

Schummelseite – Quantenphysik für Dummies

Der Hamilton-Operator

Eine der wichtigsten Aufgaben der Quantenmechanik ist die Berechnung der Energieniveaus eines Systems. Der Energie-Operator, der auch Hamilton-Operator genannt wird, liefert die Gesamtenergie. Das Auffinden der Energieniveaus eines Systems reduziert sich darauf, die Eigenwerte folgender Gleichung zu finden:

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

In Matrixform lautet diese Gleichung:

$$\det \begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & H_{14} & \dots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & H_{24} & \dots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & H_{34} & \dots \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} - E & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = 0$$

$$H\psi(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Die Heisenberg'sche Unschärferelation besagt: Je genauer man den Ort eines Teilchens kennt, desto weniger genau kennt man seinen Impuls und umgekehrt. In x-Richtung sieht das zum Beispiel wie folgt aus:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

wobei Δx die Meßunschärfe der Position eines Teilchens in x-Richtung ist, Δp_x die Unschärfe des Impulses in x-Richtung und $\hbar = \hbar/2\pi$.

Dies gilt für alle drei Richtungen:

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Die Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung beschreibt die Energien und wahrscheinlichen Aufenthaltsorte von Elektronen. Die Quantenphysik in diesem Buch beschäftigt sich vor allem damit, diese Differentialgleichung für verschiedene Potentiale $V(r)$ zu lösen:

$$H\psi(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r)$$

Die Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + V_x(x) X(x) = E_x X(x)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) + V_y(y) Y(y) = E_y Y(y)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) + V_z(z) Z(z) = E_z Z(z)$$

Spin-Operatoren und ihre Kommutatoren

Die Kommutatoren-Beziehungen für die Operatoren des Drehimpulses L_x , L_y und L_z lauten wie folgt:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Zu allen Drehimpulsoperatoren wie etwa L_x , L_y und L_z gibt es analoge Spinoperatoren: S_x , S_y und S_z . Die Kommutatoren-Beziehungen lauten entsprechend:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x$$

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

Der Compton-Effekt

Wenn das Licht durch Photonen der Energie $E = h\nu$ und dem Impuls $p = E/c$ dargestellt wird, lautet die Beziehung für die Wellenlängenverschiebung beim Compton-Effekt:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

Dabei ist h die Planck'sche Konstante ($6,6256 \times 10^{-34}$ Js), m_e die Masse eines Elektrons ($9,11 \times 10^{-31}$ kg), c die Lichtgeschwindigkeit ($2,998 \times 10^8$ m/s) und θ der Streuwinkel.

Manchmal wird diese Gleichung auch wie folgt geschrieben:

$$\Delta\lambda = 4\pi\lambda_c \sin^2(\theta/2)$$

Steven Holzner

Quantenphysik für Dummies

*Übersetzung aus dem Amerikanischen von
Dr. Regine Freudenstein unter Mitarbeit von Dr. Wilhelm Kulisch*

Fachkorrektur von Bernhard Gerl



WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen
Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über
<http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Auflage 2012

© 2012 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

Original English language edition Quantum Physics for Dummies Copyright

© 2009 by Wiley Publishing, Inc., Indianapolis, Indiana.

All rights reserved including the right of reproduction in whole or in part in any form.
This E-Book published under license with the original publisher John Wiley and Sons, Inc.

Copyright der englischsprachigen Originalausgabe Quantum Physics for Dummies
© 2009 by Wiley Publishing, Inc., Indianapolis, Indiana.

Alle Rechte vorbehalten inklusive des Rechtes auf Reproduktion im Ganzen oder in
Teilen und in jeglicher Form. Dieses E-Book wird mit Genehmigung des Original-Verlages John
Wiley and Sons, Inc. publiziert.

Wiley, the Wiley logo, Für Dummies, the Dummies Man logo, and related trademarks and
trade dress are trademarks or registered trademarks of John Wiley & Sons, Inc. and/or its
affiliates, in the United States and other countries. Used by permission.

