elektronischer (Dipol-) Übergänge

In quantenmechanischen Systemen wird das Auftreten von Übergängen zwischen einzelnen Energieniveaus durch sogenannte *Auswahlregeln* bestimmt. Diese geben Auskunft, ob ein Übergang zwischen zwei Energieniveaus unter Emission oder Absorption eines Photons möglich ist oder nicht. Dieses grundlegende Phänomen haben wir bereits im Zusammenhang mit dem Auftreten von bestimmten Spektrallinien im Wasserstoffatom in Abschnitt 12.4 angesprochen. In diesem Kapitel untersuchen wir nun allgemein unter welchen Umständen ein quantenmechanisches System von einem stationären Zustand in einen anderen übergeht und leiten daraus die Auswahlregeln für die harmonische Oszillation einer Ladung und für das Wasserstoffatom her.

Nach Abschnitt 9.4 existieren stationäre Zustände nur dann, wenn das Potential V eines Systems nicht explizit von der Zeit abhängt. Befindet sich ein solches System in einem stationären Zustand $\psi_n = u_n e^{-iE_n t/\hbar}$ verweilt es in diesem Zustand ψ_n , solange es nicht gestört wird. In der Realität ist die Lebensdauer in einem stationären Zustand jedoch in jedem Fall durch die Wechselwirkung des Systems mit den Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes, die zu spontaner Emission führen, begrenzt. Des Weiteren könnte das System durch eine externe elektromagnetische Welle (Strahlungsfeld) gestört werden, eine Wechselwirkung die, wie wir bereits kennengelernt haben, zu Absorption oder stimulierter Emission führt. Diese Wechselwirkung kann man derart betrachten, dass dem zeitlich konstanten Potential V , welches die Energieniveaus des Quantensystems bestimmt, ein zeitlich oszillierendes Störpotential überlagert wird. Auf die Wechselwirkung des quantenmechanischen Systems mit elektromagnetischer Strahlung werden wir hier eingehen. Dabei beschreiben wir das Strahlungsfeld durch eine klassische elektromagnetische Welle. Diese Betrachtung nennt man daher auch *semiklassisch*. Strenggenommen müsste jedoch auch das Strahlungsfeld quantisiert werden, wie wir es beim harmonischen Oszillator kennengelernt haben, ein Aspekt, der im Rahmen der Quantenoptik diskutiert wird.

Auch wenn die semiklassische Betrachtung einige experimentelle Beobachtungen, wie die spontane Emission, nicht erklären kann, liefert sie trotzdem eine

gute und einfache Vorstellung für einen Übergang zwischen zwei stationären Zuständen eines Systems. Wir werden sie daher weiterverfolgen und für eine rein quantenmechanische Behandlung auf weiterführende Literatur (siehe z.B. [11]) verweisen.

15.1 Oszillierende Ladungsverteilungen

Nach den Regeln der klassischen Elektrodynamik strahlt eine oszillierende Ladungsverteilung elektromagnetische Wellen ab. Dieses Konzept soll nun auf eine quantenmechanisch beschriebene Ladungsverteilung angewendet werden. Wir betrachten dazu ein Teilchen (Elektron) der Ladung q , dessen Zustand durch die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ beschrieben wird. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen (Elektron) zur Zeit t im Volumenelement dV um den Punkt x, y, z anzutreffen ist $|\psi(x, y, z, t)|^2 dV$. Daraus resultiert eine Ladungsdichteverteilung $\rho(x, y, z, t)$, die gegeben ist durch

$$\rho(x, y, z, t) = q|\psi(x, y, z, t)|^2. \quad (15.1)$$

Die Integration über den gesamten Raum ergibt entsprechend die Ladung q

$$\int \rho(x, y, z, t) dV = \int q|\psi(x, y, z, t)|^2 dV = q \underbrace{\int |\psi(x, y, z, t)|^2 dV}_{=1} = q. \quad (15.2)$$

Nehmen wir nun an, das System befinde sich in einem stationären Zustand $\psi_S(x, y, z, t)$. Folglich hängt dann die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_S(x, y, z, t)|^2$ und damit die Ladungsdichte $\rho(x, y, z, t) = q|\psi_S(x, y, z, t)|^2$ nicht von der Zeit t ab. Nach der klassischen Elektrodynamik würde ein solches System demzufolge keine elektromagnetische Strahlung aussenden.

Wie in der Einleitung des Kapitels erwähnt, nehmen wir jedoch an, dass sich das betrachtete System zusätzlich in einem Strahlungsfeld befindet, das durch eine klassische elektromagnetische Welle beschrieben wird. Zum Potential V , das nicht explizit von der Zeit abhängt, kommt dann ein Störpotential hinzu, das explizit von der Zeit abhängt. Es ist dann die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung zu betrachten, deren Lösungen in diesem Fall keine stationären Lösungen mehr sind. Bevor wir diese Berechnung in unserem semiklassischen Modell durchführen, zeigen wir an den Beispielen eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators und des Wasserstoffatoms, dass nichtstationäre Zustände existieren, welche oszillierenden Ladungsverteilungen entsprechen. Ein System, das sich in einem solchen Zustand befindet, sendet dann elektromagnetische Strahlung aus.

15.1.1 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m und der Ladung q , welches eine harmonische Schwingung in einer Dimension ausführt und somit durch das Modell des quantenmechanischen Oszillators beschrieben werden kann. Die stationären Zustände $\psi_n(x, t)$ eines solchen Teilchens sind gegeben durch

$$\psi_n(x, t) = u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (15.3)$$

mit $u_n(x)$ wie in (10.44).

Das Teilchen befinde sich nun in einem nichtstationären Zustand $\psi(x, t)$, der durch eine Linearkombination des Grundzustands $\psi_0(x, t)$ und des ersten angeregten Zustands $\psi_1(x, t)$ beschrieben werden kann

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= c_0\psi_0(x, t) + c_1\psi_1(x, t) = c_0u_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + c_1u_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} \\ &= e^{-iE_0t/\hbar} \left(c_0u_0(x) + c_1u_1(x)e^{-i(E_1-E_0)t/\hbar} \right),\end{aligned}\quad (15.4)$$

wobei $c_0, c_1 \in \mathbb{R}$ angenommen wird, damit das Skizzieren der Funktionen einfacher fällt¹. Wir könnten zum Beispiel explizit den einfachen Superpositionszustand mit $c_0 = c_1 = 1/\sqrt{2}$ betrachten. Aus der Darstellung in der zweiten Zeile in (15.4) ist ersichtlich, dass wir die Linearkombination $\psi(x, t)$ als Produkt eines (physikalisch) unbedeutenden Gesamtphasenfaktors, der sich im Absolutquadrat der Wellenfunktion nicht bemerkbar macht, mit einer Summe auffassen können. Diese Summe besteht aus einem zeitlich konstanten Term und einem mit der Frequenz $\omega = (E_1 - E_0)/\hbar$ oszillierenden Term. Wir betrachten nun diese Wellenfunktion $\psi(x, t)$ sowie die entsprechende Ladungsverteilung $\rho(x, t) = q|\psi(x, t)|^2$ für drei unterschiedliche Zeitpunkte, zum Zeitpunkt $t = 0$, sowie nach einer halben ($t = t'$) und nach einer ganzen Periode ($t = t''$) dieser Oszillation:

- a) Für $t = 0$ sind die Wellenfunktion $\psi(x, 0)$ und die entsprechende Ladungsverteilung $\rho(x, 0) = q|\psi(x, 0)|^2$ gegeben durch (siehe Abb. 15.1 (a) und (d))

$$\psi(x, 0) = c_0u_0(x) + c_1u_1(x), \quad (15.5)$$

$$\rho(x, 0) = q|c_0u_0(x) + c_1u_1(x)|^2. \quad (15.6)$$

- b) Für $t' = \pi\hbar/(E_1 - E_0)$ sind die Wellenfunktion $\psi(x, t')$ und die entsprechende Ladungsverteilung $\rho(x, t') = q|\psi(x, t')|^2$ gegeben durch (siehe Abb. 15.1 (b) und (e))

$$\begin{aligned}\psi(x, t') &= c_0u_0(x)e^{-iE_0\pi/(E_1-E_0)} + c_1u_1(x)e^{-iE_1\pi/(E_1-E_0)} \\ &= e^{-iE_0\pi/(E_1-E_0)}(c_0u_0(x) - c_1u_1(x)),\end{aligned}\quad (15.7)$$

$$\rho(x, t') = q|c_0u_0(x) - c_1u_1(x)|^2. \quad (15.8)$$

- c) Für $t'' = 2\pi\hbar/(E_1 - E_0)$ sind die Wellenfunktion $\psi(x, t'')$ und die entsprechende Ladungsverteilung $\rho(x, t'') = q|\psi(x, t'')|^2$ gegeben durch (siehe Abb. 15.1 (c) und (f))

$$\begin{aligned}\psi(x, t'') &= c_0u_0(x)e^{-2iE_0\pi/(E_1-E_0)} + c_1u_1(x)e^{-2iE_1\pi/(E_1-E_0)} \\ &= e^{-2iE_0\pi/(E_1-E_0)}(c_0u_0(x) + c_1u_1(x)),\end{aligned}\quad (15.9)$$

$$\rho(x, t'') = q|c_0u_0(x) + c_1u_1(x)|^2. \quad (15.10)$$

¹Im Allgemeinen sind die Koeffizienten c_0 und c_1 komplex, was zu einer zusätzlichen Phasenverschiebung führt.

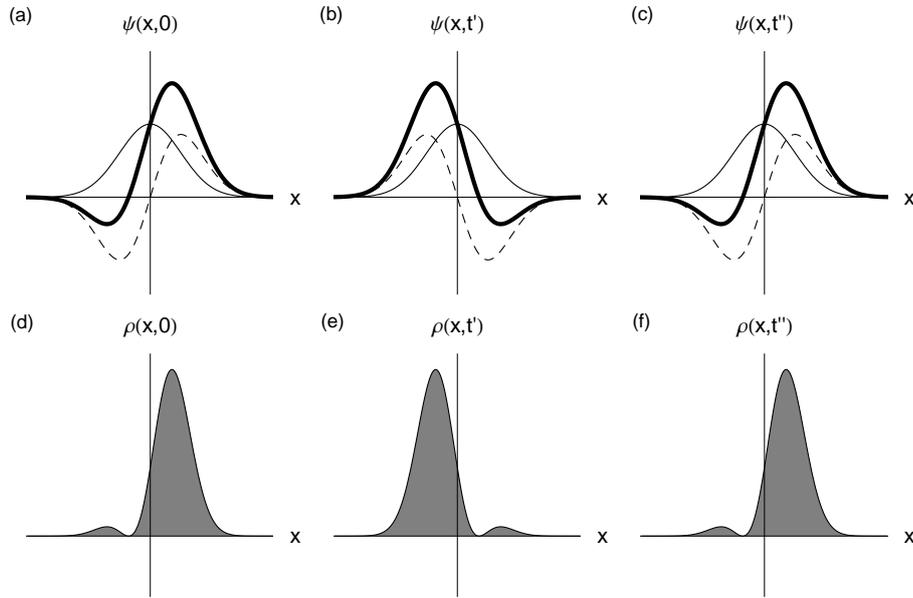


Abb. 15.1: Wellenfunktion $\psi(x,t)$ und entsprechende Ladungsverteilungen $\rho(x,t)$ für die drei Zeitpunkte (a), (d) $t = 0$, (b), (e) $t' = \pi\hbar/(E_1 - E_0)$ und (c), (f) $t'' = 2\pi\hbar/(E_1 - E_0)$ für $c_0 = c_1 = 1/\sqrt{2}$.

Aus den Abb. 15.1 (d) - (f) wird ersichtlich, dass sich der Ladungsschwerpunkt von rechts ($t = 0$) nach links ($t' = \pi\hbar/(E_1 - E_0)$) und wieder zurück nach rechts ($t'' = 2\pi\hbar/(E_1 - E_0)$) bewegt. D.h. im betrachteten nichtstationären Zustand pendelt der Ladungsschwerpunkt hin und her mit der Schwingungsperiode $T = t''$. Die Kreisfrequenz der Schwingung beträgt $\omega = 2\pi/T = (E_1 - E_0)/\hbar$. Wir untersuchen nun diesen Sachverhalt für zwei unterschiedliche Anfangszustände etwas genauer.

Als erstes nehmen wir an, dass der Oszillator ursprünglich im Zustand $n = 1$ ist. Man kann sich dann vorstellen, dass er unter Emission eines Photons der Energie $\hbar\omega = E_1 - E_0$ in den Grundzustand $n = 0$ übergeht. Dieses Photon kommt zum ursprünglichen Strahlungsfeld hinzu. Das Emissionsphänomen kann entweder durch die Vakuumfluktuationen hervorgerufen worden sein, in diesem Fall spricht man von spontaner Emission, oder durch ein bereits existierendes Strahlungsfeld induziert worden sein, wobei man von *stimulierter Emission* spricht.

Nun betrachten wir den zweiten Fall, in dem der Oszillator ursprünglich im Zustand $n = 0$ ist. Er wird dann dem externen Strahlungsfeld ein Photon der Energie $\hbar\omega = E_1 - E_0$ entziehen und dabei in den Zustand $n = 1$ übergehen. In diesem Fall sprechen wir von *Absorption* elektromagnetischer Strahlung.

Diese Betrachtung impliziert, dass die Koeffizienten c_0 und c_1 in der Entwicklung (15.4) des nichtstationären Zustands $\psi(x,t)$ nach den beiden ersten Eigenfunktionen des Hamilton-Operators von der Zeit abhängen. Zum Beispiel befindet sich im Fall der Absorption der Oszillator ursprünglich im Zustand $n = 0$, d.h. vor dem Eintreffen der Störung ist $|c_0|^2 = 1$ und $|c_1|^2 = 0$. Wird

dann ein Strahlungsfeld der Frequenz $\omega = (E_1 - E_0)/\hbar$ hinzugeschaltet, dann nimmt die Wahrscheinlichkeit $|c_1|^2$, den Oszillator im Zustand $n = 1$ anzutreffen, von null ausgehend zu und umgekehrt die Wahrscheinlichkeit $|c_0|^2$, den Oszillator im Zustand $n = 0$ anzutreffen, von eins ausgehend ab.

Es sei bemerkt, dass wir aufgrund unserer Wahl des Zustands $\psi(x, t)$ durch (15.4) den harmonischen Oszillator auf die niedrigsten zwei Zustände (Grundzustand und erster angeregter Zustand) beschränkt haben, d.h. wir haben ein sogenanntes *Zwei-Niveau-System* betrachtet. Im Allgemeinen wird der harmonische Oszillator im Strahlungsfeld jedoch durch einen nichtstationären Zustand $\psi(x, t)$ beschrieben, der als Linearkombination aller Eigenfunktionen $\psi_n(x, t) = u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ des ungestörten Hamilton-Operators geschrieben werden kann

$$\psi(x, t) = c_0\psi_0(x, t) + c_1\psi_1(x, t) + \dots + c_n\psi_n(x, t) + \dots \quad (15.11)$$

In diesem Fall muss unser einfaches Modell entsprechend erweitert werden. Zum Beispiel treten in einem angeregten Zustand ($n > 0$) Absorption oder stimulierte Emission gleichberechtigt auf.

15.1.2 Das Wasserstoffatom

Als Beispiel für einen nichtstationären Zustand $\psi(r, \vartheta, \varphi, t)$ für das Wasserstoffatom betrachten wir eine Linearkombination des $1s$ -Zustands und des $2p$ -Zustands. D.h. es gilt

$$\psi(r, \vartheta, \varphi, t) = c_1\psi_{1,0,0}(r, \vartheta, \varphi, t) + c_2\psi_{2,1,0}(r, \vartheta, \varphi, t). \quad (15.12)$$

Analog zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator kann man auch hier zeigen, dass diese Linearkombination einem oszillierenden Ladungsschwerpunkt entspricht. Die Schwingung erfolgt entlang der z -Achse mit der Frequenz $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$. Folglich ist es möglich, dass das Elektron des Wasserstoffatoms durch Absorption oder (stimulierte) Emission eines Photons der Frequenz $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ den Zustand wechselt. Die Frequenz ω entspricht dabei dem Energieunterschied $(E_2 - E_1)$ der beiden beteiligten Zustände geteilt durch das Plancksche Wirkungsquantum \hbar .

15.2 Semiklassische Berechnung der Absorption und der stimulierten Emission

Im letzten Abschnitt haben wir an den beiden Beispielen quantenmechanischer harmonischer Oszillator und Wasserstoffatom gesehen, dass ein quantenmechanisches System (Teilchen, Elektron) in einem externen Strahlungsfeld seinen Zustand aufgrund von stimulierter Emission oder Absorption wechseln kann. Das Ziel ist es nun die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen (Elektron) im Strahlungsfeld zu lösen und dadurch diese beiden Vorgänge stimulierte Emission und Absorption zu beschreiben.

Für unsere semiklassische Berechnung treffen wir die folgenden Annahmen:

- a) Das externe Strahlungsfeld wird durch eine ebene elektromagnetische Welle beschrieben mit Ausbreitungsrichtung entlang der z-Achse und $\vec{E} \parallel$ x-Achse und $\vec{B} \parallel$ y-Achse.
- b) Der Einfluss des Magnetfelds \vec{B} der elektromagnetischen Welle auf die Bewegung des Teilchens (Elektrons) werde gegenüber dem Einfluss des elektrischen Felds \vec{E} der elektromagnetischen Welle vernachlässigt. Diese Annahme ist gerechtfertigt, wenn $v/c \ll 1$, was beim Wasserstoffatom für kleine Werte der magnetischen Quantenzahl m_l gegeben ist.
- c) Im Gebiet, in dem sich das Teilchen (Elektron) aufhält, betrachten wir das elektrische Feld \vec{E} der elektromagnetischen Welle als homogen. Dies ist erfüllt, wenn die Wellenlänge der Strahlung gross ist im Vergleich zum Atomdurchmesser ($\sim 1 \text{ \AA}$), was für sichtbares Licht ($\lambda \sim 500 \text{ nm}$) sehr gut erfüllt ist.
- d) Aufgrund des elektrischen Feldes \vec{E} der elektromagnetischen Welle wirkt auf das Teilchen der Ladung q eine äussere Kraft $F_x(t)$ entlang der x-Achse, die gegeben ist durch

$$F_x(t) = qE_0 \cos(\omega t), \quad (15.13)$$

wobei E_0 die Amplitude des elektrischen Felds \vec{E} der elektromagnetischen Welle und ω deren Frequenz ist. Dieser Störkraft lässt sich mit Hilfe der Beziehung $F_x(t) = -\partial V'(x, t)/\partial x$ ein Störpotential $V'(x, t)$ zuordnen. Es gilt

$$V'(x, t) = -qE_0 x \cos(\omega t). \quad (15.14)$$

Wir nehmen nun an, dass das Störpotential $V'(x, t)$ so beschaffen ist, dass das Teilchen (Elektron) vom stationären Zustand $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ in den stationären Zustand $\psi_\beta(x, y, z, t)$ übergeht, wobei

$$\psi_\alpha(x, y, z, t) = u_\alpha(x, y, z) e^{-iE_\alpha t/\hbar}, \quad (15.15)$$

$$\psi_\beta(x, y, z, t) = u_\beta(x, y, z) e^{-iE_\beta t/\hbar}. \quad (15.16)$$

Hier sind α bzw. β die Quantenzahlen, die den Zustand beschreiben. Nach Abschnitt 15.1 erwarten wir, dass dies erfüllt ist, wenn $\hbar\omega = |E_\beta - E_\alpha|$. Ebenfalls nach Abschnitt 15.1 wählen wir als Ansatz für den nichtstationären Zustand $\psi(x, y, z, t)$, in welchen das Teilchen (Elektron) durch die Störung, bewirkt durch das Strahlungsfeld, übergeht

$$\psi(x, y, z, t) = c_\alpha \psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta \psi_\beta(x, y, z, t), \quad (15.17)$$

wobei, wenn wir uns auf zwei mögliche Zustände beschränken (Zwei-Niveau-Näherung), die folgende Normierungsbedingung gilt

$$|c_\alpha|^2 + |c_\beta|^2 = 1. \quad (15.18)$$

Es sei bemerkt, dass bei einer Messung das Teilchen (Elektron) mit der Wahrscheinlichkeit $|c_\alpha|^2$ im Zustand $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ oder mit der Wahrscheinlichkeit $|c_\beta|^2$ im Zustand $\psi_\beta(x, y, z, t)$, gefunden wird, wobei sich die Mittelwerte von $|c_\alpha|^2$ und $|c_\beta|^2$ in der Zeit ändern (siehe Abschnitt 15.1). Folglich befindet sich das System zu keinem Zeitpunkt in einem Zustand, der „zwischen“ den beiden stationären Zuständen $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ und $\psi_\beta(x, y, z, t)$ liegt.

Wir berechnen nun ausgehend von diesen Annahmen die zeitliche Änderung des Koeffizienten c_β und damit die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit $|c_\beta|^2$ das Teilchen (Elektron) im Zustand $\psi_\beta(x, y, z, t)$ anzutreffen. Mit Hilfe von (15.18) ergibt sich daraus dann die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit $|c_\alpha|^2$ das Teilchen (Elektron) im Zustand $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ anzutreffen.

Für das ungestörte Teilchen (Elektron) ist der Hamilton-Operator \hat{H} gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z). \quad (15.19)$$

Die entsprechende zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lautet

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (15.20)$$

und wird durch die beiden stationären Zustände $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ und $\psi_\beta(x, y, z, t)$ gelöst. Ebenfalls ist die Linearkombination $\psi(x, y, z, t)$, gegeben durch (15.17), Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung, da diese linear und homogen ist.

Wir fügen nun das zeitabhängige Störpotential $V'(x, t)$ hinzu. Die neue zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$(\hat{H} + V'(x, t))\psi(x, y, z, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (15.21)$$

Die stationären Zustände $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ und $\psi_\beta(x, y, z, t)$ sind dann aufgrund der Zeitabhängigkeit des Potentials keine Lösungen der neuen zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung. Hingegen ist die Linearkombination $\psi(x, y, z, t)$, gegeben durch (15.17), eine Näherungslösung, wenn die Koeffizienten c_α und c_β eine geeignete Zeitabhängigkeit haben. Wir ändern daher unseren Ansatz (15.17) insofern, dass wir den beiden Koeffizienten c_α und c_β eine Zeitabhängigkeit hinzufügen, d.h. es gilt

$$\psi(x, y, z, t) = c_\alpha(t)\psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta(t)\psi_\beta(x, y, z, t). \quad (15.22)$$

Wie bereits erwähnt, nehmen wir zusätzlich an, dass sich das Teilchen vor dem Einschalten der Störung im Zustand $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ befindet, d.h. wir betrachten die Anfangsbedingung

$$c_\alpha(t = 0) = 1, \quad (15.23)$$

$$c_\beta(t = 0) = 0. \quad (15.24)$$

Zur Berechnung der Zeitabhängigkeit von c_β gehen wir nun von der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (15.21) aus und setzen unseren neuen Ansatz (15.22) für die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ ein. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} & c_\alpha(t)\hat{H}\psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta(t)\hat{H}\psi_\beta(x, y, z, t) \\ & \quad + c_\alpha(t)V'(x, t)\psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta(t)V'(x, t)\psi_\beta(x, y, z, t) \\ = & i\hbar \left(c_\alpha(t)\frac{\partial\psi_\alpha(x, y, z, t)}{\partial t} + c_\beta(t)\frac{\partial\psi_\beta(x, y, z, t)}{\partial t} \right) \\ & \quad + i\hbar \left(\frac{\partial c_\alpha(t)}{\partial t}\psi_\alpha(x, y, z, t) + \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t}\psi_\beta(x, y, z, t) \right). \end{aligned} \quad (15.25)$$

Da $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ und $\psi_\beta(x, y, z, t)$ Lösungen der ungestörten zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (15.20) sind, kürzen sich einige Terme gegenseitig weg und wir erhalten

$$\begin{aligned} & c_\alpha(t)V'(x, t)\psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta(t)V'(x, t)\psi_\beta(x, y, z, t) \\ = & i\hbar \left(\frac{\partial c_\alpha(t)}{\partial t}\psi_\alpha(x, y, z, t) + \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t}\psi_\beta(x, y, z, t) \right). \end{aligned} \quad (15.26)$$

Wir multiplizieren nun die Gleichung von links mit $\psi_\beta^*(x, y, z, t)$ und integrieren über den gesamten Raum. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} & c_\alpha(t) \int \psi_\beta^*(x, y, z, t)V'(x, t)\psi_\alpha(x, y, z, t)dV \\ & \quad + c_\beta(t) \int \psi_\beta^*(x, y, z, t)V'(x, t)\psi_\beta(x, y, z, t)dV \\ = & i\hbar \left(\frac{\partial c_\alpha(t)}{\partial t} \underbrace{\int \psi_\beta^*(x, y, z, t)\psi_\alpha(x, y, z, t)dV}_{=0} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t} \underbrace{\int \psi_\beta^*(x, y, z, t)\psi_\beta(x, y, z, t)dV}_{=1} \right). \end{aligned} \quad (15.27)$$

Somit ergibt sich für die zeitliche Änderung des Koeffizienten $c_\beta(t)$ das folgende Resultat

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t} = & \frac{1}{i\hbar} \left(c_\alpha(t) \int \psi_\beta^*(x, y, z, t)V'(x, t)\psi_\alpha(x, y, z, t)dV \right. \\ & \left. + c_\beta(t) \int \psi_\beta^*(x, y, z, t)V'(x, t)\psi_\beta(x, y, z, t)dV \right). \end{aligned} \quad (15.28)$$

15.2.1 Lösung für schwache, streng monochromatische Strahlung

Wir berechnen nun die Lösung dieses Ausdrucks für schwache, streng monochromatische Strahlung, d.h. wir betrachten ein Teilchen (Elektron) der Ladung q im Strahlungsfeld, das die folgenden Annahmen erfüllt:

1. Das Strahlungsfeld wird durch eine elektromagnetische Welle mit einer genau definierten Frequenz beschrieben.
2. Das durch das Strahlungsfeld bewirkte Störpotential $V'(x, t)$ ist so klein, dass die Änderung von $|c_\alpha|^2$ und damit auch von $|c_\beta|^2$ in der Zeit $1/\omega$ sehr klein gegenüber 1 ist. Diese Bedingung ist im Allgemeinen sehr gut erfüllt, denn die intra-atomare² elektrische Feldstärke ist von der Grössenordnung e/a_0^2 und damit viel grösser als die elektrische Feldstärke in einer Lichtwelle, die man unter gewöhnlichen Bedingungen antrifft.
3. Die Störung ist so schwach, dass selbst nach sehr vielen Oszillationsperioden $T = 2\pi/\omega$ immer noch $c_\alpha \sim 1$ und $c_\beta \ll 1$ (vgl. mit den Anfangsbedingungen (15.23) und (15.23)).

Damit vereinfacht sich (15.28) zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t} &\sim \frac{1}{i\hbar} \int \psi_\beta^*(x, y, z, t) V'(x, t) \psi_\alpha(x, y, z, t) dV \\ &= \frac{1}{i\hbar} e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} \int u_\beta^*(x, y, z) V'(x, t) u_\alpha(x, y, z) dV. \end{aligned} \quad (15.29)$$

Mit $V'(x, t) = -qE_0 x \cos(\omega t)$ (siehe Gl. (15.14)) erhalten wir

$$\frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t} \sim -\frac{1}{i\hbar} e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} qE_0 \cos(\omega t) \underbrace{\int u_\beta^*(x, y, z) x u_\alpha(x, y, z) dV}_{\equiv x_{\beta\alpha}}, \quad (15.30)$$

wobei $x_{\beta\alpha}$ *Matrixelement* des Übergangs $\alpha \rightarrow \beta$ für längs der x-Achse polarisierter elektromagnetischer Strahlung genannt wird. Dabei gilt die Regel:

Wenn das Matrixelement $x_{\beta\alpha}$ endlich ist, dann ist der Übergang erlaubt und wenn es verschwindet, dann ist er verboten.

Im Fall eines nichtverschwindenden Matrixelementes entspricht der Zustand $\psi(x, y, z, t) = c_\alpha(t)\psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta(t)\psi_\beta(x, y, z, t)$ einem oszillierenden Ladungsschwerpunkt und im Fall eines verschwindenden Matrixelementes steht der Ladungsschwerpunkt still. Die Bezeichnung *Matrixelement* rührt daher, dass man die möglichen Übergänge in einem System mit mehreren stationären Zuständen in der Form einer (hermiteschen) Matrix übersichtlich darstellen kann. Wir betrachten nun die Eigenschaften der Matrixelemente $x_{\beta\alpha}$ etwas genauer.

Interpretation der Matrixelemente

Wir betrachten als erstes die Diagonalelemente $x_{\beta\beta}$ multipliziert mit der Ladung q und erhalten

$$qx_{\beta\beta} = q \int \psi_\beta^*(x, y, z, t) x \psi_\beta(x, y, z, t) dV = q \langle x \rangle_{\psi_\beta}. \quad (15.31)$$

²Intra-atomar bedeutet innerhalb des Atoms.

D.h. der Ausdruck $qx_{\beta\beta}$ entspricht dem Erwartungswert der x-Komponente des elektrischen Dipolmoments des Teilchens (Elektrons) im Zustand $\psi_\beta(x, y, z, t)$. Zum Beispiel verschwindet dieser Erwartungswert für die stationären Zustände des Wasserstoffatoms, was bedeutet, dass das Wasserstoffatom kein permanentes Dipolmoment besitzt.

Wir kommen zu den nichtdiagonalen Elemente und betrachten dazu den Zustand

$$\psi(x, y, z, t) = 1/\sqrt{2}\psi_\alpha(x, y, z, t) + 1/\sqrt{2}\psi_\beta(x, y, z, t) \quad (15.32)$$

Der Erwartungswert $\langle qx \rangle_\psi$ für das elektrische Dipolmoment beträgt für diesen Zustand

$$\begin{aligned} \langle qx \rangle_\psi &= q \int \psi^*(x, y, z, t)x\psi(x, y, z, t)dV \\ &= \frac{1}{2}q \int \psi_\alpha^*(x, y, z, t)x\psi_\alpha(x, y, z, t)dV \\ &\quad + \frac{1}{2}q \left(\int \psi_\beta^*(x, y, z, t)x\psi_\alpha(x, y, z, t)dV \right. \\ &\quad \left. + \int \psi_\alpha^*(x, y, z, t)x\psi_\beta(x, y, z, t)dV \right) \\ &\quad + \frac{1}{2}q \int \psi_\beta^*(x, y, z, t)x\psi_\beta(x, y, z, t)dV. \end{aligned} \quad (15.33)$$

Das erste und das letzte Integral verschwinden sowohl für das Wasserstoffatom als auch für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator. Das Integral in der Mitte ist reell, denn es stellt den Realteil von

$$q \int \psi_\beta^*(x, y, z, t)x\psi_\alpha(x, y, z, t)dV \quad (15.34)$$

dar. Es ergibt sich somit mit $\omega_{\beta\alpha} = (E_\beta - E_\alpha)/\hbar$ und $x_{\beta\alpha} = |x_{\beta\alpha}|e^{i\delta}$

$$\begin{aligned} \langle qx \rangle_\psi &= \frac{1}{2}q \left(e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} \underbrace{\int u_\beta^*(x, y, z)xu_\alpha(x, y, z)dV}_{=x_{\beta\alpha}} \right. \\ &\quad \left. + e^{-i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} \underbrace{\int u_\alpha^*(x, y, z)xu_\beta(x, y, z)dV}_{=x_{\beta\alpha}^*} \right) \\ &= \frac{1}{2}q|x_{\beta\alpha}| \left(e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar + \delta} + e^{-i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar + \delta} \right) \\ &= q|x_{\beta\alpha}| \cos(\omega_{\beta\alpha}t + \delta). \end{aligned} \quad (15.35)$$

D.h. bei gleichen Entwicklungskoeffizienten $c_\alpha = c_\beta = 1/\sqrt{2}$ ist $q|x_{\beta\alpha}|$ die Amplitude der Schwingung des Erwartungswerts des elektrischen Dipolmoments.

Beim Wasserstoffatom werden die nichtdiagonalen Matrixelemente also von der Grössenordnung des Bohrschen Radius a_0 sein, sofern sie nicht verschwinden (was aus Symmetriegründen vorkommen kann).

An dieser Stelle sei noch folgende Bemerkung gemacht: Eine notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung, dass $x_{\beta\alpha}$ nicht verschwindet und somit der Übergang $\alpha \rightarrow \beta$ erlaubt ist, ist, dass $u_\alpha(x, y, z)$ und $u_\beta(x, y, z)$ verschiedene Parität³ haben müssen, denn wenn $u_\alpha(x, y, z)$ und $u_\beta(x, y, z)$ gleiche Parität haben, ist $u_\beta(x, y, z)^* x u_\alpha(x, y, z)$ eine ungerade Funktion und $x_{\beta\alpha}$ verschwindet. Zum Beispiel haben die Wellenfunktionen $\psi_{3,0,0}(r, \vartheta, \varphi)$ und $\psi_{3,2,0}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms beide gerade Parität⁴. Folglich verschwindet das entsprechende Matrixelement $x_{(3,2,0)(3,0,0)}$ und der Übergang $(3, 2, 0) \rightarrow (3, 0, 0)$ ist verboten.

Zeitabhängigkeit der Besetzungswahrscheinlichkeit des Zwei-Niveau Systems

Unser Ziel ist es nun ausgehend von (15.30) die Wahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2$, das Teilchen (Elektron) zur Zeit t im Zustand $\psi_\beta(x, y, z, t)$ anzutreffen, zu berechnen. Mit $\omega_{\beta\alpha} = (E_\beta - E_\alpha)/\hbar$ können wir (15.30) in der folgenden Form schreiben

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t} &\sim -\frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{i\hbar} e^{i\omega_{\beta\alpha} t} \cos(\omega t) \\ &= -\frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{i\hbar} e^{i\omega_{\beta\alpha} t} \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \\ &= -\frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{2i\hbar} \left(e^{i(\omega_{\beta\alpha} + \omega)t} + e^{i(\omega_{\beta\alpha} - \omega)t} \right). \end{aligned} \quad (15.36)$$

Integration über die Zeit liefert

$$\begin{aligned} c_\beta(t) &= \int_0^t \frac{\partial c_\beta(t')}{\partial t'} dt' \\ &\sim -\frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{2i\hbar} \int_0^t \left(e^{i(\omega_{\beta\alpha} + \omega)t'} + e^{i(\omega_{\beta\alpha} - \omega)t'} \right) dt' \\ &= \frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{2\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{\beta\alpha} + \omega)t} - 1}{\omega_{\beta\alpha} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{\beta\alpha} - \omega)t} - 1}{\omega_{\beta\alpha} - \omega} \right). \end{aligned} \quad (15.37)$$

Wir treffen nun die Annahme, dass die Frequenz ω der eingestrahnten Welle (Strahlungsfeld) sehr nahe bei $\omega_{\beta\alpha}$ liegt und unterscheiden die beiden Fälle Absorption und (stimulierte) Emission (siehe Abb. 15.2):

a) Absorption

Im Fall der Absorption der einfallenden Strahlung liegt der Energiewert des Ausgangszustands $\psi_\alpha(x, y, z, t)$ unter demjenigen des Endzustands

³Zwei Funktionen besitzen unterschiedliche Parität, wenn sie unterschiedliches Transformationsverhalten bzgl. $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ zeigen. Falls $\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$ hat $\psi(\vec{r})$ gerade Parität und falls $\psi(\vec{r}) = -\psi(-\vec{r})$ hat $\psi(\vec{r})$ ungerade Parität.

⁴Die Paritätstransformation $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ lautet in Kugelkoordinaten $(r, \vartheta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \vartheta, \pi + \varphi)$.

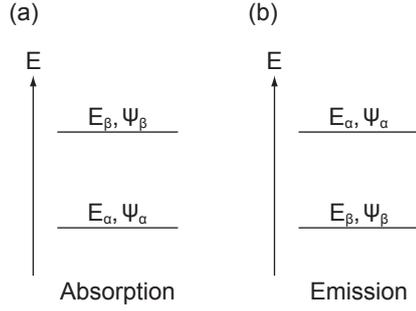


Abb. 15.2: Energiediagramm für (a) die Absorption und (b) die stimulierte Emission eines Zwei-Niveau-System mit den Zuständen $\psi_{\alpha}(x, t)$ und $\psi_{\beta}(x, t)$.

$\psi_{\beta}(x, y, z, t)$, d.h. es gilt $\omega_{\beta\alpha} = (E_{\beta} - E_{\alpha})/\hbar > 0$ und damit

$$|\omega_{\beta\alpha} + \omega| \gg |\omega_{\beta\alpha} - \omega| \equiv |\Delta\omega|. \quad (15.38)$$

Folglich können wir den ersten Summanden in (15.37) vernachlässigen und wir erhalten

$$c_{\beta}(t) \sim \frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{2\hbar} \frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{\Delta\omega}. \quad (15.39)$$

Für die Wahrscheinlichkeit $|c_{\beta}(t)|^2$ ergibt sich somit

$$\begin{aligned} |c_{\beta}(t)|^2 &\sim \frac{E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{\Delta\omega} \right|^2 \\ &= \frac{E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{4\hbar^2} \left(\frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{\Delta\omega} \frac{e^{-i\Delta\omega t} - 1}{\Delta\omega} \right) \\ &= \frac{E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{4\hbar^2} \frac{2 - e^{i\Delta\omega t} - e^{-i\Delta\omega t}}{\Delta\omega^2} \\ &= \frac{E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{4\hbar^2} \frac{2 - 2\cos(\Delta\omega t)}{\Delta\omega^2} \\ &= \frac{E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2}. \end{aligned} \quad (15.40)$$

b) (Stimulierte) Emission

Im Fall der (stimulierten) Emission liegt der Energiewert des Ausgangszustands $\psi_{\alpha}(x, y, z, t)$ über demjenigen des Endzustands $\psi_{\beta}(x, y, z, t)$, d.h. es gilt $\omega_{\beta\alpha} = (E_{\beta} - E_{\alpha})/\hbar < 0$ und damit

$$|\omega_{\beta\alpha} - \omega| \gg |\omega_{\beta\alpha} + \omega| \equiv |\Delta\omega|. \quad (15.41)$$

Folglich können wir den zweiten Summand in (15.37) vernachlässigen und wir erhalten

$$c_{\beta}(t) \sim -\frac{E_0 q x_{\beta\alpha}}{2\hbar} \frac{e^{i\Delta\omega t} - 1}{\Delta\omega}, \quad (15.42)$$

was mit dem Ausdruck (15.39) für die Absorption übereinstimmt. Für die Wahrscheinlichkeit $|c_{\beta}(t)|^2$ ergibt sich somit analog zu (15.40)

$$|c_{\beta}(t)|^2 \sim \frac{E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2}. \quad (15.43)$$

Es resultieren somit für die Absorption und die (stimulierte) Emission dieselbe Formel für die Wahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2$, d.h. Absorption und stimulierte Emission sind gleich wahrscheinlich.

Wir diskutieren nun diesen Ausdruck für $|c_\beta(t)|^2$ indem wir die Funktion $g(\Delta\omega, t) = \sin^2(\Delta\omega t/2)/\Delta\omega^2$ als Funktion von $\Delta\omega$ für festes t betrachten (siehe Abb. 15.3). Da wir monochromatische Strahlung betrachten, müssen wir annehmen, dass die Störung schon vor unendlich langer Zeit begann, denn eine Kosinusschwingung endlicher Zeitdauer hätte ein Spektrum endlicher Breite. Wenn wir nun also die Dauer der Störung gegen unendlich streben lassen, müssen wir gleichzeitig die Störampplitude gegen null streben lassen, damit die unseren Berechnungen zugrunde liegenden Annahmen nicht verletzt werden. Dadurch wird $g(\Delta\omega, t)$ zusammengeschieben und ist nur noch bei $\Delta\omega = 0$ von null verschieden. Die Wahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2$ ist also nur dann von null verschieden, wenn $|\omega_{\beta\alpha}| = \omega$, d.h. wenn

$$\hbar\omega = |E_\beta - E_\alpha|. \quad (15.44)$$

Diese Bedingung wird *Bohrsche Frequenzbedingung* oder einfach Resonanzbedingung genannt.

15.2.2 Lösung für schwache, nicht-monochromatische Strahlung

Bisher haben wir angenommen, dass das Strahlungsfeld durch eine monochromatische elektromagnetische Welle beschrieben wird. Wir betrachten nun in diesem Abschnitt den Fall, in dem das Strahlungsfeld durch eine elektromagnetische Welle mit kontinuierlichem Spektrum beschrieben wird. Nach Gl. (15.40) ist der Beitrag $d|c_\beta(t)|^2$ des Frequenzbereichs zwischen ω und $\omega + d\omega$ zu $|c_\beta(t)|^2$ gegeben durch

$$d|c_\beta(t)|^2 \sim \frac{E_0(\omega)^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2} d\omega, \quad (15.45)$$

wobei die Amplitude $E_0(\omega)$ neu von der Kreisfrequenz ω abhängt. Die Gesamtwahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2$ ergibt sich durch Integration über ω . Dazu darf nach den Ausführungen am Ende des Abschnitts 15.2.1 das Amplitudenquadrat $E_0^2(\omega)$ durch den festen Wert $E_0^2(\omega_{\beta\alpha})$ ersetzt werden, wenn man annimmt, dass

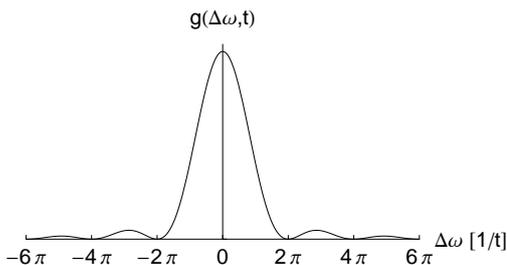


Abb. 15.3: Die Funktion $g(\Delta\omega, t)$ als Funktion von $\Delta\omega$ bei festem t .

die nichtmonochromatische Störung längere Zeit dauert. Es ergibt sich damit

$$\begin{aligned}
 |c_\beta(t)|^2 &= \int d|c_\beta(t)|^2 \\
 &\sim \frac{E_0(\omega_{\beta\alpha})^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{\hbar^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2} d\Delta\omega}_{=\pi t/2} \\
 &= \frac{\pi E_0(\omega_{\beta\alpha})^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{2\hbar^2} t.
 \end{aligned} \tag{15.46}$$

Die Wahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2$ das Teilchen (Elektron) im Zustand $\psi_\beta(x, y, z, t)$ anzutreffen ist also folglich proportional zur Zeit t und wir erhalten für die Übergangswahrscheinlichkeit $W_{\alpha\rightarrow\beta}$ pro Zeiteinheit

$$W_{\alpha\rightarrow\beta} = \frac{|c_\beta(t)|^2}{t} = \frac{\pi E_0(\omega_{\beta\alpha})^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2}{2\hbar^2}. \tag{15.47}$$

Es ist zu beachten, dass dieses einfache Resultat aufgrund der sehr vereinfachten Annahmen, die unserem Modell zugrunde liegen, zustande gekommen ist. In der Realität beobachtet man mit der Zeit oszillierende Wahrscheinlichkeiten $|c_\alpha(t)|^2 \propto \cos^2(\Gamma t)$ und $|c_\beta(t)|^2 \propto \sin^2(\Gamma t)$, d.h. es tritt abwechselnd stimulierte Emission und Absorption auf und die Besetzung der beiden Zustände α und β wechselt hin und her. Γ bezeichnet dabei die Frequenz dieser Oszillation.

15.3 Auswahlregeln

Wie wir in Abschnitt 15.2.1 gesehen haben, ist der Übergang (elektrischer Dipolübergang) zwischen zwei Energieniveaus unter Emission oder Absorption eines Photons möglich, wenn das entsprechende Matrixelement nicht verschwindet, ansonsten ist er verboten. Eine allgemeine notwendige Bedingung für das Nichtverschwinden eines Matrixelements haben wir bereits in diesem Zusammenhang kennengelernt: Anfangs- und Endzustand müssen unterschiedliche Parität haben.

In diesem Abschnitt leiten wir nun die Auswahlregeln für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator und das Wasserstoffatom her, d.h. die Bedingungen für das Nichtverschwinden der Matrixelemente.

15.3.1 Auswahlregeln für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator

Nach Abschnitt 10.2.4 ist der quantenmechanische harmonische Oszillator durch die Eigenfunktionen $\psi_n(x, t)$ und die Energieeigenwerte E_n charakterisiert, die gegeben sind durch

$$\psi_n(x, t) = u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \tag{15.48}$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{15.49}$$

wobei

$$u_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0 e^{-(x/x_0)^2/2})^{-1/2} H_n(x/x_0). \quad (15.50)$$

Aus Gl. (15.49) ist ersichtlich, dass der Abstand benachbarter Energieniveaus unabhängig von der Quantenzahl n ist und $\hbar\omega$ beträgt. Ebenfalls ist ersichtlich, dass die Eigenfunktionen gerade Parität haben, wenn n gerade ist und ungerade Parität, wenn n ungerade ist. Nach der bisher notwendigen „Paritätsregel“ für das Nichtverschwinden eines Matrixelements wären also folglich die Frequenzen $\omega, 3\omega, 5\omega, \dots$ für die emittierte bzw. absorbierte Strahlung zugelassen. Jedoch sollte sich bei sehr hohen Quantenzahlen n der quantenmechanische harmonische Oszillator wie ein klassischer harmonischer Oszillator verhalten und von diesem weiss man, dass er nur Strahlung der Frequenz ω emittieren bzw. absorbieren kann. Aus diesem Grund ist zu vermuten, dass nur die Matrixelemente benachbarter Zustände nicht verschwinden. Die entsprechende Auswahlregel wäre dann $\Delta n = \pm 1$.

Wir überprüfen diese Vermutung, indem wir das Matrixelement $x_{n_2 n_1}$ für zwei beliebige Zustände $u_{n_1}(x)$ und $u_{n_2}(x)$ berechnen. Es gilt

$$x_{n_2 n_1} = \int_{-\infty}^{\infty} u_{n_2}^*(x) x u_{n_1}(x) dx. \quad (15.51)$$

Einsetzen von (15.50) ergibt

$$x_{n_2 n_1} = (2^{n_2+n_1} n_2! n_1! \pi x_0)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x/x_0)^2} H_{n_2}(x/x_0) x H_{n_1}(x/x_0) dx. \quad (15.52)$$

Mit der Substitution $y = x/x_0$ erhalten wir

$$x_{n_2 n_1} = (2^{n_2+n_1} n_2! n_1! \pi)^{-1/2} x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_{n_2}(y) y H_{n_1}(y) dy. \quad (15.53)$$

Nach der Rekursionsformel (I.3) gilt

$$y H_{n_1}(y) = n_1 H_{n_1-1}(y) + \frac{1}{2} H_{n_1+1}(y). \quad (15.54)$$

Einsetzen in (15.53) ergibt

$$x_{n_2 n_1} = (2^{n_2+n_1} n_2! n_1! \pi)^{-1/2} x_0 \left(n_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_{n_2}(y) H_{n_1-1}(y) dy + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_{n_2}(y) H_{n_1+1}(y) dy \right). \quad (15.55)$$

Mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation (I.7) wird klar, dass das Matrixelement $x_{n_2 n_1}$ nur dann nicht verschwindet, wenn $n_2 = n_1 - 1$ oder $n_2 = n_1 + 1$ ist. Damit gilt:

Die Auswahlregel für elektrische Dipolübergänge zwischen den Energieniveaus beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator lautet

$$\Delta n = \pm 1. \quad (15.56)$$

Wir berechnen nun das Matrixelement $x_{n_2 n_1}$ für den Übergang $n_1 = n+1 \rightarrow n_2 = n$. Einsetzen in (15.55) liefert

$$x_{n,n+1} = (2^{2n+1} n!(n+1)! \pi)^{-1/2} x_0 \left((n+1) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n(y) H_{n+1}(y) dy + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_n(y) H_{n+2}(y) dy \right). \quad (15.57)$$

Mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation (I.7) lässt sich dieser Ausdruck berechnen. Insbesondere verschwindet der zweite Summand und wir erhalten

$$x_{n,n+1} = (2^{2n+1} n!(n+1)! \pi)^{-1/2} x_0 (n+1) \sqrt{\pi} 2^n n! = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}, \quad (15.58)$$

wobei $x_0 = \sqrt{\hbar/(\omega m)}$. Für den inversen Übergang $n_1 = n \rightarrow n_2 = n+1$ ergibt sich der gleiche Ausdruck. Demzufolge zeigt das Matrixelement $x_{n,n+1}$ des quantenmechanischen harmonischen Oszillators bzgl. der Quantenzahl n eine Wurzelabhängigkeit.

15.3.2 Auswahlregeln für Dipolübergänge im Wasserstoffatom

In den bisherigen Betrachtungen wurde angenommen, dass das elektrische Feld längs der x-Achse oszilliert. Im Beispiel des eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillators haben wir deshalb die Oszillationsachse der Masse m mit der x-Achse gleichgesetzt und das entsprechende Matrixelement $x_{\beta\alpha}$ bestimmt. Beim Wasserstoffatom handelt es sich nun um ein dreidimensionales System. Die Richtung des elektrischen Feldes wählen wir nicht mehr entlang der x-Achse, sondern wir unterscheiden allgemein die beiden Fälle linear polarisierte und zirkular polarisierte Strahlung. Im weiteren ist neu die Oszillation des Ladungsschwerpunkts längs der x-, y- und z-Achse zu betrachten. Entsprechend ist das zu betrachtende Matrixelement ein Vektor, dessen Komponenten gegeben sind durch

$$x_{\beta\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_{\beta}^*(x, y, z) x u_{\alpha}(x, y, z) dV, \quad (15.59)$$

$$y_{\beta\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_{\beta}^*(x, y, z) y u_{\alpha}(x, y, z) dV, \quad (15.60)$$

$$z_{\beta\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_{\beta}^*(x, y, z) z u_{\alpha}(x, y, z) dV. \quad (15.61)$$

Wir vernachlässigen hier einfachheitshalber den Spin des Elektrons und können daher den Anfangszustand $u_{\alpha}(x, y, z)$ des Wasserstoffatom durch die drei Quan-

tenzahlen n , l und m_l und den Endzustand $u_\beta(x, y, z)$ durch die drei Quantenzahlen n' , l' und m'_l charakterisieren. Entsprechend diesen drei Freiheitsgraden werden die Auswahlregeln aus drei Bedingungen bestehen.

Wir verwenden nun die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$, welche nach Gl. (11.86) gegeben sind durch

$$u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m_l}(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi) \quad (15.62)$$

und berechnen entsprechend die Matrixelemente $x_{\beta\alpha}$, $y_{\beta\alpha}$ und $z_{\beta\alpha}$ in Kugelkoordinaten. Mit den Transformationsregeln $x = r \sin \vartheta \cos \varphi$, $y = r \sin \vartheta \sin \varphi$ und $z = r \cos \vartheta$ und dem Volumenelement $dV = r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ erhalten wir

$$x_{\beta\alpha} = \int_0^\infty R_{n',l'}(r)R_{n,l}(r)r^3 dr \int_0^\pi \Theta_{l',m'_l}(\vartheta)\Theta_{l,m_l}(\vartheta) \sin^2 \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m'_l}^*(\varphi)\Phi_{m_l}(\varphi) \cos \varphi d\varphi, \quad (15.63)$$

$$y_{\beta\alpha} = \int_0^\infty R_{n',l'}(r)R_{n,l}(r)r^3 dr \int_0^\pi \Theta_{l',m'_l}(\vartheta)\Theta_{l,m_l}(\vartheta) \sin^2 \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m'_l}^*(\varphi)\Phi_{m_l}(\varphi) \sin \varphi d\varphi, \quad (15.64)$$

$$z_{\beta\alpha} = \int_0^\infty R_{n',l'}(r)R_{n,l}(r)r^3 dr \int_0^\pi \Theta_{l',m'_l}(\vartheta)\Theta_{l,m_l}(\vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m'_l}^*(\varphi)\Phi_{m_l}(\varphi) d\varphi. \quad (15.65)$$

Wie bereits erwähnt unterscheiden wir nun die beiden Fälle linear und zirkular polarisierte Strahlung.

Linear polarisierte Strahlung

Beim freien⁵ Wasserstoffatom ist eine einzige Achse ausgezeichnet, die z-Achse. Sie ist durch das Experiment bestimmt, das man an den Atomen durchführt. Im Fall linear polarisierter Strahlung oszilliert das elektrische Feld entlang einer festen Achse und aufgrund den Voraussetzungen, die unserer Näherung zugrunde liegen, können wir es im Volumen, in dem sich das Elektron mit grosser Wahrscheinlichkeit aufhält, als homogen betrachten. Demzufolge ist bzgl. des elektrischen Feldes nur dessen Schwingungsachse ausgezeichnet. Aus diesem Grund ist die z-Achse parallel zum elektrischen Feld zu wählen. Folglich oszilliert der Ladungsschwerpunkt entlang der z-Achse, d.h. es ist nur die Komponente $z_{\beta\alpha}$ des Matrixelements zu betrachten. Damit $z_{\beta\alpha}$ nicht verschwindet, müssen alle drei Faktoren in (15.65) ungleich null sein. Wir betrachten diese nun einzeln:

a) Der erste Faktor (Radial-Abhängigkeit)

Der erste Faktor enthält keine Auswahlregel.