Wiley, die Bezeichnung »Für Dummies«, das Dummies-Mann-Logo und darauf bezogene
Gestaltungen sind Marken oder eingetragene Marken von John Wiley & Sons, Inc., USA,
Deutschland und in anderen Ländern.

Das vorliegende Werk wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren und
Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie eventuelle
Druckfehler keine Haftung.

Korrektur: Bernhard Gerl

Coverbild: fotolia/Anja Kaiser

ePub ISBN 978-3-527-66800-7
ePDF ISBN 978-3-527-66799-4
mobi ISBN 978-3-527-66801-4

Über den Autor

Steven Holzner ist preisgekrönter Autor wissenschaftlicher und technischer Bücher (zum Beispiel *Physik für Dummies* und *Differentialgleichungen für Dummies*). Er studierte Physik am Massachusetts Institute for Technology (MIT) und promovierte an der Cornell University. Er unterrichtete mehr als zehn Jahre lang an der Cornell und an Unternehmen überall in den Vereinigten Staaten.

Danksagung

Ich möchte ganz besonders den Leuten von Wiley danken: Tracy Boggier, Tim Gallan und Danielle Voirol.

Widmung

Für Nancy natürlich.

Über die Übersetzer

Dr. Regine Freudenstein studierte Physik in Göttingen, Hannover und Kassel. Sie promovierte mit einer Arbeit über nanokristalline Schichten aus superhartem kubischen Bornitrid; ihr Spezialgebiet ist die Abscheidung, Charakterisierung und Anwendung von Nano-Schichten mit herausragenden mechanischen Eigenschaften.

Dr. Wilhelm Kulisch ist Privatdozent für Experimentalphysik an der Universität Kassel. Er studierte Physik in Münster und Kassel und war lange am Institut für Nanostrukturtechnologie und Analytik in Kassel im Bereich der Dünnschichttechnologie tätig. Er arbeitete unter anderem an Nanoschichten für Computerchips, nanokristallinen superharten Materialien, Schichten mit molekularem Design sowie Nano-Beschichtungen für künstliche Gelenke. Derzeit ist er an Nanodiamant und Kohlenstoff-Nanoröhrchen für biomedizinische Anwendungen interessiert.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Über dieses Buch

Festlegungen in diesem Buch

Einige törichte Annahmen

Aufbau dieses Buches

Teil I: Ist die Welt nicht klein? Die Grundlagen

Teil II: Gebunden, aber unbestimmt: Teilchen in gebundenen Zuständen

Teil III: Schwindlig werden mit Drehimpuls und Spin

Teil IV: Die Quantenphysik wird dreidimensional

Teil V: Gruppendynamik mit vielen Teilchen

Teil VI: Der Top-Ten-Teil

Symbole in diesem Buch

Nun kann es losgehen!

Teil I Ist die Welt nicht klein? Die Grundlagen

Kapitel 1

Entdeckungen und wesentliche Grundlagen der Quantenphysik

Diskret werden: Der Ärger mit der Strahlung schwarzer Körper

Der erste Versuch: Das Wien'sche Gesetz

Der zweite Versuch: Das Rayleigh-Jeans-Gesetz

Ein intuitiver (Quanten-)Sprung: Das Planck'sche Spektrum

Stück für Stück: Licht als Teilchen

Die Erklärung des photoelektrischen Effektes

Streuung von Licht an Elektronen: Der Compton-Effekt

Das Positron als Beweis? Dirac und die Paarerzeugung

Eine doppelte Identität: Die Wellennatur von Teilchen

Man kann nicht alles wissen (aber die Wahrscheinlichkeiten berechnen)

Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Die Würfel rollen: Quantenphysik und Wahrscheinlichkeiten

Kapitel 2

Nicht immer einfach: Die Quantenmechanik

Was ist Quantenphysik?

Die Schrödinger-Gleichung und die Wellenfunktion

Zustände und Wahrscheinlichkeiten in der Quantenphysik

Die Darstellungsweise

Die Lösung quantenmechanischer Probleme

Welche Größe kann man bestimmen?