⁵Unter einem freien Atom verstehen wir ein Atom, das nicht in ein Molekül oder in einen Kristall eingebaut ist.

b) *Der dritte Faktor (Azimutwinkel-Abhängigkeit)*

Nach (11.22) ist die Funktion $\Phi_{m_l}(\varphi)$ gegeben durch

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l\varphi}. \quad (15.66)$$

Somit ergibt sich für den dritten Faktor

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Phi_{m'_l}^*(\varphi) \Phi_{m_l}(\varphi) d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(-m'_l+m_l)\varphi} d\varphi \\ &= \begin{cases} 0, & m'_l \neq m_l, \\ 1, & m'_l = m_l. \end{cases} \end{aligned} \quad (15.67)$$

Demzufolge erhalten wir folgende notwendige Bedingung für einen elektrischen Dipolübergang bei linear polarisierter Strahlung

$$\Delta m_l = 0. \quad (15.68)$$

c) *Der zweite Faktor für $m'_l = m_l$ (Polarwinkel-Abhängigkeit)*

Nach (11.36) ist die Funktion $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ gegeben durch

$$\Theta_{l,m_l}(\vartheta) = \underbrace{\frac{2l+1}{2} \left(\frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right)^{1/2}}_{\equiv N_{l,m_l}} P_l^{m_l}(\cos \vartheta), \quad (15.69)$$

wobei wir den Vorfaktor mit N_{l,m_l} bezeichnen. Somit ergibt sich für den zweiten Faktor

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \Theta_{l',m'_l}(\vartheta) \Theta_{l,m_l}(\vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \\ &= N_{l',m'_l} N_{l,m_l} \int_0^\pi P_{l'}^{m'_l}(\cos \vartheta) P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \\ &= N_{l',m'_l} N_{l,m_l} \int_{-1}^1 P_{l'}^{m'_l}(x) x P_l^{m_l}(x) dx, \end{aligned} \quad (15.70)$$

wobei wir im letzten Schritt die Substitution $x = \cos \vartheta$ vorgenommen haben. Wir verwenden nun eine für die zugeordneten Legendre-Polynome $P_l^{m_l}(x)$ geltende Rekursionsformel, welche gegeben ist durch

$$x P_l^{m_l}(x) = \frac{l+m_l}{2l+1} P_{l-1}^{m_l}(x) - \frac{l+1-m_l}{2l+1} P_{l+1}^{m_l}(x). \quad (15.71)$$

Einsetzen in (15.70) ergibt

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \Theta_{l',m'_l}(\vartheta) \Theta_{l,m_l}(\vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \\ &= N_{l',m'_l} N_{l,m_l} \left(\frac{l+m_l}{2l+1} \int_{-1}^1 P_{l'}^{m'_l}(x) P_{l-1}^{m_l}(x) dx \right. \\ &\quad \left. - \frac{l+1-m_l}{2l+1} \int_{-1}^1 P_{l'}^{m'_l}(x) P_{l+1}^{m_l}(x) dx \right). \end{aligned} \quad (15.72)$$

Mit Hilfe der Orthogonalitätsbedingung (11.35) für die zugeordneten Legendre-Polynome wird klar, dass dieser Ausdruck nur dann nicht verschwindet, wenn $l' = l - 1$ oder $l' = l + 1$. Demzufolge erhalten wir folgende weitere notwendige Bedingung für einen elektrischen Dipolübergang bei linear polarisierter Strahlung

$$\Delta l = \pm 1. \quad (15.73)$$

Wir fassen zusammen:

Bei linear polarisierter einfallender Strahlung lauten die Auswahlregeln für einen elektrischen Dipolübergang beim Wasserstoffatom

$$\Delta m_l = 0, \quad (15.74)$$

$$\Delta l = \pm 1, \quad (15.75)$$

$$\Delta n \text{ beliebig.} \quad (15.76)$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass die Auswahlregeln $\Delta m_l = 0$ und $\Delta l = \pm 1$ für jedes kugelsymmetrische Potential gelten, da sie aus den Funktionen $\Phi_{m_l}(\varphi)$ und $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ folgen.

Zirkular polarisierte Strahlung

Betrachtet man eine Momentaufnahme der elektrischen Feldvektoren \vec{E} für zirkular polarisierte Wellen, so liegen diese auf einer Schraubenlinie (Helix). Bei einer rechtszirkularen Welle liegen die Spitzen der Vektoren auf einer Rechtsschraube und bei einer linkszirkularen Welle auf einer Linksschraube. Die ausgezeichnete Achse bei zirkularer Strahlung ist demzufolge parallel zur Ausbreitungsrichtung. Aus diesem Grund ist die z -Achse parallel zur Ausbreitungsrichtung zu wählen. Die Vektoren \vec{E} sind parallel zur xy -Ebene. In einer gegebenen Ebene $z = \text{konstant}$ wird dann ein rotierender Vektor \vec{E} von konstantem Betrag E_0 festgestellt. Blickt man der Welle entgegen, dann dreht sich \vec{E} bei der rechtszirkularen Welle im Uhrzeigersinn und bei der linkszirkularen Welle im Gegenuhrzeigersinn (siehe Abb. 15.4).

Wir betrachten nun das Wasserstoffatom bei $z = 0$ und setzen für die harmonisch oszillierenden Komponenten E_x und E_y des elektrischen Feldes \vec{E}

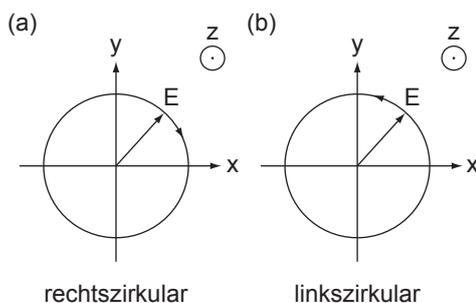


Abb. 15.4: Querschnitt einer (a) rechtszirkular und (b) linkszirkular polarisierten Welle für eine Welle mit Ausbreitungsrichtung entlang der positiven z -Achse: Der elektrische Feldvektor \vec{E} dreht sich im Uhrzeiger- bzw. Gegenuhrzeigersinn.

für eine links- bzw. rechtszirkulare Welle, welche sich entlang der positiven z-Achse bewegt

$$E_x^\circ = E_0 \cos(\omega t), E_y^\circ = E_0 \sin(\omega t) \text{ bzw.} \quad (15.77)$$

$$E_x^\circ = E_0 \cos(\omega t), E_y^\circ = -E_0 \sin(\omega t). \quad (15.78)$$

Aus Symmetriegründen muss die Drehung von \vec{E} das Atom in einen nichtstationären Zustand bringen, bei dem der Erwartungswert des elektrischen Dipolmoments in der xy-Ebene liegt und bei konstantem Betrag rotiert. Wir nehmen nun an, dass die Bohrsche Frequenzbedingung (15.44) erfüllt sei. Dann gilt nach (15.35) bei gleichen Koeffizienten in der Linearkombination von Anfangs- und Endzustand für die linkszirkulare Welle

$$\langle qx \rangle = q|x_{\beta\alpha}| \cos(\omega_{\beta\alpha}t + \delta), \quad (15.79)$$

$$\langle qy \rangle = q|y_{\beta\alpha}| \sin(\omega_{\beta\alpha}t + \delta) = q|y_{\beta\alpha}| \cos(\omega_{\beta\alpha}t + \delta - \pi/2). \quad (15.80)$$

Der Phasenwinkel δ soll dabei andeuten, dass die Drehung des Erwartungswerts des Dipolmoments nicht notwendigerweise in Phase ist mit der Drehung von \vec{E} . Aus Symmetriegründen müssen die Amplituden von $\langle qx \rangle$ und $\langle qy \rangle$ gleich sein und $\langle qx \rangle$ und $\langle qy \rangle$ sich als Realteil derselben komplexen Zahl darstellen lassen

$$\langle qx \rangle \text{ ist der Realteil von } qx_{\beta\alpha} e^{i(\omega_{\beta\alpha}t + \delta)}, \quad (15.81)$$

$$\langle qy \rangle \text{ ist der Realteil von } qy_{\beta\alpha} e^{i(\omega_{\beta\alpha}t + \delta)} e^{-i\pi/2} \quad (15.82)$$

und demzufolge ergibt sich für die linkszirkulare Welle die Bedingung $x_{\beta\alpha} = -iy_{\beta\alpha}$. Für die rechtszirkulare Welle erhält man analog die Bedingung $x_{\beta\alpha} = iy_{\beta\alpha}$. Eine notwendige Bedingung, dass nun $x_{\beta\alpha}$ und $y_{\beta\alpha}$ nicht verschwinden, ergibt sich aus (15.63) und (15.64). Die Integrale über r und ϑ stimmen überein und wir können schreiben

$$x_{\beta\alpha} = C \int_0^{2\pi} \Phi_{m'_l}^*(\varphi) \Phi_{m_l}(\varphi) \cos \varphi d\varphi, \quad (15.83)$$

$$y_{\beta\alpha} = C \int_0^{2\pi} \Phi_{m'_l}^*(\varphi) \Phi_{m_l}(\varphi) \sin \varphi d\varphi \quad (15.84)$$

mit

$$C = \int_0^\infty R_{n',l'}(r) R_{n,l}(r) r^3 dr \int_0^\pi \Theta_{l',m'_l}(\vartheta) \Theta_{l,m_l}(\vartheta) \sin^2 \vartheta d\vartheta. \quad (15.85)$$

Einsetzen von (15.66) ergibt

$$\begin{aligned} x_{\beta\alpha} &= \frac{C}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(-m'_l+m_l)\varphi} \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} d\varphi \\ &= \frac{C}{4\pi} \int_0^{2\pi} \left(e^{i(-m'_l+m_l+1)\varphi} + e^{i(-m'_l+m_l-1)\varphi} \right) d\varphi, \end{aligned} \quad (15.86)$$

$$\begin{aligned} y_{\beta\alpha} &= \frac{C}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(-m'_l+m_l)\varphi} \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} d\varphi \\ &= \frac{C}{4\pi i} \int_0^{2\pi} \left(e^{i(-m'_l+m_l+1)\varphi} - e^{i(-m'_l+m_l-1)\varphi} \right) d\varphi. \end{aligned} \quad (15.87)$$

Demzufolge existieren nur zwei Fälle, für die $x_{\beta\alpha}$ und $y_{\beta\alpha}$ nicht verschwinden

$$-m'_l + m_l + 1 = 0 \Rightarrow \Delta m_l = +1, \quad (15.88)$$

$$-m'_l + m_l - 1 = 0 \Rightarrow \Delta m_l = -1. \quad (15.89)$$

$\Delta m_l = +1$ entspricht $x_{\beta\alpha} = iy_{\beta\alpha}$, d.h. einer rechtszirkularen Welle, die sich längs der z-Achse fortpflanzt und $\Delta m_l = -1$ entspricht $x_{\beta\alpha} = -iy_{\beta\alpha}$, d.h. einer linkszirkularen Welle, die sich längs der z-Achse fortpflanzt.

Analog zum linear polarisierten Fall ergeben sich die weiteren Auswahlregeln zu $\Delta l = \pm 1$ und Δn beliebig.

Wir fassen zusammen:

Bei zirkular polarisierter einfallender Strahlung lauten die Auswahlregeln für einen elektrischen Dipolübergang beim Wasserstoffatom

$$\Delta m_l = \pm 1, \quad (15.90)$$

$$\Delta l = \pm 1, \quad (15.91)$$

$$\Delta n \text{ beliebig.} \quad (15.92)$$

15.4 Zusammenfassung

- In quantenmechanischen Systemen wird das Auftreten von Übergängen zwischen einzelnen Energieniveaus durch sogenannte Auswahlregeln bestimmt. Diese geben Auskunft, ob ein Übergang zwischen zwei Energieniveaus unter (spontaner oder stimulierter) Emission oder Absorption eines Photons möglich ist oder nicht. Spontane Emission rührt von der Wechselwirkung des Systems mit den Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes, stimulierte Emission und Absorption von der Wechselwirkung des Systems mit einer externen elektromagnetischen Welle (Strahlungsfeld).
- Nach den Regeln der klassischen Elektrodynamik strahlt eine oszillierende Ladungsverteilung elektromagnetische Strahlung ab. Ein System, das sich in einem stationären Zustand $\psi_S(x, y, z, t)$ befindet und daher eine von der Zeit unabhängige Ladungsdichte $\rho(x, y, z, t) = q|\psi_S(x, y, z, t)|^2$ besitzt, würde daher keine elektromagnetische Strahlung aussenden. Jedoch existieren sowohl beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator als auch beim Wasserstoffatom nichtstationäre Zustände, welche oszillierenden Ladungsverteilungen entsprechen und Aussendung von elektromagnetischer Strahlung zur Folge haben.
- Ein quantenmechanisches System kann in einem externen Strahlungsfeld seinen Zustand aufgrund stimulierter Emission oder Absorption wechseln. Diese beiden Vorgänge lassen sich durch ein einfaches semiklassisches Modell beschreiben: Ein Teilchen der Ladung q , beschrieben durch

den Hamilton-Operator $\hat{H} = -\hbar^2/2m\Delta + V(x, y, z)$, kann die beiden stationären Zustände $\psi_\alpha(x, y, z, t) = u_\alpha(x, y, z)e^{-iE_\alpha t/\hbar}$ und $\psi_\beta(x, y, z, t) = u_\beta(x, y, z)e^{-iE_\beta t/\hbar}$ einnehmen (Zwei-Niveau-Näherung) und befinde sich in einem externen Strahlungsfeld, beschrieben durch eine klassische ebene längs der x-Achse polarisierte elektromagnetische Welle. Der Einfluss des Magnetfelds wird dabei vernachlässigt und das elektrische Feld als homogen betrachtet. Diese Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld kann derart betrachtet werden, dass dem zeitlich konstanten Potential V , welches die Energieniveaus des Quantensystems bestimmt, ein zeitlich oszillierendes Störpotential $V'(x, t) = -qE_0x \cos(\omega t)$ überlagert wird. Durch die Störung geht das Teilchen in den Zustand $\psi(x, y, z, t) = c_\alpha\psi_\alpha(x, y, z, t) + c_\beta\psi_\beta(x, y, z, t)$ über, wobei $|c_\alpha|^2 + |c_\beta|^2 = 1$.

- Für schwache, streng monochromatische Strahlung ergibt sich mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung für die Wahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2$ das Resultat $|c_\beta(t)|^2 \sim E_0^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2 / \hbar^2 \sin^2(\Delta\omega t/2) / \Delta\omega^2$, wobei $x_{\beta\alpha} = \int u_\beta^*(x, y, z) x u_\alpha(x, y, z) dV$ Matrixelement des Übergangs $\alpha \rightarrow \beta$ für längs der x-Achse polarisierter elektromagnetischer Strahlung genannt wird. Dabei gilt die Regel: Wenn das Matrixelement $x_{\beta\alpha}$ endlich ist, dann ist der Übergang erlaubt und wenn es verschwindet, dann ist er verboten. Eine genauere Analyse liefert für Existenz des Übergangs die zusätzliche Bedingung (Bohrsche Frequenzbedingung) $\hbar\omega = |E_\beta - E_\alpha|$, d.h. die Frequenz des Strahlungsfelds ω multipliziert mit dem Planckschen Wirkungsquantum muss der Energiedifferenz der beiden beteiligten Energieniveaus entsprechen. Dieses Resultat gilt sowohl für die Absorption als auch die (stimulierte) Emission, was bedeutet, dass diese beiden Vorgänge mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftreten.
- Für schwache, nicht-monochromatische Strahlung ergibt sich eine zur Zeit proportionale Wahrscheinlichkeit $|c_\beta(t)|^2 \sim \pi E_0(\omega_{\beta\alpha})^2 q^2 |x_{\beta\alpha}|^2 / (2\hbar^2) t$. Es ist jedoch zu beachten, dass dieses einfache Resultat aufgrund der sehr vereinfachten Annahmen, die unserem Modell zugrunde liegen, zustande gekommen ist. In der Realität beobachtet man mit der Zeit oszillierende Wahrscheinlichkeiten $|c_\alpha(t)|^2 \propto \cos^2(\Gamma t)$ und $|c_\beta(t)|^2 \propto \sin^2(\Gamma t)$, d.h. es tritt abwechselnd stimulierte Emission und Absorption auf und die Besetzung der beiden Zustände α und β wechselt hin und her. Γ bezeichnet dabei die Frequenz dieser Oszillation.
- Die Auswahlregeln werden durch die Bedingung, dass die entsprechenden Matrixelemente nicht verschwinden dürfen, festgelegt. Für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator ergibt sich die Bedingung $\Delta n = \pm 1$, d.h. es sind nur Übergänge zwischen benachbarten Zuständen zulässig. Beim Wasserstoffatom ist für die Bestimmung der Auswahlregeln zwischen linear polarisierter und zirkular polarisierter Strahlung zu unterscheiden. Für linear polarisierte Strahlung ergeben sich die Bedingungen $\Delta m_l = 0$, $\Delta l = \pm 1$ und Δn beliebig und für zirkular polarisierte Strahlung $\Delta m_l = \pm 1$, $\Delta l = \pm 1$ und Δn beliebig.

Kapitel 16

Mehrelektronenatome

Bisher haben wir uns vorwiegend mit der quantenmechanischen Beschreibung des einfachsten Atoms, des Wasserstoffatoms, beschäftigt und teilweise diese Betrachtungen auf andere Systeme, in denen ein einzelnes Elektron um einen positiven Kern kreist, erweitert. In diesem Kapitel widmen wir uns nun Atomen mit mehreren Elektronen. Eine exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung ist zwar für das Heliumatom (zwei Elektronen) unter gewissen Annahmen möglich, jedoch für Atome mit mehr als zwei Elektronen aussichtslos. Es existieren aber diverse Näherungslösungen bzw. daraus abgeleitete angenäherte Modelle für Mehrelektronenatome. Wir beschäftigen uns hier mit einem der einfachsten Modelle, dem *Schalenmodell*, welches sich direkt aus der Verallgemeinerung der Resultate des Wasserstoffatoms ergibt.

Als erstes befassen wir uns mit der Wellenfunktion von Mehrelektronenatomen. In diesem Zusammenhang formulieren wir das vierte Postulat der Quantenmechanik und gehen auf die sogenannte *Austauschsymmetrie* ein. Anschließend folgt das Pauli-Prinzip und die Klassifizierung von Teilchen (Elementarteilchen, Atome, Moleküle, ...) in Fermionen und Bosonen. Ausgehend von diesen Gesetzen befassen wir uns dann mit dem Aufbau von Mehrelektronenatomen. Wir betrachten die Besetzung der elektronischen Zustände, die Berechnung von Gesamtbahndrehimpuls, Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls, sowie die Bestimmung des Grundzustands aufgrund der sogenannten *Hundschen Regeln*.

16.1 Die Wellenfunktion von Mehrelektronenatomen

16.1.1 Das vierte Postulat der Quantenmechanik

Für die Wellenfunktion ψ von nichtwechselwirkenden Teilchen, beispielsweise für ein Mehrelektronenatom, gilt das folgende Postulat:

Postulat 4 Die Wellenfunktion $\psi(1, 2, 3, \dots, n)$ eines Systems aus n nicht-unterscheidbaren, nicht-wechselwirkenden Teilchen wird durch ein (Tensor-)Produkt der Wellenfunktionen $\psi(i)$ der einzelnen Teilchen beschrieben

$$\psi(1, 2, \dots, n) = \psi(1)\psi(2)\psi(3) \cdot \dots \cdot \psi(n). \quad (16.1)$$

16.1.2 Die Austauschsymmetrie

Die sogenannte Austauschsymmetrie präzisiert die Eigenschaften der Mehrteilchenwellenfunktion (16.1) bzgl. der Vertauschung von Teilchen bzw. ihrer Indizes.

Illustration der Austauschsymmetrie an einem Zweielektronensystem ohne Spin

Wir betrachten zwei Elektronen (ohne Spin) am Ort $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ und $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$, die sich im Coulomb-Feld eines Atomkerns der Ladung $+Ze$ bewegen (siehe Abb. 16.1). Der Kern wird als fest betrachtet und befindet sich im Ursprung des Koordinatensystems. Die potentielle Energie der Elektronen setzt sich zusammen aus der potentiellen Energie $V_1(\vec{r}_1)$ und $V_2(\vec{r}_2)$ im Coulomb-Feld des Atomkerns

$$V_1(\vec{r}_1) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \text{ mit } r_1 = |\vec{r}_1|, \quad (16.2)$$

$$V_2(\vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \text{ mit } r_2 = |\vec{r}_2| \quad (16.3)$$

und der potentiellen Energie $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen

$$V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \text{ mit } r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|. \quad (16.4)$$

Die kinetische Energie $E_{\text{kin}}^{(1)}$ und $E_{\text{kin}}^{(2)}$ der beiden Elektronen ist gegeben durch

$$E_{\text{kin}}^{(1)} = \frac{1}{2m} (p_{x_1}^2 + p_{y_1}^2 + p_{z_1}^2), \quad (16.5)$$

$$E_{\text{kin}}^{(2)} = \frac{1}{2m} (p_{x_2}^2 + p_{y_2}^2 + p_{z_2}^2). \quad (16.6)$$

Demzufolge lautet die Hamilton-Funktion H für das Zweielektronensystem

$$\begin{aligned} H &= E_{\text{kin}}^{(1)} + E_{\text{kin}}^{(2)} + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\ &= \frac{1}{2m} (p_{x_1}^2 + p_{y_1}^2 + p_{z_1}^2) + \frac{1}{2m} (p_{x_2}^2 + p_{y_2}^2 + p_{z_2}^2) \\ &\quad - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \end{aligned} \quad (16.7)$$

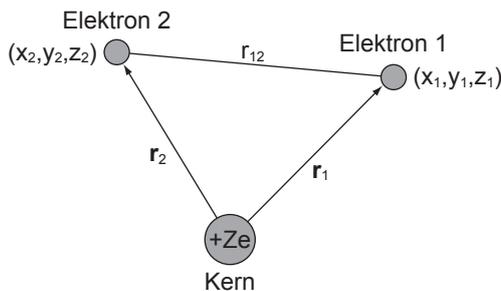


Abb. 16.1: Zwei Elektronen am Ort $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ und $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ im Coulomb-Feld eines sich im Ursprung des Koordinatensystems befindenden Atomkerns der Ladung $+Ze$.

Der entsprechende Hamilton-Operator \hat{H} ist gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \quad (16.8)$$

Dieser Hamilton-Operator \hat{H} wirkt auf die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$, welche den Zustand des Zweiteilchensystems beschreibt, wobei $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit ist, das Elektron 1 zur Zeit t im Volumenelement $dV_1 = dx_1 dy_1 dz_1$ am Ort \vec{r}_1 und gleichzeitig das Elektron 2 im Volumenelement $dV_2 = dx_2 dy_2 dz_2$ am Ort \vec{r}_2 anzutreffen. Da die potentielle Energie $V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ die Zeit t nicht explizit enthält, existieren stationäre Zustände, d.h. es gilt

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-iEt/\hbar}, \quad (16.9)$$

wobei $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = Eu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (16.10)$$

ist. Das Lösen dieser Gleichung ist erheblich erschwert durch den Wechselwirkungsterm $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Aus diesem Grund ist auch das Postulat 4 nicht anwendbar, da die beiden Elektronen nicht unabhängig voneinander sind. Wir werden hier diese Wechselwirkung vernachlässigen. In dieser Näherung ist dann der Hamilton-Operator als Summe zweier unabhängiger Hamilton-Operatoren darstellbar. Jedes Elektron hat dann seine eigene Schrödinger-Gleichung mit den Lösungen $u_a(\vec{r}_1)$ bzw. $u_b(\vec{r}_2)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) u_a(\vec{r}_1) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} u_a(\vec{r}_1) = E_a u_a(\vec{r}_1), \quad (16.11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) u_b(\vec{r}_2) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} u_b(\vec{r}_2) = E_b u_b(\vec{r}_2). \quad (16.12)$$

Die Gesamtwellenfunktion $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ lässt sich dann in Übereinstimmung mit Postulat 4 als Produkt der beiden Funktionen $u_a(\vec{r}_1)$ und $u_b(\vec{r}_2)$ schreiben und gehört zum Energiewert $E = E_a + E_b$. $u_a(\vec{r}_1)$ und $u_b(\vec{r}_2)$ sind dabei gegeben durch die Eigenfunktionen $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms.

Jedoch folgt aus der Unschärferelation, dass man die Bewegung eines Elektrons nicht genau verfolgen kann. Als Konsequenz ergibt sich daraus, dass man die beiden Elektronen im betrachteten Atom nicht auseinanderhalten bzw. unterscheiden kann. Das hat zur Folge, dass sich bei der Vertauschung der beiden Elektronen, repräsentiert durch die Vertauschung der beiden Indizes 1 und 2, die Wahrscheinlichkeitsdichte $|u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ nicht ändern darf. Dies ist die Forderung der *Austauschsymmetrie*.

Die Produktwellenfunktion $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$ erfüllt diese Forderung nicht, denn $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$ ist nicht die selbe Funktion wie $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$, es sei denn die Quantenzahlen n_a, l_a, m_{l_a} stimmen paarweise mit den Quantenzahlen n_b, l_b, m_{l_b} überein. Andererseits ist in der Näherung $V_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = 0$ die Produktwellenfunktion $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$ mit vertauschten Indizes 1 und 2 auch eine Eigenfunktion des Hamilton-Operators \hat{H} zum selben Eigenwert $E = E_a + E_b$. Diese Tatsache können wir zur Konstruktion von Eigenfunktion ausnützen, welche die Austauschsymmetrie erfüllen und den Zustand des Zweielektronensystems beschreiben, indem wir Linearkombinationen von $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$ und $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$ bilden. Diese sind nach Satz 9.4 wiederum Eigenfunktionen von \hat{H} zum selben Eigenwert $E = E_a + E_b$. Es ergeben sich dann die beiden folgenden normierten Linearkombinationen der Produktwellenfunktionen $u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2)$ und $u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)$, welche der Forderung der Austauschsymmetrie genügen

$$u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) + u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)), \quad (16.13)$$

$$u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)), \quad (16.14)$$

wobei die *symmetrische* Linearkombination $u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ bei der Vertauschung der beiden Indizes 1 und 2 unverändert bleibt und die *antisymmetrische* Linearkombination $u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ nur das Vorzeichen wechselt. Demzufolge bleiben $|\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 = |u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ und $|\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 = |u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ bei der Vertauschung der Indizes 1 und 2 unverändert und die Forderung der Austauschsymmetrie ist gewährleistet.

Wir weisen an dieser Stelle darauf hin, dass in der Realität aufgrund des Pauli-Prinzips (siehe Abschnitt 16.2) für Elektronen nicht beide Möglichkeiten (16.13) und (16.14), d.h. symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion, zugelassen sind, sondern Elektronen eine antisymmetrische Wellenfunktion haben müssen.

Allgemeine Formulierung der Austauschsymmetrie

Die Forderung der Austauschsymmetrie muss auch im Fall von zwei wechselwirkender Elektronen erfüllt sein, denn diese lassen sich genau so wenig unterscheiden wie unabhängige Elektronen. Allerdings kann man dann nicht mehr mit den im vorangegangenen Abschnitt benützten Produktwellenfunktionen operieren. Ebenfalls sind auch noch die Spinkoordinaten σ_1 und σ_2 in die Wellenfunktion einzubeziehen. Die Gesamtwellenfunktion inkl. Spin muss dann entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein, wenn die Forderung der Austauschsymmetrie erfüllt sein soll bzw. ist, wie erwähnt, für Elektronen (mit Spin) nach dem Pauli-Prinzip (siehe Abschnitt 16.2) nur eine antisymmetrische Gesamtwellenfunktion zugelassen.

Zum Abschluss dieses Abschnitts formulieren wir die Forderung der Austauschsymmetrie allgemein:

Die Wellenfunktion $\psi(1, 2, \dots, n)$ eines Systems aus n (wechselwirkenden) Teilchen (Elektronen) erfüllt die *Austauschsymmetrie*, wenn beim beliebigen Tausch zweier Teilchen (Elektronen) die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(1, 2, \dots, n)|^2$ unverändert bleibt.

Es sei bemerkt, dass diese Forderung der Austauschsymmetrie auch in diesem allgemeinen Fall durch die Konstruktion von symmetrischen (bleiben unverändert bei der Vertauschung zweier Teilchen) und antisymmetrischen (ändern das Vorzeichen bei der Vertauschung zweier Teilchen) Wellenfunktionen erfüllt werden kann. Wir weisen zudem darauf hin, dass die Existenz von symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen sich in der Klassifizierung der Teilchen in Fermionen und Bosonen widerspiegelt (siehe Abschnitt 16.3).

16.2 Das Pauli-Prinzip

Wolfgang Pauli formulierte 1925 das berühmte *Pauli-Prinzip*, auch *Paulisches Ausschlussprinzip* genannt. Es lautet folgendermassen:

Ein System von Elektronen wird durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben.

Diese allgemeine und abstrakte Formulierung wird anschaulicher, wenn man sie auf das in Abschnitt 16.1.2 betrachtete Beispiel von zwei Elektronen anwendet, deren Wechselwirkung vernachlässigt wird. Nach dem Pauli-Prinzip wird dieses System durch die antisymmetrische Wellenfunktion $u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ beschrieben, welche nach (16.14) gegeben ist durch

$$u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_a(\vec{r}_1)u_b(\vec{r}_2) - u_a(\vec{r}_2)u_b(\vec{r}_1)). \quad (16.15)$$

Diese Funktion verschwindet, wenn $u_a(\vec{r})$ und $u_b(\vec{r})$ die selbe Funktion darstellen, d.h. wenn die vier Quantenzahlen n_a, l_a, m_{l_a} und m_{s_a} des einen Elektrons mit den entsprechenden vier Quantenzahlen n_b, l_b, m_{l_b} und m_{s_b} des anderen Elektrons übereinstimmen. Dies bedeutet, dass ein solcher Zustand des Zweielektronensystems nicht vorkommt.

Diese Beobachtung lässt sich auf ein System bestehend aus beliebig vielen Elektronen verallgemeinern. Daraus ergibt sich folgende alternative Formulierung des Pauli-Prinzips:

Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.

Das Pauli-Prinzip in dieser Formulierung werden wir uns bei der Betrachtung des Atomaufbaus von Mehrelektronenatomen (siehe Abschnitt 16.4) zunutze machen.

16.3 Fermionen und Bosonen

Aufgrund von experimentellen Ergebnissen lassen sich im Allgemeinen Teilchen in zwei Sorten unterteilen, *Fermionen* und *Bosonen*, die folgendermassen definiert sind:

Definition 16.1 *Wir unterscheiden die beiden folgenden Teilchentypen:*

- a) *Teilchen mit halbzahligem Spin ($s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$) wie zum Beispiel Elektronen, Protonen und Neutronen werden **Fermionen** genannt und werden durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben. Fermionen erfüllen das Pauli-Prinzip.*
- b) *Teilchen mit ganzzahligem Spin ($s = 0, 1, 2, \dots$) wie zum Beispiel Photonen, α -Teilchen und Helium-Atome werden **Bosonen** genannt und werden durch eine symmetrische Wellenfunktion beschrieben. Bosonen unterliegen nicht dem Pauli-Prinzip.*

Neben den Elementarteilchen¹ (Elektronen, Protonen und Neutronen) mit Spin $s = 1/2$ existieren viele Atomkerne mit halbzahligem Spin zwischen $s = 1/2$ und $s = 9/2$. Die Quantenzahl m_s kann dann jeweils alle halbzahligen Werte zwischen $-s$ und $+s$ annehmen. Ebenfalls gibt es auch einige Atomkerne mit ganzzahligem Spin zwischen $s = 0$ und $s = 6$. Entsprechend kann in diesem Fall die Quantenzahl m_s alle ganzzahligen Werte zwischen $-s$ und $+s$ annehmen.

16.4 Der Aufbau von Mehrelektronenatomen

Wir kommen nun zu einer qualitativen Betrachtung des Aufbaus von Mehrelektronenatomen anhand des *Schalenmodells*. Wie in der Einleitung erwähnt, ergibt sich dieses einfachste Modell direkt aus den Resultaten der Berechnungen zum Wasserstoffatom.

Die Zustände der Elektronen werden ausgehend vom Wasserstoffatommodell durch die vier Quantenzahlen n , l , m_l und m_s beschrieben, für die gilt

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad (16.16)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1, \quad (16.17)$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad (16.18)$$

$$m_s = \pm 1/2. \quad (16.19)$$

Alle Zustände, die zu einer festen Hauptquantenzahl n gehören, bilden dabei eine *Schale*, alle Zustände, die zu einer festen Bahndrehimpulsquantenzahl l gehören, bilden eine *Unterschale*. In einer Unterschale hat es demzufolge Platz für $(2s+1)(2l+1) = 2(2l+1)$ Elektronen und in einer Schale für $\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$ Elektronen.

¹Aus heutiger Sicht gelten die Teilchen, welche im Standardmodell der Teilchenphysik aufgeführt sind als Elementarteilchen. Im Rahmen dieses Buchs, sind jedoch die Elektronen, Protonen und Neutronen die kleinsten Bestandteile der Atome und aus diesem Grund fassen wir diese drei Teilchen unter dem Namen Elementarteilchen zusammen.

Wir kommen nun zur Besetzung der Elektronenzustände und damit der Schalen und Unterschalen von Atomen durch Elektronen. Diese erfolgt nach zwei Prinzipien:

1. Pauli-Prinzip (siehe Abschnitt 16.2): Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.
2. Ein Atom nimmt einen stabilen Zustand ein, wenn seine Gesamtenergie minimal ist.

Für die Angabe der Besetzung der Elektronenzustände und damit zur Charakterisierung des Elektronenzustands eines Atoms verwendet man die folgende Notation: Man gibt die Hauptquantenzahl n gefolgt von der Bahndrehimpulsquantenzahl l , bezeichnet durch den zugehörigen Buchstaben, in Klammern an und hochgestellt die Anzahl Elektronen, welche sich in dieser Unterschale befinden. Zum Beispiel gilt für das Natriumatom die Elektronenkonfiguration $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$, d.h. es befinden sich jeweils zwei Elektronen in der $1s$ - und $2s$ -Unterschale, sechs Elektronen in der $2p$ -Unterschale und ein Elektron in der $3s$ -Unterschale.

16.4.1 Das Periodensystem der Elemente

Wir betrachten nun ausgehend vom Wasserstoffatom die Atome des Periodensystems (siehe Abb. 7.3), indem wir die Elektronenzustände schrittweise nach den oben genannten Regeln mit Elektronen besetzen.

Bis zu Argon mit der Ordnungszahl 18 (Ende Periode² III) werden die Zustände der Reihe nach besetzt, d.h. das Füllen der Unterschalen erfolgt in der Reihenfolge $1s$, $2s$, $2p$, $3s$ und $3p$ (siehe Tab. 16.1).

Anschliessend erfolgt eine erste Ausnahme. Da die $4s$ -Unterschale energetisch tiefer liegt als die $3d$ -Unterschale, werden die nächsten beiden Elektronen in der $4s$ -Unterschale untergebracht (Kalium und Calcium). Es folgt dann mit kleinen Ausnahmen die Besetzung der $3d$ -Unterschale mit zehn weiteren Elektronen (Scandium bis Zink). Damit sind alle Zustände mit $n = 3$ besetzt und die nächsten sechs Elektronen finden in der $4p$ -Unterschale Platz (Gallium bis Krypton). Somit ist die IV. Periode abgeschlossen.

Die V. Periode wird analog zur IV. Periode mit Elektronen gefüllt: Zwei Elektronen finden in der $5s$ -Unterschale (Rubidium und Strontium) Platz, mit kleinen Ausnahmen zehn Elektronen in der $4d$ -Unterschale (Yttrium bis Cadmium) und sechs Elektronen in der $5p$ -Unterschale (Indium bis Xenon).

Zum Start der VI. Periode werden zwei Elektronen in der $6s$ -Unterschale platziert (Cäsium und Barium). Dann folgen mit kleinen Ausnahmen vierzehn Elektronen in der $4f$ -Unterschale (Lanthan bis Ytterbium) und zehn Elektronen in der $5d$ -Unterschale (Lutetium bis Quecksilber) und zum Abschluss der VI. Periode sechs Elektronen in der $6p$ -Unterschale (Thallium bis Radon).

²Die Reihen des Periodensystems werden Perioden und die Spalten Gruppen und Nebengruppen genannt (siehe Abschnitt 7.3).

Ordnungszahl (Z)	Symbol	Bezeichnung	Elektronenkonfiguration
1	H	Wasserstoff	$(1s)^1$
2	He	Helium	$(1s)^2$
3	Li	Lithium	$(1s)^2(2s)^1$
4	Be	Beryllium	$(1s)^2(2s)^2$
5	B	Bor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^1$
6	C	Kohlenstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$
7	N	Stickstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$
8	O	Sauerstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^4$
9	F	Fluor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^5$
10	Ne	Neon	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$
11	Na	Natrium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$
12	Mg	Magnesium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2$
13	Al	Aluminium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^1$
14	Si	Silicium	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^2$
15	P	Phosphor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^3$
16	S	Schwefel	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4$
17	Cl	Chlor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$
18	Ar	Argon	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6$

Tab. 16.1: Die Elektronenkonfigurationen der Atome mit Ordnungszahlen 1 - 18 des Periodensystems.

Die Besetzung der Elektronenzustände in der VII. und damit letzten Periode erfolgt nach dem selben Muster wie bei der VI. Periode. Die $7s$ -Unterschale wird mit zwei Elektronen gefüllt (Francium und Radium), die $5f$ -Unterschale mit vierzehn (Actinium bis Lawrencium), die $6d$ -Unterschale mit zehn (Rutherfordium bis Copernicium) und die $7p$ -Unterschale mit sechs (Ununtrium bis Ununoctium).

Für einige Gruppen von Atomen existieren in der Literatur spezielle Namen, die wir hier kurz auflisten:

- Die Atome, bei denen die d - oder f -Unterschalen besetzt werden, werden *Übergangselemente* genannt.
- Die Atome, bei denen die d -Unterschalen besetzt werden, heissen *Übergangsmetalle*. Die Atome der $3d$ -Unterschale (Scandium bis Zink) erhalten den Namen *Eisengruppe*, die Atome der $4d$ -Unterschale (Yttrium bis Cadmium) *Palladiumgruppe* und die Atome der $5d$ -Unterschale (Lutetium bis Quecksilber) *Platingruppe*.
- Die Atome Lanthan bis Ytterbium der $4f$ -Unterschale nennt man *Lanthanoide* oder *seltene Erden* und die Atome Actinium bis Lawrencium der $5f$ -Unterschale *Actinoide*.

Allgemein bestimmen die äussersten Elektronen die chemischen Eigenschaften eines Atoms. Aus diesem Grund haben Atome, welche in der selben Gruppe

des Periodensystems positioniert sind, ähnliche chemische Eigenschaften. Auf die Eigenschaften der Atome der ersten und letzten Gruppe gehen wir hier beispielhaft ein.

Die Alkali-Atome

Die Alkali-Atome Lithium bis Francium befinden sich in der ersten Gruppe des Periodensystems und besitzen ein Elektron in der äussersten Schale. Auf das äusserste Elektron wirkt aufgrund der Abschirmung der anderen Elektronen eine reduzierte und relativ geringe Kernladung. Deshalb kann das äusserste Elektron relativ leicht vom Atom getrennt werden. Aus diesem Grund können Alkali-Atome angenähert durch das Wasserstoffatommodell beschrieben werden (siehe Abb. 16.2). Dies zeigt sich auch in Experimenten, die Eigenschaften von Alkali-Atomen sind denen von Wasserstoff sehr ähnlich. Z.B. sind die Atome in dieser Gruppe chemisch sehr reaktiv. Dennoch unterscheiden sich die Alkali-Atome vom Wasserstoffatom in einem wesentlichen Punkt, Wasserstoff ist weder fest noch zeigt er Eigenschaften von Metallen. Dies ist auch der Grund, weshalb Wasserstoff, obwohl es im Periodensystem auch in der ersten Gruppe aufgeführt wird, nicht zu den Alkali-Atomen gezählt wird.

Die Edelgase

Zu den Edelgasen gehören die sieben Atome der achten und letzten Gruppe des Periodensystems, d.h. Helium, Neon, Argon, Krypton, Xenon, Radon und Ununoctium. Sie zeichnen sich alle durch abgeschlossene Unterschalen aus, d.h. alle möglichen Zustände in der jeweiligen Unterschale sind mit Elektronen voll besetzt. Zum Beispiel haben in der s -Unterschale zwei, in der p -Unterschale sechs, in der d -Unterschale zehn und in der f -Unterschale vierzehn Elektronen Platz. Die Elektronen in einer solchen abgeschlossenen Unterschale sind stark an den Atomkern gebunden, da die Kernladung nur schwach von den Elektronen in niedrigeren Schalen abgeschirmt wird. Aus diesem Grund sind Edelgase im Vergleich zu anderen Atomen chemisch inaktiv. Eine weitere Eigenschaft von abgeschlossenen Unterschalen ist, dass ihr Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} , ihr Gesamtspin \vec{S} und ihr Gesamtdrehimpuls \vec{J} verschwinden (siehe Abschnitt 16.4.2).

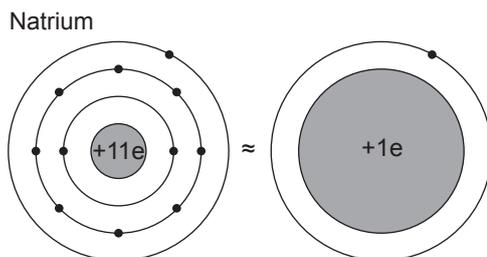


Abb. 16.2: Illustration der Ähnlichkeit der Alkali-Atome zum Wasserstoffatom am Beispiel von Natrium ($Z = 11$).

16.4.2 Gesamtbahndrehimpuls, Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls für Mehrelektronenatome

Bei der Bestimmung des Gesamtbahndrehimpulses, des Gesamtspins und des Gesamtdrehimpulses für ein Mehrelektronenatom unterscheiden wir die beiden Fälle *Russell-Saunders-Kopplung* und *jj-Kopplung*. Im ersten Fall ist die Coulomb-Wechselwirkung viel grösser als die Spin-Bahn-Kopplung und im zweiten Fall ist die Coulomb-Wechselwirkung viel kleiner als die Summe aller Spin-Bahn-Kopplungen der einzelnen Elektronen. Wir gehen nun genauer auf die beiden Fälle ein:

a) *Russell-Saunders-Kopplung*

Bei Mehrelektronenatomen mit nicht zu hoher Kernladungszahl Z , d.h. bei leichten Atomen, ist die Coulomb-Wechselwirkung viel grösser als die Spin-Bahn-Kopplung. In diesem Fall koppeln die Bahndrehimpulse \vec{L}_i der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} im folgenden Sinn

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{L}_i, \quad (16.20)$$

wobei N die Anzahl der Elektronen bezeichnet. Analog koppeln die Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtspin \vec{S} , d.h. es gilt

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i. \quad (16.21)$$

Wie beim Wasserstoffatom wechselwirken aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung der resultierende Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} mit dem Gesamtspin \vec{S} und bestimmen so den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Der Betrag der Drehimpulse \vec{L} , \vec{S} und \vec{J} ist dabei auf die gleiche Art und Weise wie beim Wasserstoffatom quantisiert. Sie sind bestimmt durch die Quantenzahlen L , S und J ³ auf folgende Art

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar, \quad (16.22)$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar, \quad (16.23)$$

$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar, \quad (16.24)$$

wobei die Quantenzahlen L , S und J die folgenden Werte annehmen können

$$L = \left| \sum_{i=1}^N a_i l_i \right|, \left| \sum_{i=1}^N a_i l_i \right| + 1, \dots, \sum_{i=1}^N l_i - 1, \sum_{i=1}^N l_i, \quad (16.25)$$

$$S = \left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right|, \left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right| + 1, \dots, \sum_{i=1}^N s_i - 1, \sum_{i=1}^N s_i, \quad (16.26)$$

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S, \quad (16.27)$$

³Für die Quantenzahlen von Mehrelektronenatomen verwendet man Grossbuchstaben.

wobei l_i und s_i die Bahndrehimpulsquantenzahlen bzw. Spinquantenzahlen der einzelnen Elektronen bezeichnen und die $a_i \in \{-1, 1\}$ so gewählt sind, dass $\left| \sum_{i=1}^N a_i l_i \right|$ bzw. $\left| \sum_{i=1}^N a_i s_i \right|$ minimal werden. Zum Beispiel bedeutet dies im Fall $N = 2$

$$L = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2, \quad (16.28)$$

$$S = |s_1 - s_2|, |s_1 - s_2| + 1, \dots, s_1 + s_2 - 1, s_1 + s_2, \quad (16.29)$$

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S. \quad (16.30)$$

b) *jj-Kopplung*

Bei Mehrelektronenatomen mit hoher Kernladungszahl Z , d.h. bei schweren Atomen, ist die Coulomb-Wechselwirkung viel kleiner als die Spin-Bahn-Kopplung der einzelnen Elektronen. Es ist dann nicht mehr möglich einen Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} und einen Gesamtspin \vec{S} zu definieren, sondern die Bahndrehimpulse \vec{L}_i und Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen koppeln einzeln zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J}_i der einzelnen Elektronen und diese wiederum zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J} gemäss

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{J}_i. \quad (16.31)$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass in der Realität bei den meisten Atomen eine Mischform zwischen Russell-Saunders- und *jj*-Kopplung vorliegt. Zur Veranschaulichung besprechen wir nun die Russell-Saunders-Kopplung für ein Atom mit zwei Elektronen.

Beispiel: Atom mit zwei Elektronen

Wir betrachten ein Atom mit zwei Elektronen, welche durch die Bahndrehimpulsquantenzahlen $l_1 = 1$ und $l_2 = 2$, sowie die Spinquantenzahlen $s_1 = s_2 = 1/2$ beschrieben werden. Die Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L kann in diesem Fall die folgenden drei Werte annehmen

$$L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2 = 1, 2, 3 \quad (16.32)$$

und die Gesamtspinquantenzahl S die beiden Werte

$$S = |s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2 = 0, 1. \quad (16.33)$$

Damit ergeben sich für die Gesamtdrehimpulsquantenzahl J fünf Möglichkeiten

$$J = |L - S|, \dots, L + S = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (16.34)$$

Spektroskopische Notation

Für die Zustände von Mehrelektronenatomen verwendet man im Vergleich zum Wasserstoffatom eine geringfügig angepasste Notation. In Anlehnung an (14.41) gilt für Mehrelektronenatome:

Ein Zustand eines Mehrelektronenatoms mit Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L , Gesamtspinquantenzahl S und Gesamtdrehimpulsquantenzahl J erhält folgende Bezeichnung

$${}^{2S+1}L_J, \quad (16.35)$$

wobei für L jeweils der entsprechende Grossbuchstabe S ($L = 0$), P ($L = 1$), D ($L = 2$), ... einzusetzen ist. Bei Atomen mit einem einzigen Elektron in der äussersten Unterschale wird die Hauptquantenzahl n dieses Elektrons der Bezeichnung vorangestellt.

Es sei bemerkt, dass im Fall $L > S$ der vor dem Buchstaben hochgestellte Index $(2S + 1)$ gerade die Multiplizität des Zustands angibt, d.h. die Zahl der Möglichkeiten den Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} und den Gesamtspin \vec{S} zum Gesamtdrehimpuls \vec{J} zu kombinieren. Dabei werden die zu den drei Werten $S = 0, 1/2, 1$ der Gesamtspinquantenzahl zugehörigen Zustände mit Namen versehen:

- Für $S = 0$ ist die Multiplizität $2S + 1 = 1$ und es existiert folglich nur ein Zustand mit $J = L$ den man *Singulett-Zustand* nennt.
- Für $S = 1/2$ existieren $2S + 1 = 2$ mögliche Zustände mit $J = L - 1/2$ und $J = L + 1/2$. Diese bilden zusammen ein *Dublett*.
- Für $S = 1$ gibt es $2S + 1 = 3$ mögliche Zustände mit $J = L - 1$, $J = L$ und $J = L + 1$. Diese bilden zusammen ein *Triplet*.

Im Fall $S < L$ ist die Multiplizität gegeben durch $2L + 1$.

Zum Abschluss dieses Abschnitts geben wir als Beispiel die Notation für das Natriumatom an. Nach Tab. 16.1 hat Natrium elf Elektronen mit einer Elektronenkonfiguration $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1$. Die drei Unterschalen $1s$, $2s$ und $2p$ sind abgeschlossen und haben daher verschwindende Quantenzahlen L , S und J . Daher genügt es das äusserste Elektron, welches sich im Zustand $n = 3$, $l = 0$ und $s = 1/2$ befindet, zu betrachten. Demzufolge gilt für das Natriumatom $L = 0$, $S = 1/2$ und $J = 1/2$ und damit die Bezeichnung $3^2S_{1/2}$, wobei wir die Hauptquantenzahl $n = 3$ des Zustands des äussersten Elektrons der Bezeichnung vorangestellt haben.

16.4.3 Hundsche Regeln

Wir haben bisher die Elektronenkonfigurationen der einzelnen Atome kennengelernt, welche die Atome in ihrem Grundzustand einnehmen (siehe Abschnitt 16.4.1). Jedoch wissen wir noch nicht welchen Zustand ${}^{2S+1}L_J$ das Atom genau einnimmt. Insbesondere die Besetzung von nicht abgeschlossenen Schalen ist noch zu klären.

Eine Antwort liefern die *Hundschen Regeln*, die nach dem Physiker Friedrich Hund benannt sind und auf empirischen Resultaten beruhen. Sie geben an, welche Werte die Quantenzahlen L , S und J für ein Atom im Grundzustand annehmen. Sie lauten folgendermassen:

Hundsche Regeln

Im Grundzustand besetzen die Elektronen eines Atoms unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips die Zustände nach den folgenden Regeln:

1. Die Gesamtspinquantenzahl S nimmt den maximal möglichen Wert an.
2. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S , liegt derjenige mit maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L energetisch am tiefsten.
3. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S und maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L bildet bei weniger als halbgefüllten Schalen der Zustand mit $J = |L - S|$ (minimales J) den Grundzustand, sonst der Zustand mit $J = L + S$ (maximales J).

Es sei bemerkt, dass manchmal auch die in Abschnitt 16.4.1 im Rahmen der Behandlung der Edelgase angesprochene Regel, dass für abgeschlossene Unterschalen $L = S = J = 0$ ist, als weitere Hundsche Regel aufgeführt wird.

Wir geben hier eine kurze Motivation der beiden ersten Regeln an und verweisen für genauere Ausführungen auf weiterführende Literatur (z.B. [11]). Dazu benützen wir die am Anfang des Abschnitts 16.4 aufgeführte Regel, dass ein Atom dann einen stabilen Zustand einnimmt, wenn seine Gesamtenergie minimal ist:

1. Aus der *ersten Hundschen Regel* folgt, dass die Zustände einer Unterschale (feste Quantenzahlen n und l) zunächst mit ungepaarten Elektronen derselben Spinquantenzahl m_s , d.h. mit paralleler Spinausrichtung, besetzt werden (maximiert Gesamtspinquantenzahl S). Solche Elektronen mit derselben Spinquantenzahl m_s haben aufgrund des Pauli-Prinzips unterschiedliche Quantenzahlen m_l und daher einen maximalen räumlichen Abstand. Dies hat eine minimale Coulomb-Wechselwirkung (Abstoßung) zwischen den Elektronen zur Folge. Daher liegt der Zustand mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S energetisch am tiefsten und wird von den Elektronen des Atoms im Grundzustand eingenommen.
2. Aus der *zweiten Hundschen Regel* folgt unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips für die Besetzung der Zustände einer Unterschale (feste Quantenzahlen n und l), dass neben der Bevorzugung paralleler Spins, zuerst der Zustand mit maximalem m_l besetzt wird, anschliessend der Zustand mit $m_l - 1$, usw. (maximiert Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L). Aufgrund dieser Besetzung sind die Elektronen so weit wie möglich vom Zentrum und dadurch auch voneinander entfernt. Dies hat wiederum eine minimale Coulomb-Wechselwirkung (Abstoßung) zwischen den Elektronen zur Folge. Der Effekt ist jedoch geringer als bei den Spins. Daher liegt unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S der Zustand mit maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L energetisch am tiefsten und wird von den Elektronen des Atoms im Grundzustand eingenommen.

In Tab. 16.2 sind anhand der genauen Elektronenbesetzung für die Atome Bor bis Neon diese beiden Punkte illustriert⁴.

Name	Elektronenkonfiguration	Besetzung der p -Unterschale		
		$m_l = 1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$
Bor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^1$	↑		
Kohlenstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$	↑	↑	
Stickstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$	↑	↑	↑
Sauerstoff	$(1s)^2(2s)^2(2p)^4$	↑↓	↑	↑
Fluor	$(1s)^2(2s)^2(2p)^5$	↑↓	↑↓	↑
Neon	$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$	↑↓	↑↓	↑↓

Tab. 16.2: Die Besetzung der p -Unterschale am Beispiel der Atome Bor bis Neon nach den Hundschen Regeln 1 und 2. ↑ steht dabei für ein Elektron im „spin-up“-Zustand ($m_s = 1/2$) und ↓ für ein Elektron im „spin-down“-Zustand ($m_s = -1/2$).

Beispiele

Wir illustrieren die Hundschen Regeln an den Atomen Wasserstoff bis Neon (siehe Tab. 16.3), wobei wir die Elemente Wasserstoff, Helium, Bor, Kohlenstoff und Stickstoff genauer besprechen:

1. Das Wasserstoffatom

Beim Wasserstoffatom ist die Situation am einfachsten. Wir haben ein Elektron in der $1s$ -Unterschale, das entweder den „spin up“- ($m_s = 1/2$) oder den „spin-down“- ($m_s = -1/2$) Zustand einnehmen kann. Damit resultieren die Quantenzahlen $S = 1/2$, $L = 0$ und $J = L + S = 1/2$ und der Grundzustand $1^2S_{1/2}$.

2. Das Heliumatom

Die beiden Elektronen besetzen im Grundzustand die beiden möglichen Zustände in der $1s$ -Unterschale. Für abgeschlossene Unterschalen verschwinden die drei Quantenzahl S , L und J und wird erhalten den Grundzustand 1^1S_0 .

3. Das Boratom

Für die abgeschlossenen Unterschalen $1s$ und $2s$ gilt $S = L = J = 0$ und es genügt das einzelne Elektron in der $2p$ -Unterschale zu betrachten. Nach den ersten beiden Hundschen Regeln nimmt es den Zustand $n = 2$, $l = 1$, $m_l = 1$ und $m_s = \pm 1/2$ ein. Demzufolge gilt $S = 1/2$ und $L = 1$ und da die $2p$ -Unterschale weniger als halb gefüllt ist, ergibt sich nach der dritten Hundschen Regel $J = |L - S| = 1/2$. Somit lautet der Grundzustand für das Boratom $2^2P_{1/2}$.

⁴Es sei bemerkt, dass die p -Unterschale umgekehrt auch zuerst mit drei Elektronen mit „spin-down“ und erst anschliessend mit drei Elektronen mit „spin-up“ gefüllt werden kann oder in anderen Worten „spin-up“- und „spin-down“-Zustand sind äquivalent.

Name	S	L	J	$(n) {}^{2S+1}L_J$
Wasserstoff	1/2	0	1/2	$1^2S_{1/2}$
Helium	0	0	0	1^1S_0
Lithium	1/2	0	1/2	$2^2S_{1/2}$
Beryllium	0	0	0	1^1S_0
Bor	1/2	1	1/2	$2^2P_{1/2}$
Kohlenstoff	1	1	0	3^1P_0
Stickstoff	3/2	0	3/2	$4^3S_{3/2}$
Sauerstoff	1	1	2	3^1P_2
Fluor	1/2	1	3/2	$2^2P_{3/2}$
Neon	0	0	0	1^1S_0

Tab. 16.3: Die drei Quantenzahlen S , L und J und die spektroskopische Notation $(n) {}^{2S+1}L_J$ des Grundzustands für die Atome Wasserstoff bis Neon nach den Hund'schen Regeln.