Wie geht man bei der Lösung eines quantenmechanischen Problems vor?

Die Quantenmechanik und die folgenden Kapitel

Teil I: Ist die Welt nicht klein? Die Grundlagen

Teil II: Gebunden, aber unbestimmt: Teilchen in gebundenen Zuständen

Teil III: Alles dreht sich um Drehimpulse und Spin

Teil IV: Die Quantenphysik wird dreidimensional

Teil V: Komplexe Systeme

Kapitel 3

In die Matrix überführen: Was sind Zustandsvektoren?

Vektoren im Hilbert-Raum erstellen

Mit der Dirac-Schreibweise das Leben vereinfachen

Verkürzte Schreibweise durch Ket-Vektoren

Den hermitesch Konjugierten als Bra-Vektor schreiben

Bras und Kets miteinander multiplizieren: Eine Wahrscheinlichkeit von 1

Nicht an eine Basis gebundene Zustandsvektoren: Bras und Kets

Rechenregeln in der Ket-Schreibweise

Sie bringen die Physik in's Spiel: Operatoren

Arbeiten mit Operatoren

In großer Erwartung: Erwartungswerte bestimmen

Lineare Operatoren

Hermiteische Operatoren und ihre Adjungierten

Vorwärts und Rückwärts: Kommutatoren bestimmen

Kommutieren der Operatoren

Anti-hermitesche Operatoren

Bei Null starten und bei Heisenberg enden

Eigenvektoren und Eigenwerte: Natürlich sind sie eigenartig!