4. Das Kohlenstoffatom

Wie beim Boratom haben wir nur die beiden Elektronen in der $2p$ -Unterschale zu betrachten ($n_1 = n_2 = 2$ und $l_1 = l_2 = 1$). Nach der ersten Hund'schen Regel haben sie parallelen Spin (beide $m_s = 1/2$ oder beide $m_s = -1/2$) und damit gilt $S = 1$. Die zweite Hund'sche Regel legt nun die letzte Quantenzahl m_l fest. Unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips nimmt L für $m_{l1} = 1$ und $m_{l2} = 0$ den maximalen Wert 1 an. Für die letzte Quantenzahl erhalten wir nach der dritten Hund'schen Regel $J = |L - S| = 0$ und somit für das Kohlenstoffatom den Grundzustand 3^1P_0 .

5. Das Stickstoffatom

Wiederum können wir uns auf die drei Elektronen in der $2p$ -Unterschale konzentrieren ($n_1 = n_2 = n_3$ und $l_1 = l_2 = l_3 = 1$). Die erste Hund'sche Regel verlangt wiederum parallele Spins, womit $S = 3/2$ ist. Nach dem Pauli-Prinzip müssen sie die Zustände zu $m_l = -1, 0$ und 1 besetzen. Wodurch nur die Möglichkeit $L = 0$ bleibt. Die Unterschale ist halb gefüllt und daher folgt nach der dritten Hund'schen Regel $J = L + S = 3/2$. Stickstoff besitzt also den Grundzustand $4^3S_{3/2}$.

16.5 Zusammenfassung

- Eine exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung, ist zwar für das Heliumatom (zwei Elektronen) unter gewissen Annahmen möglich, jedoch für Atome mit mehr als zwei Elektronen aussichtslos. Es existieren aber diverse Näherungslösungen bzw. daraus abgeleitete angenäherte Modelle für Mehrelektronenatome.
- Die Wellenfunktion von Mehrelektronenatomen ist durch das **vierte Postulat** der Quantenmechanik beschrieben: Die Wellenfunktion $\psi(1, 2, 3, \dots, n)$

eines Systems aus n nicht-unterscheidbaren, nicht-wechselwirkenden Teilchen wird durch ein (Tensor-) Produkt der Wellenfunktionen $\psi(i)$ der einzelnen Teilchen beschrieben

$$\psi(1, 2, \dots, n) = \psi(1)\psi(2)\psi(3) \cdot \dots \cdot \psi(n). \quad (16.36)$$

- Im Weiteren erfüllt die Wellenfunktion von Mehrelektronenatomen die sogenannte Austauschsymmetrie: Die Wellenfunktion $\psi(1, 2, \dots, n)$ eines Systems aus n (wechselwirkenden) Teilchen (Elektronen) erfüllt die Austauschsymmetrie, wenn beim beliebigen Tausch zweier Teilchen (Elektronen) die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(1, 2, \dots, n)|^2$ unverändert bleibt. Diese Forderung der Austauschsymmetrie kann durch die Konstruktion von symmetrischen (bleiben unverändert bei der Vertauschung zweier Teilchen) und antisymmetrischen (ändern das Vorzeichen bei der Vertauschung zweier Teilchen) Wellenfunktionen erfüllt werden.
- Elektronen erfüllen das nach Wolfgang Pauli benannte Pauli-Prinzip: Ein System von Elektronen wird durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben bzw. in einer alternativen Formulierung: Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.
- Im Allgemeinen lassen sich Teilchen in zwei Sorten unterteilen: Fermionen sind Teilchen mit halbzahligen Spin, werden durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben und erfüllen das Pauli-Prinzip. Bosonen sind Teilchen mit ganzzahligen Spin, werden durch eine symmetrische Wellenfunktion beschrieben und unterliegen nicht dem Pauli-Prinzip.
- Eines der einfachsten Modelle zur Beschreibung des Aufbaus von Mehrelektronenatomen ist das Schalenmodell. Die Zustände der Elektronen werden dabei ausgehend vom Wasserstoffatommodell durch die vier Quantenzahlen n , l , m_l und m_s beschrieben. Alle Zustände, die zu einer festen Hauptquantenzahl n gehören, bilden dabei eine Schale, alle Zustände, die zu einer festen Bahndrehimpulsquantenzahl l gehören, bilden eine Unterschale und die Besetzung der Elektronenzustände und damit der Schalen und Unterschalen von Atomen durch Elektronen erfolgt nach zwei Prinzipien:
 1. Pauli-Prinzip: Die Elektronenzustände eines Atoms können mit Elektronen nur so besetzt werden, dass nie zwei oder mehr Elektronen in allen Quantenzahlen übereinstimmen.
 2. Ein Atom nimmt einen stabilen Zustand ein, wenn seine Gesamtenergie minimal ist.
- Mit Hilfe des Schalenmodells ist es möglich die Elektronenkonfigurationen der Atome zu bestimmen und damit den Aufbau des Periodensystems der Elemente zu erklären.

- Bei der Bestimmung des Gesamtbahndrehimpulses, des Gesamtspins und des Gesamtdrehimpulses für ein Mehrelektronenatom werden die beiden Fälle Russell-Saunders-Kopplung und jj -Kopplung unterschieden.

Bei der Russell-Saunders-Kopplung (leichte Atome) ist die Coulomb-Wechselwirkung viel grösser als die Spin-Bahn-Kopplung und die Bahndrehimpulse \vec{L}_i der einzelnen Elektronen koppeln zu einem Gesamtbahndrehimpuls $\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{L}_i$, wobei N die Anzahl der Elektronen bezeichnet. Analog koppeln die Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen zu einem Gesamtspin $\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i$. Der resultierende Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} wechselwirkt dann mit dem Gesamtspin \vec{S} und bestimmt so den Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Der Betrag der Drehimpulse \vec{L} , \vec{S} und \vec{J} ist dabei auf die gleiche Art und Weise wie beim Wasserstoffatom quantisiert. Sie sind bestimmt durch die Quantenzahlen L , S und J gemäss $|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$, $|\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$ und $|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$.

Bei der jj -Kopplung (schwere Atome) ist die Coulomb-Wechselwirkung viel kleiner als die Spin-Bahn-Kopplung der einzelnen Elektronen. Es ist dann nicht mehr möglich einen Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} und einen Gesamtspin \vec{S} zu definieren, sondern die Bahndrehimpulse \vec{L}_i und Spins \vec{S}_i der einzelnen Elektronen koppeln einzeln zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J}_i der einzelnen Elektronen und diese wiederum zu einem Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{J}_i$. In der Realität liegt bei den meisten Atomen eine Mischform zwischen Russell-Saunders- und jj -Kopplung vor.

- In der Literatur wird für einen Zustand eines Mehrelektronenatoms mit Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L , Gesamtspinquantenzahl S und Gesamtdrehimpulsquantenzahl J die Bezeichnung $^{2S+1}L_J$ verwendet, wobei für L jeweils der entsprechende Grossbuchstabe einzusetzen ist. Bei Atomen mit einem einzigen Elektron in der äussersten Unterschale wird die Hauptquantenzahl n dieses Elektrons der Bezeichnung vorangestellt.
- Die Werte für die Quantenzahlen L , S und J für ein Atom im Grundzustand sind durch die nach Friedrich Hund benannten Hundschen Regeln bestimmt:
 1. Die Gesamtspinquantenzahl S nimmt den maximal möglichen Wert an.
 2. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S , liegt derjenige mit maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L energetisch am tiefsten.
 3. Unter den Zuständen mit maximaler Gesamtspinquantenzahl S und maximaler Gesamtbahndrehimpulsquantenzahl L bildet bei weniger als halbgefüllten Schalen der Zustand mit $J = |L - S|$ (minimales J) den Grundzustand, sonst der Zustand mit $J = L + S$ (maximales J).

Zum Teil wird auch die Regel, dass für abgeschlossene Unterschalen $L = S = J = 0$ ist, als weitere Hundsche Regel aufgeführt.

Anhang A

Gauss-Verteilung

Wir führen an dieser Stelle die Berechnungen des Beispiels aus Abschnitt 9.2.2 durch. Dabei wird ein Teilchen betrachtet, dessen Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x, t)|^2$ durch die Gauss-Verteilung (siehe Gl. (9.27)) gegeben ist. Allen folgenden Berechnungen liegt die Berechnung des sogenannten *Gauss-Integrals* zugrunde, welches gegeben ist durch

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{k}}, \quad (\text{A.1})$$

wobei $k \in \mathbb{R}$ eine Konstante ist.

Beweis:

Als erstes zeigen wir, dass das Gauss-Integral durch ein Integral über den gesamten zweidimensionalen Raum geschrieben werden kann. Es gilt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k(x^2+y^2)} dx dy &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ky^2} dy \right) \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx \right) \\ &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx \right)^2. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Demzufolge gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k(x^2+y^2)} dx dy}. \quad (\text{A.3})$$

Dieses Integral lässt sich nun einfach berechnen, indem wir von den kartesischen zu Polarkoordinaten wechseln. Mit den Transformationsregeln $x = r \cos \varphi$ und

$y = r \sin \varphi$ und dem Flächenelement $dA = dx dy = r dr d\varphi$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k(x^2+y^2)} dx dy} \\
 &= \sqrt{\int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-kr^2} r dr d\varphi} \\
 &= \sqrt{2\pi \int_0^{\infty} e^{-kr^2} r dr} \\
 &\stackrel{(s=kr^2)}{=} \sqrt{\frac{\pi}{k} \int_0^{\infty} e^{-s} ds} \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{k}}. \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

□

Mit (A.1) können wir nun die Berechnungen aus Abschnitt 9.2.2 ausführen. Wir beginnen mit der Normierungsbedingung (9.28)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/(2a^2)} dx \stackrel{(A.1)}{=} 1. \tag{A.5}$$

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ (9.29) ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t)^* x \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 x dx \\
 &= \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/(2a^2)} x dx = -\frac{a}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/(2a^2)} \Big|_{-\infty}^{\infty} \\
 &= 0. \tag{A.6}
 \end{aligned}$$

Für die Unschärfe Δx (9.30) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t)^* x^2 \psi(x, t) dx} \\
 &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 x^2 dx} \\
 &= \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x (x e^{-x^2/(2a^2)}) dx} \\
 &\stackrel{\text{PI}}{=} \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \left(\underbrace{-xa^2 e^{-x^2/(2a^2)} \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + \int_{-\infty}^{\infty} a^2 e^{-x^2/(2a^2)} dx \right) \\
 &\stackrel{(A.1)}{=} a. \tag{A.7}
 \end{aligned}$$

Als nächstes führen wir das Integral zur Bestimmung der Impulswellenfunktion $\phi(p, t)$ (9.32) aus

$$\begin{aligned}
\phi(p, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/(4a^2)} e^{-ipx/\hbar} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4a^2} - \frac{ipx}{\hbar}} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4a^2} \left(x^2 + \frac{4ipxa^2}{\hbar} \right)} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4a^2} \left(x + \frac{2ipa^2}{\hbar} \right)^2 - \frac{p^2 a^2}{\hbar^2}} dx \\
&\stackrel{\left(y = x + \frac{2ipa^2}{\hbar} \right)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} e^{-p^2 a^2 / \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2 / (4a^2)} dy \\
&\stackrel{(A.1)}{=} \left(\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{-a^2 p^2 / \hbar^2}. \tag{A.8}
\end{aligned}$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\phi(p, t)|^2$ im Impulsraum ergibt sich in Übereinstimmung mit (9.33)

$$|\phi(p, t)|^2 = \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} e^{-2a^2 p^2 / \hbar^2}. \tag{A.9}$$

Damit sind wir in der Lage die beiden restlichen Berechnungen durchzuführen, d.h. die Berechnung des Erwartungswerts $\langle p \rangle$ (9.34) und der Unschärfe Δp (9.35). Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p, t)^* p \phi(p, t) dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p, t)|^2 p dp \\
&= \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2a^2 p^2 / \hbar^2} p dp \\
&= -\frac{\hbar}{a\sqrt{8\pi}} e^{-2a^2 p^2 / \hbar^2} \Big|_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0. \tag{A.10}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \phi(p, t)^* p^2 \phi(p, t) dp} \\
&= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p, t)|^2 p^2 dp} \\
&= \sqrt{\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p (p e^{-2a^2 p^2/\hbar^2}) dp} \\
&\stackrel{\text{PI}}{=} \sqrt{\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \left(\underbrace{-p \frac{\hbar^2}{4a^2} e^{-2a^2 p^2/\hbar^2}}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{4a^2} e^{-2a^2 p^2/\hbar^2} dp \right)} \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{a\sqrt{8\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2a^2 p^2/\hbar^2} dp} \\
&\stackrel{\text{(A.1)}}{=} \frac{\hbar}{2a}. \tag{A.11}
\end{aligned}$$

Anhang B

Heisenbergsche Unschärferelation

Die allgemeine Heisenbergsche Unschärferelation für zwei beliebige hermitesche Operatoren \hat{A} und \hat{B} und einen beliebigen Zustand $\psi(x, t)$ ist gegeben durch

$$(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi| \quad (\text{B.1})$$

Wir leiten nun diese allgemeine Formulierung der Heisenbergschen Unschärferelation ausgehend von der sogenannten *Schwarzschen Ungleichung* her und zeigen anschliessend, dass die Unschärferelation (9.37) für Ort und Impuls als Spezialfall aus (B.1) folgt.

B.1 Schwarzsche Ungleichung

Für zwei beliebige Wellenfunktionen $\varphi(x, t)$ und $\psi(x, t)$ gilt

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t) \psi(x, t) dx \right|^2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (\text{B.2})$$

Beweis:

- i) Für $\varphi(x, t) = 0$ ist die Ungleichung (B.2) erfüllt.
- ii) Für $\varphi(x, t) \neq 0$ wählen wir den Ansatz

$$\psi(x, t) = w\varphi(x, t) + \xi(x, t) \text{ mit } w \in \mathbb{C}, \quad (\text{B.3})$$

wobei $\xi(x, t)$ folgende Eigenschaft besitzt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t) \xi(x, t) dx = 0. \quad (\text{B.4})$$

Damit ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t)\psi(x, t)dx = w \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t)\xi(x, t)dx}_{=0}. \quad (\text{B.5})$$

Daraus folgt für die Konstante w der folgende Ausdruck

$$w = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t)\psi(x, t)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx}. \quad (\text{B.6})$$

Mit (B.3), (B.4) und (B.6) erhalten wir schlussendlich

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx &\stackrel{(\text{B.3})}{=} \int_{-\infty}^{\infty} (z\varphi(x, t) + \xi(x, t))^*(z\varphi(x, t) + \xi(x, t))dx \\ &\stackrel{(\text{B.4})}{=} z^*z \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx + \int_{-\infty}^{\infty} |\xi(x, t)|^2 dx \\ &\geq z^*z \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx \\ &\stackrel{(\text{B.6})}{=} \frac{\left| \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x, t)\psi(x, t)dx \right|^2}{\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x, t)|^2 dx}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

□

B.2 Herleitung der Heisenbergschen Unschärferelation

Wir zeigen nun unter Benützung der Schwarzschen Ungleichung (B.2) die Richtigkeit von (B.1).

Es seien \hat{A} und \hat{B} zwei beliebige hermitesche Operatoren und $\psi(x, t)$ ein beliebiger Zustand. Nach Definition 9.4 ist das Unschärfeprodukt $(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi$ gegeben durch

$$\begin{aligned} (\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)(\hat{A} - \langle A \rangle_\psi)^2 \psi(x, t) dx \right)^{1/2} \\ &\quad \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)(\hat{B} - \langle B \rangle_\psi)^2 \psi(x, t) dx \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Wir führen die beiden hermiteschen Operatoren

$$\hat{X}_1 = \hat{A} - \langle A \rangle_\psi, \quad (\text{B.9})$$

$$\hat{X}_2 = \hat{B} - \langle B \rangle_\psi \quad (\text{B.10})$$

ein, womit das Unschärfeprodukt $(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi$ geschrieben werden kann als

$$(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_1^2 \psi(x, t) dx \right)^{1/2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_2^2 \psi(x, t) dx \right)^{1/2}. \quad (\text{B.11})$$

Gleichzeitig gilt aufgrund der Schwarzschen Ungleichung (B.2)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\hat{X}_1 \psi(x, t)|^2 dx \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{X}_2 \psi(x, t)|^2 dx \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{X}_1 \psi(x, t))^* \hat{X}_2 \psi(x, t) dx \right|^2. \quad (\text{B.12})$$

Diese Ungleichung können wir auch schreiben in der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{X}_1^* \psi^*(x, t) \hat{X}_1 \psi(x, t) dx \int_{-\infty}^{\infty} \hat{X}_2^* \psi^*(x, t) \hat{X}_2 \psi(x, t) dx \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} \hat{X}_1^* \psi^*(x, t) \hat{X}_2 \psi(x, t) dx \right|^2. \quad (\text{B.13})$$

Unter Ausnützung der Hermitezität der Operatoren \hat{X}_1 und \hat{X}_2 ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_1^2 \psi(x, t) dx \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_2^2 \psi(x, t) dx \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_1 \hat{X}_2 \psi(x, t) dx \right|^2. \quad (\text{B.14})$$

Der Vergleich mit (B.11) zeigt, dass die linke Seite dieser Ungleichung dem Quadrat des Unschärfeprodukts $(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi$ entspricht. Daher ergibt sich

$$(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi \geq \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_1 \hat{X}_2 \psi(x, t) dx \right|. \quad (\text{B.15})$$

Wir führen nun den *Antikommutator* $\{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} = \hat{X}_1 \hat{X}_2 + \hat{X}_2 \hat{X}_1$ ein und schreiben damit das Produkt $\hat{X}_1 \hat{X}_2$ in der Form

$$\hat{X}_1 \hat{X}_2 = \frac{1}{2} \{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} + \frac{1}{2} [\hat{X}_1, \hat{X}_2]. \quad (\text{B.16})$$

Einsetzen in die rechte Seite der Ungleichung (B.15) ergibt

$$\begin{aligned} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{X}_1 \hat{X}_2 \psi(x, t) dx \right| &= \frac{1}{2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} \psi(x, t) dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) [\hat{X}_1, \hat{X}_2] \psi(x, t) dx \right| \\ &= \frac{1}{2} |\langle \{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} \rangle_\psi + \langle [\hat{X}_1, \hat{X}_2] \rangle_\psi| \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Einsetzen in (B.15) liefert

$$(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} \rangle_\psi + \langle [\hat{X}_1, \hat{X}_2] \rangle_\psi|. \quad (\text{B.18})$$

Der Erwartungswert des Antikommutators ist reell und derjenige des Kommutators rein imaginär. Aus diesem Grund können wir schreiben

$$\begin{aligned} (\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi &\geq \frac{1}{2} \left(|\langle \{\hat{X}_1, \hat{X}_2\} \rangle_\psi|^2 + |\langle [\hat{X}_1, \hat{X}_2] \rangle_\psi|^2 \right)^{1/2} \\ &\geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{X}_1, \hat{X}_2] \rangle_\psi|. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Wir setzen nun als nächstes die Definitionen (B.9) und (B.10) in den Kommutator $[\hat{X}_1, \hat{X}_2]$ ein und erhalten

$$[\hat{X}_1, \hat{X}_2] = [\hat{A} - \langle A \rangle_\psi, \hat{B} - \langle B \rangle_\psi] = [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (\text{B.20})$$

Einsetzen in (B.19) ergibt nun in Übereinstimmung mit (B.1) das folgende Resultat

$$(\Delta A)_\psi(\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi|. \quad (\text{B.21})$$

B.3 Beispiel

Wie zu Beginn erwähnt, zeigen wir zum Abschluss, dass die Formulierung (9.37) als Spezialfall aus (B.1) folgt. Es sei also $\hat{A} = \hat{x}$ und $\hat{B} = \hat{p}_x$. Einsetzen in (B.1) ergibt mit (9.85)

$$\begin{aligned} (\Delta x)_\psi(\Delta p_x)_\psi &\geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}_x] \rangle_\psi| \\ &= \frac{1}{2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) [\hat{x}, \hat{p}_x] \psi(x, t) dx \right| \\ &\stackrel{(9.85)}{=} \frac{1}{2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) i\hbar \psi(x, t) dx \right| \\ &= \frac{\hbar}{2} \underbrace{\left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx \right|}_{=1} \\ &= \frac{\hbar}{2}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

D.h. es folgt in Übereinstimmung mit (9.37)

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (\text{B.23})$$

Anhang C

Beweis Gram-Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren

Wir zeigen hier die Richtigkeit des Gram-Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens aus Abschnitt 9.5.6, welches ermöglicht aus ursprünglich n nicht orthogonalen (normierten) Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, n orthogonale (normierte) Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, zu gewinnen. Zu zeigen ist, dass die n durch (9.270) definierten neuen (normierten) Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, paarweise orthogonal zueinander sind, d.h. wir müssen zeigen, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i^*(x, t) \Psi_j(x, t) dx = 0 \text{ für } i \neq j \text{ und } i, j \in \{1, 2, \dots, n\}. \quad (\text{C.1})$$

Der Beweis erfolgt nach dem Induktionsverfahren:

- i) *Verankerung*: Für $n = 1$ ist die Richtigkeit der Aussage klar.
- ii) *Schritt $n - 1 \mapsto n$* : Wir nehmen also an, dass die (normierten) Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n - 1$ paarweise orthogonal zueinander sind und zeigen, dass dann auch $\Psi_n(x, t)$ orthogonal zu allen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n - 1$ ist, d.h. dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx = 0, \quad (\text{C.2})$$

wobei $k \in \{1, 2, \dots, n - 1\}$ beliebig. Wir führen diese Rechnung nun aus.

Mit (9.270) ergibt sich

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \left(\psi_n(x, t) - \sum_{i=1}^{n-1} \Psi_i(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i^*(x, t) \psi_n(x, t) dy \right) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \psi_n(x, t) dx \\
&\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \sum_{i=1}^{n-1} \Psi_i(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i^*(x, t) \psi_n(x, t) dy dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \psi_n(x, t) dx \tag{C.3} \\
&\quad - \sum_{i=1}^{n-1} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_i(x, t) dx \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_i^*(x, t) \psi_n(x, t) dy.
\end{aligned}$$

Nach Voraussetzung sind die (normierten) Eigenfunktionen $\Psi_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, n-1$ paarweise orthogonal zueinander und demzufolge ist

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_i(x, t) dx = \begin{cases} 0, & k \neq i, \\ 1, & k = i. \end{cases} \tag{C.4}$$

Damit folgt aus (C.3)

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \psi_n(x, t) dx \\
&\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^*(x, t) \psi_n(x, t) dy = 0. \tag{C.5}
\end{aligned}$$

□

Anhang D

Entwicklung einer Dreiecksfunktion

Wir betrachten ein Teilchen im Potentialtopf, welches sich zur Zeit $t = 0$ in einem Zustand $\psi(x, 0)$ befindet, welcher durch eine (normierte) Dreiecksfunktion beschrieben werden kann (siehe Abb. D.1)

$$\psi(x, 0) = \frac{\sqrt{12}}{L^3} \begin{cases} x, & 0 < x < L/2, \\ (-x + L), & L/2 < x < L, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

Das Ziel ist es nun diesen Zustand entsprechend dem Satz 9.5 nach den Eigenfunktionen des Hamilton-Operators des Teilchens im Potentialtopf zu entwickeln. Diese sind nach (9.128) gegeben durch

$$\psi_n(x, t) = u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (\text{D.2})$$

wobei

$$u_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

Nach Satz 9.5 gilt

$$\psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x, 0) \quad \text{mit} \quad c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x, 0) \psi(x, 0) dx. \quad (\text{D.4})$$

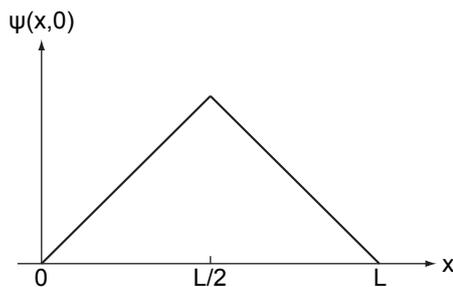


Abb. D.1: Der Zustand eines Teilchens im Potentialtopf wird zur $t = 0$ durch eine Dreiecksfunktion beschrieben.