Verstehen, wie sie funktionieren

Eigenvektoren und Eigenwerte bestimmen

Auf das Gegenteil vorbereitet sein: Vereinfachung durch unitäre Operatoren

Vergleich zwischen Matrix- und kontinuierlicher Darstellung

Mit der Differentialrechnung zu einer kontinuierlichen Basis

Jetzt kommen die Wellen

Teil II Gebunden, aber unbestimmt: Teilchen in gebundenen Zuständen

Kapitel 4

Gefangen in Potentialtöpfen

In einen Potentialtopf schauen

Teilchen in Potentialtöpfen einschließen

Gebundene Teilchen in Potentialtöpfen

Aus Potentialtöpfen entkommen

Gebundene Teilchen in unendlichen rechteckigen Potentialtöpfen

Berechnung der Wellenfunktionen

Bestimmung der Energieniveaus

Die Normalisierung der Wellenfunktion

Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion

Der Übergang zu symmetrischen rechteckigen Potentialtöpfen

Begrenztes Potential: Einen Blick auf Teilchen und Potentialstufen

Angenommen, das Teilchen hat genügend Energie

Angenommen, das Teilchen hat nicht genug Energie

Gegen die Wand stoßen: Teilchen und Potentialbarrieren

Überwinden der Potentialbarriere mit $E > V_0$

Überwinden der Potentialbarriere – auch mit $E < V_0$

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ungebundene Teilchen

Ein physikalisches Teilchen mit einem Wellenpaket beschreiben

Ein Gauss'sches Beispiel

Das Wichtigste von Kapitel 4 noch einmal in Kürze

Kapitel 5

Hin und her mit harmonischen Oszillatoren

Die Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator

Der klassische harmonische Oszillator

Die Gesamtenergie in der Quanten-Schwingung

Algebraische Hilfsmittel

Einfluss der Leiteroperatoren auf die Eigenzustände des harmonischen Oszillators

Direkte Verwendung von a und $a^\dagger$

Die Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators bestimmen

Berechnung der Eigenfunktionen

Darstellung der Wellenfunktion anhand der Hermite'schen Polynome

Ein paar Zahlen einsetzen

Die Operatoren des harmonischen Oszillators als Matrizen

Der klassische und der quantenmechanische harmonische Oszillator

Das Wichtigste von Kapitel 5 noch einmal in Kürze

Teil III Alles dreht sich um Drehimpulse und Spin

Kapitel 6

Arbeiten mit dem Drehimpuls auf Quantenniveau

Mit dem Drehimpuls im Kreis herum

Die Kommutatoren von L_x , L_y und L_z bestimmen

Die Eigenzustände des Drehimpulses bestimmen

Die Eigenwerte des Drehimpulses bestimmen

Zustandsgleichungen mit $\beta_{\max}$ und $\beta_{\min}$ herleiten

Die Rotationsenergie eines zweiatomigen Moleküls

Die Eigenwerte der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bestimmen

Drehimpuls und Matrix-Darstellung

Das Ganze abrunden: Übergang zu Kugelkoordinaten

Die Eigenfunktionen von L_z in Kugelkoordinaten

Die Eigenfunktionen von L^2 in Kugelkoordinaten

Das wichtigste von Kapitel 6 noch einmal in Kürze

Kapitel 7

Mit Spin schwindlig werden

Der Stern-Gerlach-Versuch und der fehlende Strahl

Der Spin und die Eigenzustände

Halbe und Ganze: Fermionen und Bosonen

Spinoperatoren: Bewegungen mit Drehimpuls

Spin $1/2$ -Teilchen und Pauli-Matrizen

Spin $1/2$ -Matrizen

Pauli-Spinmatritzen

Das wichtigste von Kapitel 7 noch einmal in Kürze

Teil IV Die Quantenphysik wird dreidimensional

Kapitel 8

Rechtwinklige Koordinaten: Lösen von Problemen in drei Dimensionen

Die Schrödinger-Gleichung: Jetzt in 3D-Qualität!