Wir berechnen nun für unser Beispiel die Entwicklungskoeffizienten c_n . Es ergibt sich mit (D.1) und (D.3)

$$\begin{aligned}
c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x, 0) \psi(x, 0) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) \psi(x, 0) dx \\
&= \int_0^{L/2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \frac{\sqrt{12}}{L^3} x dx + \int_{L/2}^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \frac{\sqrt{12}}{L^3} (-x + L) dx \\
&= \frac{\sqrt{24}}{L} \left(\int_0^{L/2} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) x dx + \int_{L/2}^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) (-x + L) dx \right) \\
&= \frac{\sqrt{24}}{L} \left(\left(\frac{L^2}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) - \frac{L}{n\pi} x \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) \Big|_0^{L/2} \right. \\
&\quad \left. + \left(-\frac{L^2}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + \frac{L}{n\pi} x \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) - \frac{L^2}{n\pi} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) \Big|_{L/2}^L \right) \\
&= \frac{\sqrt{24}}{L} \left(\left(\frac{L^2}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{L^2}{2n\pi} \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{L^2}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \frac{L^2}{2n\pi} \cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right) \right) \\
&= \frac{4\sqrt{6}L}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right). \tag{D.5}
\end{aligned}$$

Einsetzen in (D.4) ergibt für die Wellenfunktion $\psi(x, 0)$ zur Zeit $t = 0$ die folgende Entwicklung

$$\begin{aligned}
\psi(x, 0) &= \sum_n c_n \psi_n(x, 0) = \sum_n c_n u_n(x) \\
&= \sum_n \frac{4\sqrt{6}L}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) u_n(x) \\
&= \frac{4\sqrt{6}L}{\pi^2} \left(u_1(x) - \frac{1}{9}u_3(x) + \frac{1}{25}u_5(x) - \dots \right). \tag{D.6}
\end{aligned}$$

Den Zeitverlauf der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ ergibt sich nun aus der bekannten Zeitabhängigkeit der stationären Zustände $\psi_n(x, t)$ (D.2). Wir erhalten damit die folgende Lösung

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \sum_n \frac{4\sqrt{6}L}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \\
&= \frac{4\sqrt{6}L}{\pi^2} \left(u_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} - \frac{1}{9} u_3(x) e^{-iE_3 t/\hbar} + \frac{1}{25} u_5(x) e^{-iE_5 t/\hbar} - \dots \right). \tag{D.7}
\end{aligned}$$

Anhang E

Der quantenmechanische harmonische Oszillator - Potenzreihenansatz

In Abschnitt 10.2 haben wir eine algebraische Lösung der Differentialgleichung (10.7)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} u(x) = E u(x) \quad (\text{E.1})$$

des harmonischen Oszillators kennengelernt. Wir zeigen hier nun eine alternative Lösung, die wie bereits in Abschnitt 10.2 angedeutet, auf einem Potenzreihenansatz aufbaut. Als erstes formen wir die Differentialgleichung um, indem wir ein paar neue Variablen einführen

$$x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}, \quad (\text{E.2})$$

$$z = \frac{x}{x_0}, \quad (\text{E.3})$$

$$\lambda = \frac{E}{\hbar\omega/2}. \quad (\text{E.4})$$

Damit vereinfacht sich (E.1) zu

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 + \lambda \right) u(z) = 0. \quad (\text{E.5})$$

Für sehr grosse z reduziert sich unsere Differentialgleichung auf die Form

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 \right) u(z) = 0. \quad (\text{E.6})$$

Diese Gleichung wird näherungsweise durch die Funktion

$$u(z) = A e^{-z^2/2} \quad (\text{E.7})$$

gelöst. Denn es gilt für grosse z

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\right) \left(Ae^{-z^2/2}\right) = ((z^2 - 1) - z^2) e^{-z^2/2} = -e^{-z^2/2} \rightarrow 0 \quad (z \rightarrow \infty). \quad (\text{E.8})$$

Aus diesem Grund wählen wir als Ansatz

$$u(z) = Q(z)e^{-z^2/2}. \quad (\text{E.9})$$

Einsetzen in (E.5) liefert

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2z\frac{\partial}{\partial z} + (\lambda - 1)\right) Q(z) = 0. \quad (\text{E.10})$$

Nun sind wir an der Stelle angelangt, wo der Potenzreihenansatz zum Zuge kommt. Wir setzen

$$Q(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j z^j. \quad (\text{E.11})$$

Einsetzen in (E.10) ergibt

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j (j(j-1)z^{j-2} - 2jz^j + (\lambda-1)z^j) = 0. \quad (\text{E.12})$$

Damit die Summe verschwindet, müssen die Koeffizienten jeder Potenz verschwinden. Daher erhalten wir die folgende Bedingung

$$(j+2)(j+1)a_{j+2} - (2j+1-\lambda)a_j = 0. \quad (\text{E.13})$$

Damit ergibt sich zwischen den Koeffizienten die Rekursionsrelation

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-\lambda)}{(j+2)(j+1)} a_j. \quad (\text{E.14})$$

Für grosse j ergibt sich somit das folgende Grenzverhalten

$$\frac{a_{j+2}}{a_j} = \frac{2}{j}. \quad (\text{E.15})$$

Wir vergleichen dieses Verhalten der Potenzreihe $Q(z)$ mit der Reihe

$$e^{z^2} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (z^2)^j = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} z^{2j} \stackrel{(k=2j)}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{(k/2)!}}_{\equiv a_k} z^j, \quad (\text{E.16})$$

wobei \sum' nur über jedes zweite Glied summiert. In diesem Fall ergibt sich für nachfolgende Koeffizienten das folgende Grenzverhalten

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{\frac{k!}{2}}{\frac{k+2!}{2}} = \frac{1}{k/2+1} \rightarrow \frac{2}{k} \quad (k \rightarrow \infty). \quad (\text{E.17})$$

D.h. die Reihe $Q(z)$ würde wie e^{z^2} divergieren für $z \rightarrow \infty$, wenn sie nicht abbricht. Demzufolge würde $u(z)$ wie $e^{z^2} e^{-z^2/2} = e^{z^2/2}$ divergieren für $z \rightarrow \infty$ und $u(x)$ wäre nicht normierbar und daher physikalisch nicht sinnvoll. Demzufolge muss die Reihe $Q(z)$ abbrechen. Nennen wir die höchste in der Reihe auftretende Potenz n , so ergibt sich die Abbruchbedingung $a_{n+2} = 0$ und damit aus (E.14)

$$2n + 1 - \lambda = 0. \quad (\text{E.18})$$

Mit (E.4) ergeben sich damit in Übereinstimmung mit (10.43) die folgenden diskreten Energiewerte E_n für den harmonischen Oszillator

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{E.19})$$

Die zu den Energiewerten E_n zugehörigen Funktionen $Q(z)$ und damit die Wellenfunktionen $u_n(x)$ könnten mit Hilfe der Rekursionsrelation (E.14) bestimmt werden. Setzen wir jedoch die Bedingung (E.18) in (E.5) ein, erhalten wir folgende Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2z \frac{\partial}{\partial z} + 2n \right) Q(z) = 0, \quad (\text{E.20})$$

welche mit der Differentialgleichung (I.2) der Hermite-Polynome $H_n(z)$ übereinstimmt. D.h. es gilt $Q(z) = H_n(z)$ und wir erhalten mit (E.9) und (E.3) für die Wellenfunktion $u_n(x)$ des harmonischen Oszillators die folgende Lösung

$$u_n(x) = A Q(x/x_0) e^{(x/x_0)^2/2} = A H_n(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2/2}, \quad (\text{E.21})$$

wobei A eine noch zu bestimmende Normierungskonstante ist. Mit der Orthogonalitätsrelation (I.7) ergibt sich die folgende Bedingung für A

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_n(x) dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2} dx \\ &= A^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(z) e^{-z^2} dz \\ &\stackrel{\text{(I.7)}}{=} A^2 x_0 2^n n! \sqrt{\pi}. \end{aligned} \quad (\text{E.22})$$

Daraus ergibt sich für die Normierungskonstante A

$$A = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2}. \quad (\text{E.23})$$

Einsetzen in (E.21) liefert in Übereinstimmung mit (10.44) für die Wellenfunktion $u_n(x)$ des harmonischen Oszillators das folgende Schlussresultat

$$u_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} H_n(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2/2}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{E.24})$$

Anhang F

Der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

In Abschnitt 11.1 benützten wir den Laplace-Operator $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ in Kugelkoordinaten, d.h. in der Darstellung (siehe Gl. (11.7))

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (\text{F.1})$$

In diesem Abschnitt nehmen wir nun diese Umrechnung des Laplace-Operators von kartesischen zu Kugelkoordinaten vor. Dazu verwenden wir die folgenden Transformationsregeln

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad (\text{F.2})$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad (\text{F.3})$$

$$z = r \cos \vartheta, \quad (\text{F.4})$$

bzw. die Umkehrung

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (\text{F.5})$$

$$\vartheta = \arccos(z/r), \quad (\text{F.6})$$

$$\varphi = \arctan(y/x). \quad (\text{F.7})$$

Wir gehen nun schrittweise vor, indem wir als erstes die erste Ableitung von $\psi = \psi(r, \varphi, \vartheta, t)$ nach x , dann die zweite Ableitung von ψ nach x und anschliessend die entsprechenden Ableitungen für y und z bestimmen.

a) *Erste Ableitung nach x*

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \left(\frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi. \quad (\text{F.8})$$

Mit

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin \vartheta \cos \varphi, \quad (\text{F.9})$$

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial x} = \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r}, \quad (\text{F.10})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \quad (\text{F.11})$$

erhalten wir

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi. \quad (\text{F.12})$$

b) *Zweite Ableitung nach x*

Für die zweite Ableitung von ψ nach x ergibt sich mit (F.12)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &= \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &\quad - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &= \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\sin^2 \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \\ &\quad + \left(\frac{\cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{r} + \frac{\sin^2 \varphi}{r} \right) \frac{\partial \psi}{\partial r} \\ &\quad + \left(\frac{\cos \vartheta \sin^2 \varphi}{r^2 \sin \vartheta} - \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi}{r^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\ &\quad + \left(\frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ &\quad + \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} - \frac{2 \sin \varphi \cos \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \varphi} \\ &\quad - \frac{2 \cos \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi}. \end{aligned} \quad (\text{F.13})$$

c) *Erste Ableitung nach y*

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \left(\frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi. \quad (\text{F.14})$$

Mit

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \vartheta \sin \varphi, \quad (\text{F.15})$$

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r}, \quad (\text{F.16})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \quad (\text{F.17})$$

erhalten wir

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \left(\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi. \quad (\text{F.18})$$

d) *Zweite Ableitung nach y*

Für die zweite Ableitung von ψ nach y ergibt sich mit (F.18)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} &= \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} \left(\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\
&= \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin^2 \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos^2 \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \\
&\quad + \left(\frac{\cos^2 \vartheta \sin^2 \varphi}{r} + \frac{\cos^2 \varphi}{r} \right) \frac{\partial \psi}{\partial r} \\
&\quad + \left(\frac{\cos \vartheta \cos^2 \varphi}{r^2 \sin \vartheta} - \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi}{r^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\
&\quad - \left(\frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\
&\quad + \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} + \frac{2 \sin \varphi \cos \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \varphi} \\
&\quad + \frac{2 \cos \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi}. \tag{F.19}
\end{aligned}$$

e) *Erste Ableitung nach z*

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \left(\frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi. \tag{F.20}$$

Mit

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos \vartheta, \tag{F.21}$$

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial z} = -\frac{\sin \vartheta}{r}, \tag{F.22}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \tag{F.23}$$

erhalten wir

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \left(\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \psi. \tag{F.24}$$

f) *Zweite Ableitung nach z*

Für die zweite Ableitung von ψ nach z ergibt sich mit (F.24)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} &= \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \left(\cos \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \\ &\quad - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\cos \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \\ &= \cos^2 \vartheta \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\sin \vartheta}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\sin^2 \vartheta}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\ &\quad - \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta}. \end{aligned} \quad (\text{F.25})$$

Der Laplace-Operator Δ in Kugelkoordinaten entspricht nun der Summe der Ausdrücke (F.13), (F.19) und (F.25). D.h. es gilt

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \\ &= (\text{F.13}) + (\text{F.19}) + (\text{F.25}). \end{aligned} \quad (\text{F.26})$$

Um die Formelschlacht ein bisschen übersichtlicher zu gestalten, verzichten wir auf das direkte Einsetzen und vereinfachen in der Summe (F.13) + (F.19) + (F.25) die Ausdrücke, welche nur die zweite Ableitung nach r , ϑ oder φ enthalten, Ausdrücke, welche nur die erste Ableitung nach r , ϑ oder φ enthalten oder Ausdrücke, welche nur eine gemischte Ableitung nach r und ϑ , r und φ oder ϑ und φ enthalten, separat:

i) *Ausdrücke mit zweiter Ableitung nach r*

$$\begin{aligned} &\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \cos^2 \vartheta \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \\ &= (\sin^2 \vartheta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) + \cos^2 \vartheta) \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \\ &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}. \end{aligned} \quad (\text{F.27})$$

ii) *Ausdrücke mit zweiter Ableitung nach ϑ*

$$\begin{aligned} &\frac{\cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin^2 \varphi}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\sin^2 \vartheta}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} \\ &= \frac{\sin^2 \vartheta + \cos^2 \vartheta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2}. \end{aligned} \quad (\text{F.28})$$

iii) *Ausdrücke mit zweiter Ableitung nach φ*

$$\begin{aligned} &\frac{\sin^2 \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos^2 \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (\text{F.29})$$

iv) *Ausdrücke mit erster Ableitung nach r*

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\cos^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{r} + \frac{\sin^2 \varphi}{r} \right) \frac{\partial \psi}{\partial r} + \left(\frac{\cos^2 \vartheta \sin^2 \varphi}{r} + \frac{\cos^2 \varphi}{r} \right) \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\sin^2 \vartheta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \\
&= \frac{\sin^2 \vartheta + \cos^2 \vartheta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) + \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \\
&= \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}.
\end{aligned} \tag{F.30}$$

v) *Ausdrücke mit erster Ableitung nach ϑ*

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\cos \vartheta \sin^2 \varphi}{r^2 \sin \vartheta} - \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi}{r^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\
&+ \left(\frac{\cos \vartheta \cos^2 \varphi}{r^2 \sin \vartheta} - \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi}{r^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\
&+ \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\
&= \left(\frac{\cos \vartheta (\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi)}{r^2 \sin \vartheta} + \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta (1 - \sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi)}{r^2} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\
&= \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta}.
\end{aligned} \tag{F.31}$$

vi) *Ausdrücke mit erster Ableitung nach φ*

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\
&- \left(\frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin \vartheta} + \frac{\sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \vartheta} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{F.32}$$

vii) *Ausdrücke mit gemischter Ableitung nach r und ϑ*

$$\begin{aligned}
& \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \cos^2 \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} + \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta \sin^2 \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} - \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} \\
&= \frac{2 \sin \vartheta \cos \vartheta (\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi - 1)}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{F.33}$$

viii) *Ausdrücke mit gemischter Ableitung nach r und φ*

$$\begin{aligned}
& - \frac{2 \sin \varphi \cos \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \varphi} + \frac{2 \sin \varphi \cos \varphi}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \varphi} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{F.34}$$

ix) *Ausdrücke mit gemischter Ableitung nach ϑ und φ*

$$\begin{aligned}
& - \frac{2 \cos \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} + \frac{2 \cos \vartheta \sin \varphi \cos \varphi}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{F.35}$$

Mit den Vereinfachungen i) - ix) ergibt sich für die Summe (F.13) + (F.19) + (F.25), d.h. für den Laplace-Operator Δ (F.26) in Kugelkoordinaten das folgende Resultat

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.\end{aligned}\quad (\text{F.36})$$

Dieser Ausdruck stimmt mit (F.1) überein, womit die Richtigkeit von (F.1) gezeigt ist.

Anhang G

Quadrat des Bahndrehimpulsoperators

Wir führen an dieser Stelle die Berechnung des Quadrats des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}^2 (11.10) aus Abschnitt 11.1 schrittweise durch. Unser Ausgangspunkt ist der Bahndrehimpulsoperator \hat{L} in Kugelkoordinaten, welcher nach (11.9) gegeben ist durch

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \cos\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \sin\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix}. \quad (\text{G.1})$$

Wir berechnen nun die Quadrate \hat{L}_x^2 , \hat{L}_y^2 und \hat{L}_z^2 der einzelnen Komponenten des Bahndrehimpulsoperators separat, indem wir den jeweiligen Operator auf die Wellenfunktion $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi, t)$ anwenden:

i) *x-Komponente*

$$\begin{aligned} \hat{L}_x^2 \psi &= -\hbar^2 \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \cos\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left(-\sin\varphi \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \cos\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\sin^2\varphi \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{\cos^2\vartheta \cos^2\varphi}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta \cos^2\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sin\varphi \cos\varphi (1 + \cos\vartheta^2)}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{2 \cos\vartheta \sin\varphi \cos\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta\partial\varphi} \right). \quad (\text{G.2}) \end{aligned}$$

ii) *y-Komponente*

$$\begin{aligned} \hat{L}_y^2 \psi &= -\hbar^2 \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \sin\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left(\cos\varphi \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \sin\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\cos^2\varphi \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{\cos^2\vartheta \sin^2\varphi}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta \sin^2\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin\varphi \cos\varphi (1 + \cos\vartheta^2)}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} - \frac{2 \cos\vartheta \sin\varphi \cos\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta\partial\varphi} \right). \quad (\text{G.3}) \end{aligned}$$

iii) *z-Komponente*

$$\begin{aligned}\hat{L}_z^2\psi &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \left(\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}.\end{aligned}\tag{G.4}$$

Mit (G.2), (G.3) und (G.4) erhalten wir für das Quadrat des Bahndrehimpulsoperators \hat{L}^2 das folgende Resultat

$$\begin{aligned}\hat{L}^2\psi &= \left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \right) \psi \\ &= -\hbar^2 \left((\sin^2\varphi + \cos^2\varphi) \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \left(\frac{\cos^2\vartheta (\sin^2\varphi + \cos^2\varphi)}{\sin^2\vartheta} + 1 \right) \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} \right. \\ &\quad + \frac{\cos\vartheta (\sin^2\varphi + \cos^2\varphi)}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \\ &\quad + \left(-\frac{\sin\varphi \cos\varphi (1 + \cos\vartheta^2)}{\sin^2\vartheta} + \frac{\sin\varphi \cos\varphi (1 + \cos\vartheta^2)}{\sin^2\vartheta} \right) \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \\ &\quad \left. + \left(\frac{2\cos\vartheta \sin\varphi \cos\varphi}{\sin\vartheta} - \frac{2\cos\vartheta \sin\varphi \cos\varphi}{\sin\vartheta} \right) \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta\partial\varphi} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} \right).\end{aligned}\tag{G.5}$$

Dieser Ausdruck ist identisch mit (11.10), womit die Richtigkeit von (11.10) gezeigt ist.

Anhang H

Berechnung diverser Kommutatorrelationen

Am Ende des Abschnitts 11.1 führen wir diverse Kommutatorrelationen auf, dessen Berechnungen wir an dieser Stelle durchführen. Auf die Herleitung der Relationen (11.12), (11.13) und (11.14) wurde bereits in Abschnitt 9.3.3 eingegangen, weshalb wir uns hier auf die Relationen in (11.15) und (11.16) beschränken, d.h. wir zeigen die Richtigkeit der folgenden fünf Kommutatorrelationen

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0, \quad (\text{H.1})$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0, \quad (\text{H.2})$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0, \quad (\text{H.3})$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0, \quad (\text{H.4})$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \quad (\text{H.5})$$

Beweis:

Wir beweisen nun einzeln die Richtigkeit der Ausdrücke (H.1) - (H.5) durch explizites Ausrechnen. Dabei treten drei Ableitungen wiederholt auf, weshalb wir sie hier zu Beginn aufführen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \right) &= \frac{-\sin^2 \vartheta - \cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta} \\ &= -\frac{1}{\sin^2 \vartheta}, \end{aligned} \quad (\text{H.6})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \right) &= \frac{-2 \sin \vartheta \cos \vartheta}{\sin^4 \vartheta} \\ &= -\frac{2 \cos \vartheta}{\sin^3 \vartheta}, \end{aligned} \quad (\text{H.7})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\frac{2 \cos \vartheta}{\sin^3 \vartheta} \right) &= \frac{-2 \sin^2 \vartheta - 6 \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta}{\sin^6 \vartheta} \\ &= -\frac{2 + 4 \cos^2 \vartheta}{\sin^4 \vartheta}. \end{aligned} \quad (\text{H.8})$$

- i) Die beiden Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_x sind nach (11.10) und (11.9) gegeben durch

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right), \quad (\text{H.9})$$

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (\text{H.10})$$

Damit resultiert für die Anwendung des Produkts $\hat{L}^2 \hat{L}_x$ auf eine beliebige Wellenfunktion $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi, t)$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \hat{L}_x \psi &= \frac{\hbar^3}{i} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \left(\sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &= \frac{\hbar^3}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^3} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} - \frac{\sin \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} \right. \\ &\quad - \frac{2 \cos \vartheta \sin \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \cos \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \\ &\quad \left. + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi} + \frac{\sin \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi^2} \right). \quad (\text{H.11}) \end{aligned}$$

Andererseits ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}^2 \psi &= \frac{\hbar^3}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \\ &= \frac{\hbar^3}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^3} + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} - \frac{\sin \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} \right. \\ &\quad - \frac{2 \cos \vartheta \sin \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \cos \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \\ &\quad \left. + \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi} + \frac{\sin \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi^2} \right). \quad (\text{H.12}) \end{aligned}$$

Die Ausdrücke in (H.11) und (H.12) sind identisch und daher erhalten wir

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] \psi = \hat{L}^2 \hat{L}_x \psi - \hat{L}_x \hat{L}^2 \psi = 0.$$

- ii) Die beiden Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_y sind nach (11.10) und (11.9) gegeben durch

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right), \quad (\text{H.13})$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (\text{H.14})$$

Damit resultiert für die Anwendung des Produkts $\hat{L}^2 \hat{L}_y$ auf eine beliebige

Wellenfunktion $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi, t)$

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 \hat{L}_y \psi &= \frac{\hbar^3}{i} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \left(\cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &= \frac{\hbar^3}{i} \left(-\cos \varphi \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^3} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right. \\ &\quad + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} + \frac{2 \cos \vartheta \cos \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \\ &\quad \left. + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi} - \frac{\cos \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi^2} \right). \quad (\text{H.15})\end{aligned}$$

Andererseits ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{L}_y \hat{L}^2 \psi &= \frac{\hbar^3}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \\ &= \frac{\hbar^3}{i} \left(-\cos \varphi \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^3} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right. \\ &\quad + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} + \frac{2 \cos \vartheta \cos \varphi}{\sin^3 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos^2 \vartheta \sin \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \\ &\quad \left. + \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi} - \frac{\cos \varphi}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi^2} \right). \quad (\text{H.16})\end{aligned}$$

Die Ausdrücke in (H.15) und (H.16) sind identisch und daher erhalten wir

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_y] \psi = \hat{L}^2 \hat{L}_y \psi - \hat{L}_y \hat{L}^2 \psi = 0.$$

- iii) Die beiden Operatoren \hat{L}^2 und \hat{L}_z sind nach (11.10) und (11.9) gegeben durch

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right), \quad (\text{H.17})$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (\text{H.18})$$

Damit erhalten wir für die Anwendung des Kommutators $[\hat{L}^2, \hat{L}_z]$ auf eine beliebige Wellenfunktion $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi, t)$

$$\begin{aligned}[\hat{L}^2, \hat{L}_z] \psi &= \hat{L}^2 \hat{L}_z \psi - \hat{L}_z \hat{L}^2 \psi \\ &= -\frac{\hbar^3}{i} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ &\quad + \frac{\hbar^3}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \\ &= -\frac{\hbar^3}{i} \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \right) \\ &\quad + \frac{\hbar^3}{i} \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \varphi^3} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi} \right) \\ &= 0. \quad (\text{H.19})\end{aligned}$$

iv) Die beiden Operatoren \hat{H} und \hat{L}^2 sind nach (11.8) und (11.10) gegeben durch

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_C \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{\cos\vartheta}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},\end{aligned}\tag{H.20}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right).\tag{H.21}$$

Damit resultiert für die Anwendung des Produkts $\hat{H}\hat{L}^2$ auf eine beliebige Wellenfunktion $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi, t)$

$$\begin{aligned}\hat{H}\hat{L}^2\psi &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{\cos\vartheta}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) \\ &\quad \left(-\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)\right).\end{aligned}\tag{H.22}$$

Ausführung der Ableitung liefert mit Hilfe von (H.6), (H.7) und (H.8)

$$\begin{aligned}\hat{H}\hat{L}^2\psi &= \frac{\hbar^4}{2m}\left(\frac{\partial^4\psi}{\partial r^2\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^4\psi}{\partial r^2\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial^3\psi}{\partial r^2\partial\vartheta} + \frac{2}{r}\frac{\partial^3\psi}{\partial r\partial\vartheta^2} \right. \\ &\quad + \frac{2}{r\sin^2\vartheta}\frac{\partial^3\psi}{\partial r\partial\varphi^2} + \frac{2\cos\vartheta}{r\sin\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial r\partial\vartheta} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^4\psi}{\partial\vartheta^4} \\ &\quad + \frac{2\cos\vartheta}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial^3\psi}{\partial\vartheta^3} + \frac{\cos^2\vartheta - 2}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{\cos\vartheta}{r^2\sin^3\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \\ &\quad + \frac{1}{r^2\sin^4\vartheta}\frac{\partial^4\psi}{\partial\varphi^4} + \frac{2 + 2\cos^2\vartheta}{r^2\sin^4\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^4\psi}{\partial\vartheta^2\partial\varphi^2} \\ &\quad \left. - \frac{2\cos\vartheta}{r^2\sin^3\vartheta}\frac{\partial^3\psi}{\partial\vartheta\partial\varphi^2}\right) \\ &\quad + \frac{\hbar^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right).\end{aligned}\tag{H.23}$$

Andererseits ergibt sich

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 \hat{H} \psi &= \left(-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \\
&= \frac{\hbar^4}{2m} \left(\frac{\partial^4 \psi}{\partial r^2 \partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^4 \psi}{\partial r^2 \partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial r^2 \partial \vartheta} + \frac{2}{r} \frac{\partial^3 \psi}{\partial r \partial \vartheta^2} \right. \\
&\quad + \frac{2}{r \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial r \partial \varphi^2} + \frac{2 \cos \vartheta}{r \sin \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \vartheta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^4 \psi}{\partial \vartheta^4} \\
&\quad + \frac{2 \cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta^3} + \frac{\cos^2 \vartheta - 2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin^3 \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\
&\quad + \frac{1}{r^2 \sin^4 \vartheta} \frac{\partial^4 \psi}{\partial \varphi^4} + \frac{2 + 2 \cos^2 \vartheta}{r^2 \sin^4 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^4 \psi}{\partial \vartheta^2 \partial \varphi^2} \\
&\quad \left. - \frac{2 \cos \vartheta}{r^2 \sin^3 \vartheta} \frac{\partial^3 \psi}{\partial \vartheta \partial \varphi^2} \right) \\
&\quad + \frac{\hbar^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right). \tag{H.24}
\end{aligned}$$

Die Ausdrücke in (H.23) und (H.24) sind identisch und daher erhalten wir

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] \psi = \hat{H} \hat{L}^2 \psi - \hat{L}^2 \hat{H} \psi = 0.$$

v) Die beiden Operatoren \hat{H} und \hat{L}_z sind nach (11.8) und (11.9) gegeben durch

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\
&\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \tag{H.25}
\end{aligned}$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{H.26}$$

Damit erhalten wir für die Anwendung des Kommutators $[\hat{H}, \hat{L}_z]$ auf eine beliebige Wellenfunktion $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi, t)$

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{L}_z] \psi &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\
&\quad - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi \right) \\
&= 0. \tag{H.27}
\end{aligned}$$

□

Anhang I

Mathematische Funktionen

In Kapitel 10 beim Lösen der Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator sowie in Kapitel 11 beim Lösen der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom treten verschiedene aus der Mathematik bekannte Differentialgleichungen auf. An dieser Stelle fassen wir die Eigenschaften der Lösungen dieser Differentialgleichungen zusammen.

I.1 Hermite-Polynome

Die Hermite-Polynome $H_n(x)$ treten im Zusammenhang mit den Lösungen für die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators auf (siehe Abschnitt 10.2.4) und sind nach (10.45) gegeben durch

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{I.1})$$

Eigenschaften

1. *Differentialgleichung*

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} + 2n \right) H_n(x) = 0. \quad (\text{I.2})$$

2. *Rekursionsformeln*

$$xH_n(x) = nH_{n-1}(x) + \frac{1}{2}H_{n+1}(x), \quad (\text{I.3})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} H_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \quad (\text{I.4})$$

3. *Erzeugende Funktion*

$$e^{-t^2+2xt} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}. \quad (\text{I.5})$$

4. Explizite Darstellung

$$H_n(x) = (-1)^n \sum_{j+2k=n} \frac{n!}{j!k!} (-1)^{j+k} (2x)^j. \quad (\text{I.6})$$

5. Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}. \quad (\text{I.7})$$

6. Beispiele

$$H_0(x) = 1, \quad (\text{I.8})$$

$$H_1(x) = 2x, \quad (\text{I.9})$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad (\text{I.10})$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x, \quad (\text{I.11})$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad (\text{I.12})$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x. \quad (\text{I.13})$$

I.2 Legendre-Polynome

Die Legendre-Polynome $P_l(x)$ treten als Basis für die zugeordneten Legendre-Polynome (siehe Abschnitt I.3) auf und sind nach (11.34) gegeben durch

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial}{\partial x^l} (x^2 - 1)^l, \quad l \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{I.14})$$

Eigenschaften

1. Differentialgleichung

$$\left((1-x^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} + l(l+1) \right) P_l(x) = 0. \quad (\text{I.15})$$

2. Rekursionsformeln

$$l P_l(x) = (2l-1)x P_{l-1}(x) - (l-1) P_{l-2}(x), \quad (\text{I.16})$$

$$(x^2-1) \frac{\partial}{\partial x} P_l(x) = l x P_l(x) - l P_{l-1}(x). \quad (\text{I.17})$$

3. Erzeugende Funktion

$$(1-2xt+t^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) t^l. \quad (\text{I.18})$$

4. Explizite Darstellung

$$P_l(x) = \sum_{j=0}^{j_{\max}} (-1)^j \frac{(2l-2j)! x^{l-2j}}{(l-j)!(l-2j)!j!2^l}, \quad (\text{I.19})$$

wobei

$$j_{\max} = \begin{cases} \frac{n}{2}, & l \text{ gerade,} \\ \frac{n-1}{2}, & l \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (\text{I.20})$$

5. Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^1 P_l(x) P_k(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{lk}. \quad (\text{I.21})$$

6. Beispiele

$$P_0(x) = 1, \quad (\text{I.22})$$

$$P_1(x) = x, \quad (\text{I.23})$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad (\text{I.24})$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad (\text{I.25})$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \quad (\text{I.26})$$

$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x). \quad (\text{I.27})$$

I.3 Zugeordnete Legendre-Polynome

Die zugeordneten $P_l^{m_l}(x)$ treten im Zusammenhang mit den Lösungen für die Polarkomponente $\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$ der Wellenfunktion $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms auf (siehe Abschnitt 11.2.1) und sind nach (11.30) gegeben durch

$$P_l^{m_l}(x) = (1-x^2)^{|m_l|/2} \frac{\partial^{|m_l|}}{\partial x^{|m_l|}} P_l(x), \quad l \in \mathbb{N}_0, \quad m_l \in \mathbb{Z}, \quad |m_l| \leq l, \quad (\text{I.28})$$

wobei $P_l(x)$ die Legendre-Polynome sind (siehe Abschnitt I.2).