Freie Teilchen im Dreidimensionalen

Die Gleichungen für x, y und z

Bestimmung der Gesamtenergie

Zeitabhängigkeit führt zu einer physikalischen Lösung

Dreidimensionale rechtwinklige Potentiale

Die Energieniveaus bestimmen

Die Wellenfunktion normalisieren

Würfelförmiges Potential

Der dreidimensionale harmonische Oszillator

Das wichtigste von Kapitel 8 noch einmal in Kürze

Kapitel 9

Probleme in drei Dimensionen: Kugelkoordinaten

Zentralpotentiale im Dreidimensionalen

Die Schrödinger-Gleichung zerlegen

Der winkelabhängige Teil von $\psi(r, \theta, \phi)$

Der radiale Teil von $\psi(r, \theta, \phi)$

Freie Teilchen im Dreidimensionalen in Kugelkoordinaten

Die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen

Näherungen für große und kleine ρ

Das sphärisch symmetrische Kastenpotential

Innerhalb des Potentialtopfes: $0 < r < a$

Außerhalb des Potentialtopfes: $r > a$

Der isotrope harmonische Oszillator

Das wichtigste von Kapitel 9 noch einmal in Kürze

Kapitel 10

Wasserstoffatome verstehen

Die Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom

Vereinfachung und Aufspaltung der Schrödinger-Gleichung für Wasserstoff

Die Lösung für $\psi(R)$

Die Lösung für $\psi(r)$

Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für kleine r

Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für große r

Zusammenfügen der Lösungen für die Radialgleichung

Die Funktion $f(r)$ endlich machen

Bestimmung der erlaubten Energien des Wasserstoffatoms

Die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung

Wellenfunktionen des Wasserstoffs

Die Energieentartung beim Wasserstoffatom

Quantenzustände mit Spin

Linien führen zu Orbitalen

Das Elektron ist schwer zu fassen

Das wichtigste von Kapitel 10 noch einmal in Kürze

Teil V Gruppendynamik mit vielen Teilchen

Kapitel 11

Viele identische Teilchen

Viel-Teilchen-Systeme im Allgemeinen

Wellenfunktionen und Hamilton-Operatoren

Nobelpreiswürdig: Nachdenken über Viel-Elektronen-Atome

Ein hilfreiches Werkzeug: Austauschsymmetrie

Die Ordnung zählt: Teilchen mit dem Austauschoperator vertauschen

Einteilung in symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen

Systeme mit vielen unterscheidbaren Teilchen

Mit vielen identischen Teilchen jonglieren

Die Identität verlieren

Symmetrie und Antisymmetrie

Austausch-Entartung: Der gleichbleibende Hamilton-Operator

Zusammengesetzte Teilchen und ihre Symmetrie

Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen

Identische nicht wechselwirkende Teilchen

Wellenfunktionen in Zwei-Teilchen-Systemen

Wellenfunktionen für Drei-Teilchen-oder-mehr-Systeme

Nicht für Alle ist Platz: Das Pauli-Prinzip

Das Periodensystem der Elemente

Das Wichtigste von Kapitel 11 noch einmal in Kürze

Kapitel 12

Näherungsmethode: Störungstheorie

Die zeitunabhängige Störungstheorie

Störungstheorie für nicht entartete Ausgangszustände

Eine kleine Entwicklung: Störung der Gleichungen

Anpassen der Koeffizienten von λ und Vereinfachung

Die Korrekturen erster Ordnung bestimmen

Die Korrekturen zweiter Ordnung

Die Störungstheorie im Test: Harmonische Oszillatoren in elektrischen Feldern

Exakte Lösungen berechnen

Störungstheorie anwenden

Störungstheorie für entartete Hamilton-Operatoren

Test der entarteten Störungstheorie: Wasserstoff in elektrischen Feldern

Das Wichtigste von Kapitel 12 noch einmal in Kürze

Kapitel 13

Peng-Peng: Streutheorie

Teilchenstreuung und Wirkungsquerschnitt

Wechsel zwischen Schwerpunktsystem und Laborsystem

Die Streuung beschreiben

Die Streuwinkel umrechnen

Die Wirkungsquerschnitte umrechnen

Teilchen gleicher Masse im Laborsystem

Die Streuamplitude von spinlosen Teilchen

Die Wellenfunktion des einfallenden Teilchens

Die Wellenfunktion des gestreuten Teilchens

Der Zusammenhang zwischen Streuamplitude und differentiellern Wirkungsquerschnitt

Bestimmung der Streuamplitude

Die Born'sche Näherung: Die Rettung der Wellengleichung

Die Wellenfunktion bei großen Abständen

Anwendung der ersten Born'schen Näherung

Mit der Born'schen Näherung rechnen

Das Wichtigste von Kapitel 13 noch einmal in Kürze

Teil VI Der Top-Ten-Teil

Kapitel 14

Zehn Webseiten zur Quantenphysik

Elektronen und Photonen aus Ulm

Quanten.de-Portal

Joachims Quantenwelt

Visual Quantum Mechanics

HydrogenLab

MILQ

Multimediaphysik

Quantum Mechanics Tutorial

An Introduction to Quantum Mechanics

HyperPhysics

Kapitel 15

Zehn Highlights der Quantenphysik

Welle-Teilchen-Dualismus

Der photoelektrische Effekt

Entdeckung des Spins

Unterschiede zwischen den Newton'schen Gesetzen und der Quantenphysik

Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Der Tunneleffekt

Diskrete Atomspektren

Der harmonische Oszillator

Potentialtöpfe

Schrödingers Katze

Glossar

Stichwortverzeichnis

Einleitung

Die Physik kennt im Allgemeinen keine Grenzen, sie beschäftigt sich sowohl mit ungeheuer großen (z. B. Galaxien) als auch mit winzig kleinen Objekten (z. B. Atomen, aber auch noch kleineren Teilchen). Dieses Buch handelt von den sehr kleinen Teilchen – das ist das Reich der Quantenphysik. Wenn man irgendwelche Größen *quantisieren* kann, ist eine weitere Unterteilung in kleinere Einheiten nicht möglich, dann handelt es sich um unteilbare (diskrete) Einheiten.

Die klassische Physik kann sehr erfolgreich Vorgänge erklären wie das Erwärmen von Kaffee-tassen, das Herunterrutschen verschiedener Körper auf schiefen Ebenen, Zusammenstöße von Autos und Tausende anderer ähnlicher Phänomene. Aber bei sehr kleinen Objekten treten Probleme auf. Die Quantenphysik beschäftigt sich mit dieser Mikrowelt kleiner Objekte, wie etwa mit einzelnen Elektronen und ihren Bewegungen. Es stellt sich heraus, dass Elektronen sowohl Teilchen- als auch Welleneigenschaften besitzen, was Physiker früher sehr verunsichert hat. Man benötigt die Quantenphysik, um diese Erscheinungen zu verstehen.

Die Quantenphysik hat zudem das Unschärfeprinzip eingeführt, das besagt, dass man nicht gleichzeitig den Ort und den Impuls eines Teilchens genau bestimmen kann. Sie ist zugleich in der Lage, die Energieniveaus von Elektronen, die an ein Atom gebunden sind, zu berechnen. Quantenphysik ist notwendig, wenn man die Realität im Bereich sehr kleiner Objekte verstehen will. Von diesen Themen handelt dieses Buch.

Über dieses Buch

Da Unschärfen und Wahrscheinlichkeiten für die Quantenphysik äußerst wichtig sind, ist es notwendig, bei ihrer Behandlung auch die Differentialrechnung zu verwenden. In diesem Buch werden alle notwendigen Konzepte entwickelt. Allerdings macht es keinen Gebrauch von Gedankenexperimenten, die sich mit Katzen oder parallelen Universen beschäftigen. Vielmehr liegt der Schwerpunkt des Buches auf der Mathematik, die notwendig ist, um die Quantenwelt zu beschreiben.

Ich habe mehrere Tausend Studenten auf Universitätsniveau in Physik unterrichtet. Daher kenne ich auch die häufigste Klage dieser Studenten: Womit habe ich das verdient?

Quantenphysik für Dummies entspricht in etwa dem Niveau von einführenden Oberstufen- oder Hochschulkursen, aber das Buch unterscheidet sich von üblichen Lehrbüchern. Es wurde nicht aus der Sicht eines Physikers oder eines Professors geschrieben, sondern aus der Sicht der Leser. Mit anderen Worten, dieses Buch enthält all das, was man wissen sollte, aber nicht mehr. Darüber hinaus versuche ich zu vermitteln, wie Lehrer und Professoren vorgehen, um Probleme einfach erscheinen zu lassen.

Ich empfehle, dieses Buch vom Anfang bis zum Ende zu lesen, aber es ist natürlich auch möglich, sich besonders mit den Themen zu beschäftigen, die einen persönlich interessieren. Wie jedes *Für-Dummies*-Buch gibt auch dieses dem Leser alle Freiheiten. Man kann die Kapitel in jeder beliebigen Reihenfolge lesen. Dieses Buch wurde für Sie gemacht, und Sie dürfen sich aus dieser Schatzkiste der Quantenphysik bedienen, wie Sie wollen.

Festlegungen in diesem Buch

Es gibt viele Bücher, für die man ein Dutzend oder mehr verwirrende Festlegungen lernen muss, bevor man überhaupt mit dem Lesen beginnen kann. Dies ist hier nicht der Fall. Sie brauchen nur das Folgende zu wissen:

- ✓ Alle neuen Ausdrücke sind, wenn sie zum erstenmal erscheinen, *kursiv* gedruckt. Normalerweise folgt anschließend ihre Definition.
- ✓ Vektoren – also Größen, die sowohl einen Betrag als auch eine Richtung besitzen – sind **fett** gedruckt, zum Beispiel **B**.
- ✓ Internet-Adressen sind in Lucida Console gedruckt.