Eigenschaften

1. Differentialgleichung

$$\left((1-x^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{1-x^2} \right) \right) P_l^{m_l}(x) = 0. \quad (\text{I.29})$$

2. Rekursionsformeln

$$x P_l^{m_l}(x) = \frac{l+|m_l|}{2l+1} P_{l-1}^{m_l}(x) - \frac{l+1-|m_l|}{2l+1} P_{l+1}^{m_l}(x), \quad (\text{I.30})$$

$$(1-x^2) \frac{\partial}{\partial x} P_l^{m_l}(x) = -l x P_l^{m_l}(x) + (l+|m_l|) P_{l-1}^{m_l}(x). \quad (\text{I.31})$$

3. Erzeugende Funktion

$$\frac{(2|m_l|)!}{2^{|m_l|}|m_l|!} \frac{(1-x^2)^{|m_l|/2} t^{|m_l|}}{(1-2xt+t^2)^{(|m_l|+1)/2}} = \sum_{l=|m_l|}^{\infty} P_l^{m_l}(x) t^n. \quad (\text{I.32})$$

4. Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^1 P_l^{m_l}(x) P_k^{m_k}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m_l|)!}{(l-|m_l|)!} \delta_{lk} \delta_{m_l m_k}. \quad (\text{I.33})$$

5. Beispiele

$$P_0^0(x) = 1, \quad (\text{I.34})$$

$$P_1^0(x) = x, \quad (\text{I.35})$$

$$P_1^1(x) = (1-x^2)^{1/2}, \quad (\text{I.36})$$

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1), \quad (\text{I.37})$$

$$P_2^1(x) = 3x(1-x^2)^{1/2}, \quad (\text{I.38})$$

$$P_2^2(x) = 3(1-x^2), \quad (\text{I.39})$$

$$P_3^0(x) = \frac{x}{2}(5x^2-3), \quad (\text{I.40})$$

$$P_3^1(x) = \frac{3}{2}(5x^2-1)(1-x^2)^{1/2}, \quad (\text{I.41})$$

$$P_3^2(x) = 15x(1-x^2), \quad (\text{I.42})$$

$$P_3^3(x) = 15(1-x^2)^{3/2}. \quad (\text{I.43})$$

I.4 Laguerre-Polynome

Die Laguerre-Polynome $L_n(x)$ treten als Basis für die zugeordneten Laguerre-Polynome (siehe Abschnitt I.5) auf und sind gegeben durch

$$L_n(x) = e^x \frac{\partial^n}{\partial x^n} (x^n e^{-x}), \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{I.44})$$

Eigenschaften

1. Differentialgleichung

$$\left(x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (1-x) \frac{\partial}{\partial x} + n \right) L_n(x) = 0. \quad (\text{I.45})$$

2. Rekursionsformeln

$$L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) + n^2 L_{n-1}(x), \quad (\text{I.46})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} L_n(x) = n \left(\frac{\partial}{\partial x} L_{n-1}(x) - L_{n-1}(x) \right). \quad (\text{I.47})$$

3. Erzeugende Funktion

$$(1-t)^{-1}e^{-xt/(1-t)} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \frac{t^n}{n!}. \quad (\text{I.48})$$

4. Explizite Darstellung

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^n (-1)^j \frac{(n!)^2}{(j!)^2(n-j)!} x^j. \quad (\text{I.49})$$

5. Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{\infty} L_n(x)L_{n'}(x)e^{-x}dx = (n!)^2\delta_{nn'}. \quad (\text{I.50})$$

6. Beispiele

$$L_0(x) = 1, \quad (\text{I.51})$$

$$L_1(x) = 1 - x, \quad (\text{I.52})$$

$$L_2(x) = 2 - 4x + x^2, \quad (\text{I.53})$$

$$L_3(x) = 6 - 18x + 9x^2 - x^3, \quad (\text{I.54})$$

$$L_4(x) = 24 - 96x + 72x^2 - 16x^3 + x^4, \quad (\text{I.55})$$

$$L_5(x) = 120 - 600x + 600x^2 - 200x^3 + 25x^4 - x^5. \quad (\text{I.56})$$

I.5 Zugeordnete Laguerre-Polynome

Die zugeordneten Laguerre-Polynome $L_n^m(x)$ treten im Zusammenhang mit den Lösungen für den radialen Anteil $R_{n,l}(r)$ der Wellenfunktion $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms auf (siehe Abschnitt 11.2.3) und sind gegeben durch

$$L_n^m(x) = \frac{\partial^m}{\partial x^m} L_n(x), \quad n, m \in \mathbb{N}_0, \quad (\text{I.57})$$

wobei $L_n(x)$ die Laguerre-Polynome sind (siehe Abschnitt I.4).

Eigenschaften

1. Differentialgleichung

$$\left(x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (m+1-x) \frac{\partial}{\partial x} + (n-m) \right) L_n^m(x) = 0. \quad (\text{I.58})$$

2. Erzeugende Funktion

$$(-t)^m (1-t)^{-(m+1)} e^{-xt/(1-t)} = \sum_{n=m}^{\infty} L_n^m(x) \frac{t^n}{n!}. \quad (\text{I.59})$$

3. Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^\infty x^{m+1} e^{-x} L_n^m(x) L_{n'}^{m'}(x) = \frac{(2n-m+1)(n!)^3}{(n-m)!} \delta_{nn'} \delta_{mm'}. \quad (\text{I.60})$$

4. Explizite Darstellung

$$L_n^m(x) = \sum_{j=0}^{n-m} (-1)^{j+m} \frac{(n!)^2}{j!(j+m)!(n-j-m)!} x^j. \quad (\text{I.61})$$

5. Beispiele

$$L_0^0(x) = 1, \quad (\text{I.62})$$

$$L_1^0(x) = 1 - x, \quad (\text{I.63})$$

$$L_1^1(x) = -1, \quad (\text{I.64})$$

$$L_2^0(x) = 2 - 4x + x^2, \quad (\text{I.65})$$

$$L_2^1(x) = -4 + 2x, \quad (\text{I.66})$$

$$L_2^2(x) = 2, \quad (\text{I.67})$$

$$L_3^0(x) = 6 - 18x + 9x^2 - x^3, \quad (\text{I.68})$$

$$L_3^1(x) = -18 + 18x - 3x^2, \quad (\text{I.69})$$

$$L_3^2(x) = 18 - 6x, \quad (\text{I.70})$$

$$L_3^3(x) = -6. \quad (\text{I.71})$$

I.6 Kugelfunktionen

Die Kugelfunktionen $Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$ treten im Zusammenhang mit den Lösungen für den winkelabhängigen Anteil der Wellenfunktion $u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$ des Wasserstoffatoms auf (siehe Abschnitt 11.2.2) und sind nach (11.38) gegeben durch

$$Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right)^{1/2} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) e^{im_l \varphi}.$$

Eigenschaften

1. Differentialgleichung

$$\left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right) Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = 0. \quad (\text{I.72})$$

2. Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l,m_l}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l',m_l'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{l,l'} \delta_{m_l,m_l'}. \quad (\text{I.73})$$

3. Vollständigkeit

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^l Y_{l,m_l}^*(\vartheta', \varphi') Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sin \vartheta} \delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (\text{I.74})$$

4. Additionstheorem

$$\sum_{m_l=-l}^l Y_{l,m_l}^*(\vartheta', \varphi') Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \Theta), \quad (\text{I.75})$$

wobei

$$\cos \Theta = \cos \vartheta \cos \vartheta' + \sin \vartheta \sin \vartheta' \cos(\varphi - \varphi'). \quad (\text{I.76})$$

Dabei entspricht Θ dem Winkel zwischen den beiden Richtungen (ϑ, φ) und (ϑ', φ') .

5. Beispiele

$$Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \quad (\text{I.77})$$

$$Y_{1,0}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \vartheta, \quad (\text{I.78})$$

$$Y_{1,\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \quad (\text{I.79})$$

$$Y_{2,0}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1), \quad (\text{I.80})$$

$$Y_{2,\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \quad (\text{I.81})$$

$$Y_{2,\pm 2}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}, \quad (\text{I.82})$$

$$Y_{3,0}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta), \quad (\text{I.83})$$

$$Y_{3,\pm 1}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{21}}{8\sqrt{\pi}} (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}, \quad (\text{I.84})$$

$$Y_{3,\pm 2}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm 2i\varphi}, \quad (\text{I.85})$$

$$Y_{3,\pm 3}(\vartheta, \varphi) = \frac{\sqrt{35}}{8\sqrt{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}. \quad (\text{I.86})$$

Anhang J

Hamilton-Funktion im Magnetfeld

In Abschnitt 12.3 haben wir die Hamilton-Funktion für ein Teilchen der Ladung q und der Masse m im Magnetfeld \vec{B} kennengelernt. Sie lautet (siehe Gl. (12.15))

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2. \quad (\text{J.1})$$

Wir geben in diesem Kapitel eine Motivation dieser Hamilton-Funktion, indem wir die erweiterte Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi. \quad (\text{J.2})$$

für ein Teilchen der Ladung q und der Masse m im elektromagnetischen Feld, welches durch die elektrische Feldstärke \vec{E} und die magnetische Flussdichte \vec{B} charakterisiert ist, auf die bekannte Newtonsche Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\vec{r}} = q(\vec{E} + \dot{\vec{r}} \times \vec{B}) \quad (\text{J.3})$$

zurückführen. Dabei ist ϕ das elektrische Potential und es gelten zwischen der elektrischen Feldstärke \vec{E} , der magnetischen Flussdichte \vec{B} , dem elektrischen Potential ϕ und dem Vektorpotential \vec{A} die folgenden Zusammenhänge

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \quad (\text{J.4})$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (\text{J.5})$$

Wir beginnen mit der Aufstellung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m}(p_i - qA_i), \quad (\text{J.6})$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{1}{m}(\vec{p} - q\vec{A}) \cdot \left(-q \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i}\right) - q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \\ &\stackrel{(\text{J.6})}{=} q\dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} - q \frac{\partial \phi}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (\text{J.7})$$

wobei $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$. Aus (J.6) ergibt sich für die zweite Ableitung von x_i nach der Zeit

$$\begin{aligned}\ddot{x}_i &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) = \frac{1}{m} \left(\dot{p}_i - q \left(\sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial x_j}{\partial t} \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) \right) \\ &= \frac{1}{m} \left(\dot{p}_i - q \left((\dot{\vec{r}} \vec{\nabla}) A_i + \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) \right).\end{aligned}\quad (\text{J.8})$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}m\ddot{x}_i &= \dot{p}_i - q \left((\dot{\vec{r}} \vec{\nabla}) A_i + \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) \\ &\stackrel{(\text{J.7})}{=} q \dot{\vec{r}} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} - q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - q (\dot{\vec{r}} \vec{\nabla}) A_i - q \frac{\partial A_i}{\partial t}.\end{aligned}\quad (\text{J.9})$$

Mit der Vektoridentität

$$\left(\dot{\vec{r}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \right)_i = \dot{\vec{r}} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} - (\dot{\vec{r}} \vec{\nabla}) A_i \quad (\text{J.10})$$

ergibt sich

$$m\ddot{x}_i = q \left(\dot{\vec{r}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \right)_i + q \left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) \quad (\text{J.11})$$

und damit

$$\begin{aligned}m\ddot{\vec{r}} &= q \left(\dot{\vec{r}} \times \underbrace{(\vec{\nabla} \times \vec{A})}_{=\vec{B}} \right) + q \underbrace{\left(-\vec{\nabla} \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)}_{=\vec{E}} \\ &= q \left(\vec{E} + \dot{\vec{r}} \times \vec{B} \right).\end{aligned}\quad (\text{J.12})$$

Somit haben wir die Hamilton-Funktion (J.2) auf die Newtonsche Bewegungsgleichung (J.3) zurückgeführt.

Anhang K

Pauli-Matrizen

In Abschnitt 13.3 haben wir die Pauli-Matrizen σ_x , σ_y und σ_z kennengelernt. Wir geben an dieser Stelle eine Herleitung dieser Matrizen an.

Die Pauli-Matrix σ_z ergibt sich aus der Anwendung von \hat{S}_z auf die beiden Basiszustände $\chi_{1/2}(\sigma) = (1, 0)$ und $\chi_{-1/2}(\sigma) = (0, 1)$. Mit (13.12) ergibt sich

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{K.1})$$

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{K.2})$$

und somit in Übereinstimmung mit (13.25) für σ_z das folgende Resultat

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{K.3})$$

Für die Bestimmung der Pauli-Matrizen σ_x und σ_y leiten wir die Eigenschaften und die Matrixdarstellung der in Abschnitt 13.3.1 eingeführten Leiteroperatoren \hat{S}_+ und \hat{S}_- unabhängig von der Matrixdarstellung für die Spinmatrizen \hat{S}_x und \hat{S}_y her.

Die Leiteroperatoren \hat{S}_+ und \hat{S}_- sind nach (13.28) und (13.29) gegeben durch

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y. \quad (\text{K.4})$$

Wir geben als erstes ein paar Eigenschaften dieser beiden Operatoren an:

i) Produkt

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ \hat{S}_- &= (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)(\hat{S}_x - i\hat{S}_y) = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - i[\hat{S}_x, \hat{S}_y] \\ &\stackrel{(13.3)}{=} \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hbar\hat{S}_z, \end{aligned} \quad (\text{K.5})$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_- \hat{S}_+ &= (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + i[\hat{S}_x, \hat{S}_y] \\ &\stackrel{(13.3)}{=} \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - \hbar\hat{S}_z. \end{aligned} \quad (\text{K.6})$$

ii) Quadrat des Spinoperators

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \\ &\stackrel{(K.5)}{=} \hat{S}_+ \hat{S}_- - \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_z^2\end{aligned}\quad (K.7)$$

$$\stackrel{(K.6)}{=} \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_z^2. \quad (K.8)$$

iii) Kommutatorrelationen

Mit (13.4) und (13.5) folgt

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_\pm] = \pm \hbar \hat{S}_\pm, \quad (K.9)$$

mit (K.5) und (K.6) ergibt sich

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hbar \hat{S}_z \quad (K.10)$$

und in Analogie zu (11.15) gilt

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_+] = 0. \quad (K.11)$$

Wir wenden nun den Operator \hat{S}_z auf die Zustände $\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)$ an und untersuchen damit den Einfluss der Leiteroperatoren \hat{S}_\pm auf die magnetische Spinquantenzahl $m_s = \pm 1/2$. Wir erhalten

$$\begin{aligned}\hat{S}_z(\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)) &\stackrel{(K.9)}{=} \hat{S}_\pm \hat{S}_z \chi_{m_s}(\sigma) \pm \hbar \hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma) \\ &\stackrel{(13.10)}{=} \hbar m_s \hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma) \pm \hbar \hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma) \\ &= \hbar(m_s \pm 1)(\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)).\end{aligned}\quad (K.12)$$

Somit erhöht (erniedrigt) der Operator \hat{S}_+ (\hat{S}_-) die Quantenzahl m_s um 1. Auf analoge Weise untersuchen wir den Einfluss der Leiteroperatoren \hat{S}_\pm auf die Spinquantenzahl $s = 1/2$. Es gilt

$$\begin{aligned}\hat{S}^2(\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)) &\stackrel{(K.11)}{=} \hat{S}_\pm \hat{S}^2 \chi_{m_s}(\sigma) \\ &\stackrel{(13.11)}{=} \hbar^2 s(s+1)(\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)).\end{aligned}$$

Folglich bleibt die Spinquantenzahl $s = 1/2$ unverändert bei der Anwendung der Leiteroperatoren \hat{S}_\pm .

Als nächstes betrachten wir die Norm der Zustände $\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)$ und erhalten mit (K.5), (K.6), (13.10) und (13.11)

$$\begin{aligned}\int (\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma))^* (\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma)) d\sigma &= \int \chi_{m_s}^*(\sigma) \hat{S}_\mp \hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma) d\sigma \\ &= \int \chi_{m_s}^*(\sigma) (\hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 \mp \hbar \hat{S}_z) \chi_{m_s}(\sigma) d\sigma \\ &= \hbar^2 (s(s+1) - m_s^2 \mp m_s),\end{aligned}\quad (K.13)$$

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass die Spinwellenfunktionen $\chi_{m_s}(\sigma)$ auf 1 normiert sind. Zusammen mit dem erhaltenen Verhalten der Quantenzahlen s und m_s unter der Anwendung der Leiteroperatoren \hat{S}_\pm erhalten wir damit die folgende Gleichung

$$\hat{S}_\pm \chi_{m_s}(\sigma) = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} \chi_{m_s \pm 1}(\sigma). \quad (\text{K.14})$$

Mit $s = 1/2$ und $m_s = \pm 1/2$ ergibt sich daraus für die Anwendung der Leiteroperatoren \hat{S}_\pm auf die beiden Basiszustände $\chi_{1/2}(\sigma) = (1, 0)$ und $\chi_{-1/2}(\sigma) = (0, 1)$

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{K.15})$$

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{K.16})$$

$$\hat{S}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{K.17})$$

$$\hat{S}_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \quad (\text{K.18})$$

Folglich lassen sich die beiden Leiteroperatoren \hat{S}_\pm durch die folgenden Matrizen darstellen

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{K.19})$$

$$\hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{K.20})$$

Damit folgt für die beiden Operatoren \hat{S}_x und \hat{S}_y

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{K.21})$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{K.22})$$

und somit in Übereinstimmung mit (13.25) für σ_x und σ_y das folgende Resultat

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{K.23})$$

Anhang L

Notation, Symbole, Abkürzungen, Einheiten, Bezeichnungen und Konstanten

In diesem Kapitel gehen wir in einem ersten Teil auf die in diesem Buch verwendete Notation ein. Anschliessend folgen Übersichtstabellen zu den in diesem Buch verwendeten mathematischen Symbolen, Abkürzungen, physikalischen Einheiten, physikalischen Grössen und physikalischen Konstanten.

L.1 Notation

Bei der Notation wurde Wert darauf gelegt sich an die üblichen Regeln der Physikliteratur zu halten. Dennoch geben wir hier eine kurze Übersicht über ein paar allgemeine Punkte, die in diesem Buch berücksichtigt wurden.

1. Physikalische und mathematische Grössen

Als Schriftart für Text und Formeln wurde die Standardschrift CM in Latex gewählt, für Abbildungen Arial. Physikalische und mathematische Grössen wurden dabei *kursiv* dargestellt, physikalische Einheiten in normaler Schrift. Eine Ausnahme bilden jedoch die Abbildungen, wo einheitlich die normale Schrift verwendet wurde.

2. Winkel

Wie in der Literatur üblich dienen griechische Buchstaben zur Bezeichnung von Winkeln. Ausserdem ist zu bemerken, dass wenn nichts anderes angegeben ist Winkel immer in Radiant gemessen werden.

3. Vektoren

Alle vektoriellen Grössen (z.B. Kraft, Geschwindigkeit, elektrische Feldstärke, ...) wurden mit einem Pfeil versehen (\vec{F} , \vec{v} , \vec{E} , ...). Eine Ausnahme bilden wiederum die Abbildungen, in denen anstelle des Vektorpfeils die jeweilige Grösse **fett** dargestellt wurde. Vektorielle Grössen ohne Pfeil bzw. nicht **fett** stehen für den Betrag dieser Grösse.

4. Ableitung nach der Zeit

Ist eine physikalische Grösse mit einem oder zwei Punkten versehen, stehen diese für die erste bzw. zweite Ableitung nach der Zeit.

5. Wellenfunktionen

Innerhalb dieses Buchs treten diverse unterschiedliche Wellenfunktionen mit ebenfalls unterschiedlichen Bezeichnungen auf. Tab. L.1 gibt eine Übersicht. Da die Behandlung des Wasserstoffatoms ein zentrales Thema dieses Buchs darstellt, listen wir die Wellenfunktionen, welche in diesem Zusammenhang auftreten, separat auf.

6. Observablen - Operatoren - Messwerte

Sei F eine beliebige Observable, d.h. eine physikalische Messgrösse, dann wird der zugehörige Operator \hat{F} mit einem Dach versehen. Wird die Messgrösse gemessen, so wird der Messwert (Eigenwert von \hat{F}) mit F_0 bezeichnet.

7. Erwartungswert - Unschärfe

Der Erwartungswert und die Unschärfe einer beliebigen Observablen F ist gegeben durch $\langle F \rangle$ bzw. ΔF . Bezieht sich die Observable auf ein Teilchen im Zustand $\psi(x, t)$ wurde zum Teil die Bezeichnung mit dem Index ψ ergänzt um explizit darauf hinzuweisen, dass sowohl der Wert des Erwartungswerts als auch der Wert der Unschärfe vom jeweiligen Zustand abhängt, d.h. die Notation lautet dann $\langle F \rangle_\psi$ bzw. $(\Delta F)_\psi$.

8. Energie

Im Rahmen der Quantenmechanik, insbesondere im Zusammenhang mit der Schrödinger-Gleichung, ist es üblich die potentielle Energie mit dem Buchstaben V anstelle von der gängigen Schreibweise E_{pot} darzustellen. Zudem spricht man in diesem Kontext oft davon, dass sich ein Teilchen im Potential V bewege, meint jedoch damit, dass Teilchen besitzt die potentielle Energie V . In anderen Worten überall wo von Potential die Rede ist, ist eigentlich die potentielle Energie gemeint.

Zusätzlich gehen wir an dieser Stelle auf die Schreibweise der Energiewerte des Wasserstoffatoms ein. Grundsätzlich wird der Energiewert durch den Buchstaben E dargestellt, welcher durch die relevanten Quantenzahlen in Form eines Index ergänzt wird (z.B. E_n). Die Aufspaltung (Abstand) zwischen zwei Energiewerten wird mit Δ bezeichnet. Teilweise wird diese Bezeichnung noch mit einem zusätzlichen oberen oder unteren Index ergänzt. Im Rahmen der Behandlung der Feinstrukturaufspaltung (siehe Abschnitt 14.2) und des anomalen Zeeman-Effekts (siehe Abschnitt 14.3) treten diverse Korrekturterme in erster Ordnung (Rayleigh-Schrödinger-) Störungstheorie auf, welche mit $\Delta E^{(1)}$ bezeichnet werden. Ein zusätzlicher Index legt die Ursache für die Energiewertkorrektur fest (z.B. SB für Spin-Bahn-Kopplung). Allgemein ist zu bemerken, dass die Bezeichnung mit einem oberen Index semi ergänzt wurde, wenn die Bestimmung der entsprechenden Grösse innerhalb einer semiklassischen Betrachtung erfolgte.

Ausserdem weist ein oberer Index (1) darauf hin, dass die Herleitung der entsprechenden Grösse innerhalb erster Ordnung (Rayleigh-Schrödinger-) Störungstheorie erfolgte. Eine genau Übersicht über alle Bezeichnungen liefert Tab. L.2.

9. Quantenzahlen - Zustände

Die Zustände von Einelektronenatomen (z.B. des Wasserstoffatoms) werden durch Quantenzahlen in Kleinbuchstaben (n, s, l, j) beschrieben. Dabei gilt die Schreibweise (spektroskopische Notation) $n^{2s+1}l_j$. Ebenfalls verwendet man Quantenzahlen in Kleinbuchstaben (n, l, m_l, m_s) für die Zustände der einzelnen Elektronen im Schalenmodell für Mehrelektronenatome. Hingegen werden die Quantenzahlen, welche zu den Gesamtdrehimpulsen \vec{S} , \vec{L} und \vec{J} von Mehrelektronenatomen gehören, mit Grossbuchstaben dargestellt. Entsprechend lautet die spektroskopische Notation für Mehrelektronenatome $^{2S+1}L_J$ bzw. $n^{2S+1}L_J$ für Atome mit einem einzigen Elektron in der äussersten Unterschale.

L.2 Mathematische Symbole

Tab. L.3 gibt eine Übersicht über die im Buch verwendeten mathematischen Symbole.

L.3 Abkürzungen

Neben vielen gebräuchlichen Abkürzungen wie Abb. für Abbildung, Tab. für Tabelle, d.h. für das heisst, bzw. für beziehungsweise, z.B. für zum Beispiel, sin für Sinus, cos für Kosinus oder tan für Tangens, treten innerhalb dieses Buchs einige weitere Abkürzungen auf, die in der Tab. L.4 zusammengefasst und erklärt werden. Dabei ist zu bemerken, dass auf das Aufführen einiger Abkürzungen, welche in Form eines Index auftreten, verzichtet wurde. Dies aus zwei Gründen: Einerseits gehört der Index teilweise zur Bezeichnung einer physikalischen Grösse (z.B. der Index g bei der Gruppengeschwindigkeit \vec{v}_g) und andererseits treten die selben Indizes teilweise mit unterschiedlichen Bedeutungen auf.

L.4 Physikalische Einheiten

Im ganzen Buch werden die physikalischen Grössen in SI-Einheiten gemessen. Diese gliedern sich in Basiseinheiten (siehe Tab. L.5) und abgeleitete Einheiten (siehe Tab. L.6), welche sich durch die Basiseinheiten ausdrücken lassen. Tab. L.7 gibt zudem eine Übersicht über Zehnerpotenzen und den zugeordneten Abkürzungen und Vorsilben.

L.5 Physikalischen Grössen und deren Bezeichnung

In Tab. L.8 - L.12 sind die im Buch verwendeten physikalischen Grössen zusammen mit ihrem Symbol und ihrer physikalischen Einheit (SI-System) auf-

gelistet. Für die Energiebezeichnungen bei der Wärmestrahlung verweisen wir auf die Auflistung in Abschnitt 5.4.6, für die diversen Bezeichnungen der Wellenfunktionen auf Tab. L.1 und für die Energiewerte beim Wasserstoffatom auf Tab. L.2.

L.6 Physikalische Konstanten

In Tab. L.13 sind die in diesem Buch vorkommenden physikalischen Konstanten aufgelistet. Wie im ganzen Buch sind die Zahlenwerte im SI-Einheitensystem angegeben.

Name	Symbol
Impulsraum	$\phi(\mathbf{p}), \phi(\mathbf{p}, t)$
Mehrteilchen	$\psi(1, 2, \dots, n), \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t), \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t), \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$
Mehrteilchen, stationär	$u(\vec{r}_1, \vec{r}_2), u_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2), u_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$
Ortsraum	$\psi(x, t), \psi(x, y, z, t), \psi(r, \vartheta, \varphi, t), \varphi(x, t), \xi(x, t)$
Ortsraum, stationär	$u(x), u(x, y, z), u(r, \vartheta, \varphi)$
H-Atom, Grundmodell	$\psi_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi, t), u_{n,l,m_l}(r, \vartheta, \varphi)$
H-Atom, azimuthal	$\Phi_{m_l}(\varphi)$
H-Atom, polar	$\Theta_{l,m_l}(\vartheta)$
H-Atom, radial	$R_{n,l}(r)$
H-Atom, Spin	$\chi_{m_s}(\sigma)$
H-Atom, gesamt	$\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$
H-Atom, Eigenfunktion \hat{J}^2	$\Psi_{n,l,j,m_j}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$

Tab. L.1: Wellenfunktionen.

Symbol	Beschreibung
E_n	Energiewert des Wasserstoffatoms im quantenmechanischen Grundmodell
E_{n,m_l}^{semi}	Energiewert des Wasserstoffatoms mit Zeeman-Effekt (ohne Spin) im semiklassischen Modell
E_{n,m_l}	Energiewert des Wasserstoffatoms mit Zeeman-Effekt (ohne Spin) im quantenmechanischen Modell
E_{m_s}	Energiewert eines freien Elektrons mit Spin im Magnetfeld (Zeeman-Effekt)
$E_{n,l,j}^{\text{semi}}$	Energiewert des Wasserstoffatoms mit Spin-Bahn-Kopplung im zweiten semiklassischen Modell (siehe Abschnitt 14.2.4)
$E_{n,l,j}^{(1)}$	Energiewert des Wasserstoffatoms mit Spin-Bahn-Kopplung in erster Ordnung Störungstheorie
$E_{n,j}^{(1)}$	Energiewert des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen
$E_{n,l,j,m_j}^{(1)}$	Energiewert des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen und des anomalen Zeeman-Effekts
Δ	Aufspaltung (Abstand) der Energiewerte E_{n,m_l}
$\Delta^{(s)}$	Aufspaltung (Abstand) der Energiewerte E_{m_s}
$\Delta_{\text{SB}}^{\text{semi}}$	Aufspaltung (Abstand) der Energiewerte des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung im ersten semiklassischen Modell (siehe Abschnitt 14.1)
Δ_l^{semi}	Aufspaltung (Abstand) der Energiewerte $E_{n,l,j=l+1/2}^{\text{semi}}$ und $E_{n,l,j=l-1/2}^{\text{semi}}$ für $l > 0$
$E_{\text{SB}}^{\text{semi}}$	Korrekturterm zu E_n aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung im zweiten semiklassischen Modell (siehe Abschnitt 14.2.4)
$\Delta E_{\text{SB}}^{(1)}$	Korrekturterm zu E_n aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung in erster Ordnung Störungstheorie
$\Delta E_{\text{R}}^{(1)}$	Korrekturterm zu E_n aufgrund der relativistischen Korrektur in erster Ordnung Störungstheorie
$\Delta E_{\text{D}}^{(1)}$	Korrekturterm zu E_n aufgrund des Darwin-Terms in erster Ordnung Störungstheorie
$\Delta E_{\text{Z}}^{(1)}$	Korrekturterm zu E_n aufgrund des anomalen Zeeman-Effekts in erster Ordnung Störungstheorie

Tab. L.2: Übersicht über die diversen Energiebezeichnungen beim Wasserstoffatom.

Beschreibung	Symbol
Abrunden auf die nächstkleinere ganze Zahl	$\lfloor \dots \rfloor$
Adjungiert (Operator)	\dagger
Antikommutator	$\{ \dots, \dots \}$
Aufrunden auf die nächsthöhere ganze Zahl	$\lceil \dots \rceil$
Diracsche Deltafunktion (1D und 3D)	$\delta(x), \delta(\vec{r})$
Diracscher Deltaoperator (1D und 3D)	$\delta(\hat{x}), \delta^{(3)}(\hat{r})$
Gradient	$\vec{\nabla}$
Identisch (im Sinn einer Definition)	\equiv
Kommutator	$[\dots, \dots]$
Konjugiert komplex	*
Kronecker-Delta	$\delta_{i,j}$
Laplace-Operator	Δ
Menge der ganzen Zahlen	\mathbb{Z}
Menge der ganzen Zahlen ohne null	$\mathbb{Z} \setminus \{0\}$
Menge der komplexen Zahlen	\mathbb{C}
Menge der natürlichen Zahlen	\mathbb{N}
Menge der natürlichen Zahlen mit null	\mathbb{N}_0
Menge der reellen Zahlen	\mathbb{R}
Partielle Ableitung	∂
Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen	L^2

Tab. L.3: Mathematische Symbole.

Beschreibung	Abkürzung
Arkuskosinus	arccos
Arkustangens	arctan
Charge-Coupled-Device	CCD
Dimension	D (1D, 2D, 3D)
Elektronen in Abbildungen	e^-
Harmonischer Oszillator	HO
klassisch	kl
Kotangens	cot
Maximum	max
Medium (nicht im Vakuum)	med
Minimum	min
Partielle Integration	PI
Quantenmechanik	QM
semiklassisch	semi
Vakuum	vac

Tab. L.4: Abkürzungen.

Name	Symbol
Ampère	A
Kelvin	K
Kilogramm	kg
Meter	m
Mol	mol
Sekunde	s

Tab. L.5: Die Basiseinheiten des SI-Einheitensystems.

Name	Symbol	Abhängigkeit Basiseinheiten
Angström	Å	10^{-10} m
Coulomb	C	1 As
Elektronenvolt	eV	$1.602177 \cdot 10^{-19}$ J
Farad	F	$1 \text{ A}^2\text{s}^4 / (\text{kgm}^2)$
Hertz	Hz	1/s
Joule	J	$1 \text{ kgm}^2 / \text{s}^2$
Newton	N	$1 \text{ kgm} / \text{s}^2$
Ohm	Ω	$1 \text{ kgm}^2 / (\text{A}^2\text{s}^3)$
Pascal	Pa	$1 \text{ kg} / (\text{ms}^2)$
Siemens	S	$1 \text{ A}^2\text{s}^3 / (\text{kgm}^2)$
Tesla	T	$1 \text{ kg} / (\text{As}^2)$
Volt	V	$1 \text{ kgm}^2 / (\text{s}^3\text{A})$
Watt	W	$1 \text{ kgm}^2 / \text{s}^3$

Tab. L.6: Die abgeleiteten Einheiten des SI-Einheitensystems.

Zahl	Abkürzung	Vorsilbe
10^{-15}	f	Femto
10^{-12}	p	Piko
10^{-9}	n	Nano
10^{-6}	μ	Mikro
10^{-3}	m	Milli
10^{-2}	c	Zenti
10^{-1}	d	Dezi
10^1	da	Deka
10^2	h	Hekto
10^3	k	Kilo
10^6	M	Mega
10^9	G	Giga
10^{12}	T	Tera

Tab. L.7: Zehnerpotenzen und die zugeordneten Abkürzungen und Vorsilben.

Name	Symbol	Einheit
Absorptionskoeffizient	$A(\nu)$	1
Abstand Einzelspalte (Doppelspalt)	a	m
Arbeit	W	J, eV
Arbeit, Austritts-	$W, e\phi$	J, eV
Atommasse, relative	A_{rel}	kg/mol
Aufenthaltswahrscheinlichkeit	W	1
Auflösungsvermögen	$d, \Delta\varphi_{\text{min}}, \Delta x_{\text{min}}, \Delta\lambda_{\text{min}}, \Delta f_{\text{min}}$	m
Auslenkung einer Welle, Amplitude	U, A	m
Bahndrehimpuls	\vec{L}	kgm ² /s
Beschleunigung, Zentripetal-	a_Z	m/s ²
Besselfunktion, 1. Art	$J_n(x)$	1
Beweglichkeit, Mobilität	μ_e	m ² /(Vs)
Bildgrösse	B	m
Bildweite	b	m
Bose-Einstein-Verteilungsfunktion	$f(\nu)$	1
Brechungsindex	n	1
Breite, Gauss-Verteilung	a	m
Brennweite (Linse)	f	m
Dichte	ρ	kg/m ³
Dielektrizitätskonstante	ϵ	As/(Vm)
Dipolmoment, elektrisches	\vec{p}	Cm
Drehmoment	\vec{M}	Nm
Druck, Strahlungsdruck	p	Pa
Durchmesser	D, d	m
Einsteinscher A-Koeffizient	A_{ji}	1/s
Einsteinsche B-Koeffizienten	B_{ij}, B_{ji}	m/kg
Elastizitätsmodul	E	Pa
Elektrische Feldstärke	\vec{E}	V/m
Elektrische Flussdichte	\vec{D}	As/m ²
Emissivität	$\epsilon(T)$	1
Energie	E, ϵ	J, eV
Energie, kinetische	E_{kin}	J, eV
Energie, potentielle	E_{pot}	J, eV
Energieunschärfe	ΔE	J, eV
Entwicklungskoeffizienten	c_i	1
Erzeugungsoperator HO	\hat{b}^\dagger	1
Federkonstante	k	N/m
Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion	$P_{\text{FD}}(E)$	1
Fermi-Energie	E_{F}	J, eV
Finesse	F	1
Fläche	A	m ²
Fläche, aktive	df, dF	m ²

Tab. L.8: Physikalische Grössen mit Symbol und Einheit (SI-System) A - F.

Name	Symbol	Einheit
Fläche, Kreisring	dS	m^2
Flächennormale	\vec{n}	1
Foliendicke	D	m
Freier Spektralbereich (FSR)	Δf	Hz
Frequenz	ν, f	Hz
Frequenz, Larmor-	ω_L	Hz
Funktionen	$f(x, t), g(p, t)$	1
Gangunterschied	Δ	m
Gegenstandsgrösse	G	m
Gegenstandsweite	g	m
Gesamtdrehimpuls	\vec{J}	kgm^2/s
Gesamtdrehimpulsquantenzahl	j	1
Gesamtdrehimpulsquantenzahl, magnetische	m_j	1
Geschwindigkeit	\vec{v}	m/s
Geschwindigkeit, Gruppen-	\vec{v}_g	m/s
Geschwindigkeit, Phasen-	\vec{v}_{ph}	m/s
Gitterkonstante	a	m
Halbwertsbreite	δf	Hz
Hauptachse, grosse	a_n	m
Hauptachse, kleine	$b_{n,k}$	m
Hermite-Polynome	$H_n(x)$	1
Höhe	h	m
Impuls	\vec{p}	kgm/s
Impulsunschärfe	Δp	kgm/s
Intensität	$I, P/A$	W/m^2
Kernladungszahl / Ordnungszahl	Z	1
Koordinaten, kartesische	x, y, z	m
Koordinaten, Kugel-	r, ϑ, φ	m, 1, 1
Koordinaten, Proton	X, Y, Z	m
Koordinaten, Relativ-	x_r, y_r, z_r	m
Kraft	\vec{F}	N
Kraft, Coulomb-	F_C	N
Kraft, Lorentz-	F_L	N
Kraft, Rückstell-	F_k	N
Kraft, Zentripetal-	F_Z	N
Kreisfrequenz	ω	Hz
Kugelfunktionen	$Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi)$	1
Ladung	q	C
Ladungsdichteverteilung	$\rho(x, y, z)$	C/m^3
Laguerre-Polynome	$L_n(x), L_r(y)$	1
Laguerre-Polynome, zugeordnete	$L_n^m(x), L_r^s(y)$	1
Lande-Faktor	g_j	1

Tab. L.9: Physikalische Grössen mit Symbol und Einheit (SI-System) F - L.

Name	Symbol	Einheit
Länge	L	m
Legendre-Polynome	$P_l(x)$	1
Legendre-Polynome, zugeordnete	$P_l^{m_l}(x)$	1
Leistung	P	W
Leiteroperatoren, Spin-	\hat{S}_+, \hat{S}_-	kgm ² /s
Lorentzfaktor	γ	1
Magnetische Feldstärke	\vec{H}	A/m
Magnetische Flussdichte	\vec{B}	T
Magnetische Permeabilität	μ	Vs/Am
Magnetisches Moment	$\vec{\mu}$	Am ²
Magnetisches Moment, Neutron	$\vec{\mu}_p$	Am ²
Magnetisches Moment, Proton	$\vec{\mu}_n$	Am ²
Masse	m	kg
Masse, Elektronen-	m	kg
Masse, Kern-	M	kg
Masse, reduzierte	μ	kg
Massenzahl	A	1
Matrixelemente	$x_{\beta\alpha}, y_{\beta\alpha}, z_{\beta\alpha}$	m
Mittlere freie Weglänge	ℓ	m
Modendichte, spektrale	$g(\nu)$	Hz
Modenindex	j	1
Moden, Anzahl der	$G(\nu)$	1
Molmasse	M	kg/mol
Neutronenzahl	N	1
Normierungskonstanten	A, B, C, \dots	1
Numerische Apertur	NA	1
Optische Weglänge	OWL	m
Ortsunschärfe	Δx	m
Ortsvektor	\vec{r}	m
Pauli-Matrizen	$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	1
Periode	T	s
Potential, elektrisches	U, ϕ	V
Potential (= potentielle Energie)	V	J, eV
Potential, Coulomb-	$V_C(r)$	J, eV
Potential, Vektor-	\vec{A}	Vs/m
Poyntingvektor	\vec{S}	W/m ²
Produktwellenfunktion	$\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \vartheta, \varphi, \sigma, t)$	1
Quantenzahl, Bahndrehimpuls-	l	1
Quantenzahl, Haupt-	n	1
Quantenzahl, magnetische	m_l	1
Quantenzahl, zweite (Sommerfeld)	k	1
Quantenzahlen, Mehrelektronenatome	L, S, J	1

Tab. L.10: Physikalische Grössen mit Symbol und Einheit (SI-System) L - Q.

Name	Symbol	Einheit
Quantenzahloperator	\hat{n}	1
Radius	r	m
Radius, Airy-Scheibe	ρ_A	m
Radius, Bahn- (n-ter)	r_n	m
Radius, Kern-	R	m
Radius, Krümmungs-	R	m
Radius, Stoss-	R	m
Radius, Zyklotron-	r	m
Reflexionskoeffizient	$r, R(\nu)$	1
Reflexionsvermögen	R	1
Rydbergkonstante, korrigierte	R_{Kern}	1/m
Spaltbreite	d	m
Spaltfaktor	F	1
Spannung	U	V
Spektralterme	T_j	1/s
Spin	\vec{S}	kgm ² /s
Spin-Bahn-Kopplungskonstante	a_{SB}	J
Spinquantenzahl	s	1
Spinquantenzahl, magnetische	m_s	1
Spinvariable	σ	1
Spinwellenfunktion	$\chi(\sigma)$	1
Stossparameter	b	m
Strecke	s, d	m
Streukoeffizient, makroskopischer	α	1/m
Strom	I	A
Strukturfaktor	G	1
Teilchenanzahl	N	1
Teilchendichte	n	1/m ³
Teilchenfluss	$S_{\text{ein}}, S_{\text{trans}}$	m/s
Teilchenhäufigkeit	P	1
Temperatur	T	K
Transmissionsfunktion	$f(x, y), f(r, \varphi)$	1
Transmissionskoeffizient	t	1
Transmissionsvermögen	T	1
Transmissionswahrscheinlichkeit	T	1
Übergangswahrscheinlichkeit	$W_{\alpha \rightarrow \beta}$	1
Van der Waals-Konstanten	a, b	Pam ⁶ , m ³
Vernichtungsoperator HO	\hat{b}	1
Volumen	V	m ³
Wahrscheinlichkeit eines Messwerts F_i	w_i	1
Wahrscheinlichkeit, Stoss-	W	1
Wellenlänge	λ	m

Tab. L.11: Physikalische Grössen mit Symbol und Einheit (SI-System) S - W.

Name	Symbol	Einheit
Wellenvektor / -zahl	\vec{k}, k	1/m
Wellenzahl	$\bar{\nu}$	1/m
Winkel, Beugungs-	α	1
Winkel, Brewster-	ϑ_{iB}	1
Winkel, Einfalls-	ϑ_i	1
Winkel, Raum-	$d\Omega$	1
Winkel, Reflexions-	ϑ_r	1
Winkel, Streu-	ϑ	1
Winkel, Transmissions-, Ausfalls-	ϑ_t	1
Wirkungsquerschnitt	σ	m ²
Zeit	t	s
Zeitunschärfe	Δt	s

Tab. L.12: Physikalische Grössen mit Symbol und Einheit (SI-System) W - Z.

Name	Symbol	Zahlenwert und Einheit
Avogadro-Konstante	N_A	$6.02 \cdot 10^{23}$ 1/mol
Balmer-Konstante	G	$3.65 \cdot 10^{-10}$ m
Bohr-Magneton	μ_B	$9.27 \cdot 10^{-24}$ J/T
Bohrscher Radius	a_0	$5.29 \cdot 10^{-11}$ m
Boltzmann-Konstante	k_B	$1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K
Compton-Wellenlänge	λ_c	$2.43 \cdot 10^{-12}$ m
Elektrische Feldkonstante	ϵ_0	$8.85 \cdot 10^{-12}$ As/(Vm)
Elektronenmasse	m_e	$9.11 \cdot 10^{-31}$ kg
Elementarladung	e	$1.60 \cdot 10^{-19}$ C
Feinstrukturkonstante	α	$7.30 \cdot 10^{-3}$
Gyromagnetischer Faktor	g_0	2.00
Gyromagnetisches Verhältnis	$\gamma_{\text{Bahndrehimpuls}}$	$8.79 \cdot 10^{10}$ 1/(sT)
	γ_{Spin}	$1.76 \cdot 10^{11}$ 1/(sT)
Intensität der Sonne auf der Erde	I_{SE}	$1.37 \cdot 10^3$ W/m ²
Kernmagneton	μ_K	$5.05 \cdot 10^{-27}$ J/T
Lichtgeschwindigkeit (Vakuum)	c	$3.00 \cdot 10^8$ m/s
Magnetische Feldkonstante	μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7}$ Vs/(Am)
Mittlerer Abstand Sonne - Erde	r_{SE}	$150 \cdot 10^9$ m
Mittlerer Sonnenradius	r_S	$6.96 \cdot 10^8$ m
Plancksches Wirkungsquantum	h	$6.63 \cdot 10^{-34}$ Js
	$\hbar = h/(2\pi)$	$1.05 \cdot 10^{-34}$ Js
Protonenmasse	m_p	$1.67 \cdot 10^{-27}$ kg
Rydberg-Energie	E_R	13.6 eV
Rydberg-Konstante	R	$1.10 \cdot 10^7$ 1/m
Sonnentemperatur	T_S	$5.78 \cdot 10^3$ K
Stefan-Boltzmann-Konstante	σ	$5.67 \cdot 10^{-8}$ W/(m ² K ⁴)
Strahlungsleistung Sonne	P_S	$3.85 \cdot 10^{26}$ W
Universelle Gaskonstante	R	8.31 J/(molK)

Tab. L.13: Physikalische Konstanten mit Zahlenwert im SI-System. Wir geben hier die Zahlenwerte auf drei Ziffern genau an und verweisen für die nach heutigem Stand der Forschung genauen Werte auf die Homepage von NIST (National Institute of Standards and Technology): <http://physics.nist.gov/constants>.

Anhang M

Nobelpreisliste

Die Geschichte der Quantenmechanik, die wir in diesem Buch beschreiben, wurde von vielen berühmten Physikern geprägt. Die meisten von ihnen erhielten für ihre Verdienste den Nobelpreis in Physik oder Chemie verliehen. Die folgenden Tab. [M.1](#) - [M.3](#) geben eine Übersicht über alle Nobelpreisträger, die in diesem Buch erwähnt sind.

Einige dieser Nobelpreisträger haben an der ETH Zürich ihr Studium absolviert oder waren eine Zeit lang Professor oder Privatdozent. Eine Übersicht gibt Tab. [M.4](#). Ausserdem haben Hermann Amandus Schwarz (Schwarzsche Ungleichung, siehe [B.1](#)) und Walter Ritz (Ritzsches Kombinationsprinzip, siehe [8.1.3](#)) eine Verbindung zur ETH Zürich: Schwarz war Professor für Mathematik von 1869 - 1875 und Walter Ritz absolvierte sein Studium.

Name	Jahr	Begründung Preisvergabe
Aston, Francis William	1922	Für seine Entdeckung einer grossen Zahl von Isotopen in mehreren nicht radioaktiven Elementen mit Hilfe seines Massenspektrographen sowie für seine Entdeckung des so genannten Gesetzes der Ganzzahligkeit. (Nobelpreis in Chemie)
Binnig, Gerd	1986	Für ihre Konstruktion des Rastertunnelmikroskops.
Bohr, Niels	1922	Für seine Verdienste um die Erforschung der Struktur der Atome und der von ihnen ausgehenden Strahlung.
Born, Max	1954	Für seine grundlegenden Forschungen in der Quantenmechanik, besonders für seine statistische Interpretation der Wellenfunktion.
Boyle, Willard	2009	Für die Erfindung des CCD-Sensors.
Bragg, William Henry	1915	Für ihre Verdienste um die Erforschung der Kristallstrukturen mittels Röntgenstrahlen.
Bragg, William Lawrence	1915	Für ihre Verdienste um die Erforschung der Kristallstrukturen mittels Röntgenstrahlen.
Compton, Arthur Holly	1927	Für die Entdeckung des nach ihm genannten Effekts (Compton-Effekt).
Davisson, Clinton	1937	Für ihre experimentelle Entdeckung der Beugung von Elektronen durch Kristalle.
de Broglie, Louis	1929	Für die Entdeckung der Wellennatur der Elektronen (De-Broglie-Welle).
Debye, Peter	1936	Für seine Beiträge zu unserer Kenntnis der Molekularstrukturen durch seine Forschungen über Dipolmomente, über die Beugung von Röntgenstrahlen und an Elektronen in Gasen. (Nobelpreis in Chemie)
Dirac, Paul	1933	Für die Entdeckung neuer produktiver Formen der Atomtheorie (Weiterentwicklung der Quantenmechanik).
Einstein, Albert	1921	Für seine Verdienste um die theoretische Physik, besonders für seine Entdeckung des Gesetzes des photoelektrischen Effekts.

Tab. M.1: Nobelpreisträger für Physik oder Chemie, die in der Entwicklung der Quantenmechanik eine Rolle gespielt haben A - E.

Name	Jahr	Begründung Preisvergabe
Fermi, Enrico	1938	Für die Bestimmung von neuen, durch Neutronenbeschuss erzeugten radioaktiven Elementen und die in Verbindung mit diesen Arbeiten durchgeführte Entdeckung der durch langsame Neutronen ausgelösten Kernreaktionen.
Franck, James	1925	Für ihre Entdeckung der Gesetze, die bei dem Zusammenstoß eines Elektrons mit einem Atom herrschen (Franck-Hertz-Versuch).
Heisenberg, Werner	1932	Für die Begründung der Quantenmechanik, deren Anwendung zur Entdeckung der allotropen Formen des Wasserstoffs geführt hat.
Hertz, Gustav	1925	Für ihre Entdeckung der Gesetze, die bei dem Zusammenstoß eines Elektrons mit einem Atom herrschen (Franck-Hertz-Versuch).
Hofstadter, Robert	1961	Für seine bahnbrechenden Studien über elektrische Schwingungen im Atomkern und für die dabei erzielten Entdeckungen über die Struktur der Nukleonen.
Lenard, Philipp	1905	Für seine Arbeiten über die Kathodenstrahlen.
Lorentz, Hendrik Antoon	1902	Als Anerkennung des ausserordentlichen Verdienstes, den sie sich durch ihre Untersuchungen über den Einfluss des Magnetismus auf die Strahlungsphänomene erworben haben (Aufspaltung von Spektrallinien im Magnetfeld, Zeeman-Effekt).
Michelson, Albert Abraham	1907	Für seine optischen Präzisionsinstrumente und seine damit ausgeführten spektroskopischen und metrologischen Untersuchungen (Michelson-Interferometer).
Pauli, Wolfgang	1945	Für die Entdeckung des als Pauli-Prinzip bezeichneten Ausschlussprinzips.
Planck, Max	1918	Als Anerkennung des Verdienstes, den er sich durch seine Quantentheorie um die Entwicklung der Physik erworben hat (Theorie der Quantisierung).

Tab. M.2: Nobelpreisträger für Physik oder Chemie, die in der Entwicklung der Quantenmechanik eine Rolle gespielt haben F - P.

Name	Jahr	Begründung Preisvergabe
Rayleigh, John William Strutt	1904	Für seine Untersuchungen über die Dichte der wichtigsten Gase und seine im Zusammenhang damit gemachten Entdeckung des Argons.
Rohrer, Heinrich	1986	Für ihre Konstruktion des Rastertunnelmikroskops.
Röntgen, Wilhelm	1901	Als Anerkennung des ausserordentlichen Verdienstes, den er sich durch die Entdeckung der nach ihm benannten Strahlen erworben hat.
Rutherford, Ernest	1908	Für seine Untersuchungen über den Zerfall der Elemente und die Chemie der radioaktiven Stoffe. (Nobelpreis in Chemie)
Schrödinger, Erwin	1933	Für die Entdeckung neuer produktiver Formen der Atomtheorie (Weiterentwicklung der Quantenmechanik).
Smith, George Elwood	2009	Für die Erfindung des CCD-Sensors.
Stern, Otto	1943	Für seine Beiträge zur Entwicklung der Molekularstrahlmethode und die Entdeckung des magnetischen Moments des Protons.
Thomson, George Paget	1937	Für ihre experimentelle Entdeckung der Beugung von Elektronen durch Kristalle.
Thomson, Joseph John	1906	Als Anerkennung des grossen Verdienstes, den er sich durch seine theoretischen und experimentellen Untersuchungen über den Durchgang der Elektrizität durch Gase erworben hat.
Wien, Wilhelm	1911	Für seine Entdeckungen betreffend der Gesetze der Wärmestrahlung (Wiensches Verschiebungsgesetz).
Zeeman, Pieter	1902	Als Anerkennung des ausserordentlichen Verdienstes, den sie sich durch ihre Untersuchungen über den Einfluss des Magnetismus auf die Strahlungsphänomene erworben haben (Aufspaltung von Spektrallinien im Magnetfeld, Zeeman-Effekt).

Tab. M.3: Nobelpreisträger für Physik oder Chemie, die in der Entwicklung der Quantenmechanik eine Rolle gespielt haben R - Z.

Name	Verbindung zur ETH Zürich
Debye, Peter	Professor 1920 - 1927
Einstein, Albert	Studium 1896 -1900, Professor 1912 - 1914
Pauli, Wolfgang	Professor 1928 - 1958
Rohrer, Heinrich	Studium 1951 - 1955
Röntgen, Wilhelm	Studium 1865 - 1868
Stern, Otto	Privatdozent 1913 - 1915

Tab. M.4: Nobelpreisträger für Physik oder Chemie, die eine Verbindung zur ETH Zürich haben.

Literaturverzeichnis

- [1] E. Hecht, *Optics*, Pearson Education, 2008.
- [2] J. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, de Gruyter, Berlin, 2006.
- [3] A. Compton, Phys. Rev. **21**, 483 (1923).
- [4] http://www.satgeo.de/satgeo/quicklooks/methoden/fe_physik.htm, 27.10.2010.
- [5] <http://de.wikipedia.org/wiki/sonne>, 27.10.2010.
- [6] <http://de.wikipedia.org/wiki/sonnenradius>, 27.10.2010.
- [7] <http://de.wikipedia.org/wiki/emissionsgrad>, 27.10.2010.
- [8] <http://www.periodensystem.info/download/>, 22.02.2011.
- [9] H. Haken and H. Wolf, *Atom- und Quantenphysik, Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2004.
- [10] <http://www2.selu.edu/academics/faculty/delbers/emission-spectra-1.jpg>, 14.01.2011.
- [11] F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I), Eine Einführung*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2002.
- [12] A. Goldberg, H.M. Schey, and J.L. Schwartz, American Journal of Physics **35**, 177 (1967).