Einige t6richte Annahmen

Ich gehe davon aus, dass Sie nichts oder kaum etwas 6ber Quantenphysik wissen, wenn Sie dieses Buch lesen. Allerdings gehe ich von den folgenden Annahmen aus:

✓ Sie h6ren derzeit Unterricht oder eine Vorlesung 6ber Quantenphysik, oder Sie sind ganz allgemein daran interessiert, wie die Mathematik Bewegung und Energien im atomaren oder subatomaren Bereich beschreibt.

✓ Sie haben mathematische Vorkenntnisse, insbesondere im Bereich der Differentialrechnung. Sie m6ssen kein Profi sein, aber Sie sollten wissen, wie man integriert und Differentialgleichungen l6st. Im Idealfall kennen Sie sich sogar im Hilbertraum aus.

✓ Sie verf6gen 6ber physikalische Grundkenntnisse. Sie haben Physik in der Oberstufe oder im Grundkurs an der Universit6t geh6rt (oder aber *Physik f6r Dummies* gelesen und verstanden).

Aufbau dieses Buches

Die Quantenphysik – die Beschäftigung mit sehr kleinen Objekten – ist interessanterweise äußerst umfangreich. Deshalb wird sie üblicherweise in eine Reihe von Teilgebieten unterteilt. Dementsprechend besteht dieses Buch aus den folgenden Teilen:

Teil I: Ist die Welt nicht klein? Die Grundlagen

Teil I ist der Start der Reise in die Quantenwelt und bietet einen guten Überblick über die Themen der Quantenphysik. Die Quantenphysik wird vorgestellt, ihre Möglichkeiten aufgezeigt und dargestellt, welche Problemstellungen sie lösen kann. Sie werden außerdem mit der für den Rest des Buches notwendigen Mathematik vertraut gemacht, etwa mit Zustandsvektoren und dem Umgang mit Quantenmatrizen. Wenn Sie diese Grundlagen beherrschen, sind Sie für den Rest des Buches vorbereitet.

Teil II: Gebunden, aber unbestimmt: Teilchen in gebundenen Zuständen

Teilchen können innerhalb eines Potentials gefangen sein; zum Beispiel können Elektronen in einem Atom gebunden sein. Die Quantenphysik kann die Energieniveaus von Teilchen in verschiedenen Potentialen hervorragend bestimmen; davon handelt Teil II. Sie werden unter anderem lernen, Teilchen zu beschreiben, die in Potentialtöpfen und harmonischen Oszillatoren gebunden sind.

Teil III: Schwindlig werden mit Drehimpuls und Spin

Die Quantenphysik benutzt auch in der Mikrowelt Größen wie den Drehimpuls von Teilchen oder den Spin von Elektronen. Viele berühmte Experimente – wie etwa der Stern-Gerlach-Versuch, bei dem Teilchenstrahlen in Magnetfeldern aufgespalten werden – kann man nur auf der Grundlage der Quantenphysik verstehen. Alle Einzelheiten werden in diesem Teil vorgestellt.

Teil IV: Die Quantenphysik wird dreidimensional

Die quantenphysikalischen Aufgabenstellungen in den ersten drei Teilen wurden eindimensional behandelt, um ihre Lösungen verständlicher zu machen. Im Teil IV werden dreidimensionale Aufgaben vorgestellt, sowohl im kartesischen (rechtwinkligen) als auch im Kugelkoordinatensystem. Dieser Übergang $1D \rightarrow 3D$ erlaubt eine viel bessere Beschreibung der wirklichen Welt. Ein Paradebeispiel dafür ist die vollständige quantenmechanische Beschreibung des Wasserstoffatoms in Kapitel 10.

Teil V: Gruppendynamik mit vielen Teilchen

Dieser Teil behandelt Vielteilchensysteme wie etwa Atome oder Gase. Sie werden lernen, wie sich viele Elektronen in einem Atom verhalten, wie Teilchen miteinander wechselwirken und wie Teilchen an anderen Teilchen gestreut werden können.

Vielteilchenprobleme stellen einen weiteren Schritt in der Annäherung an die wirkliche Welt dar, denn eigentlich haben Systeme mit nur einem Teilchen nicht viel mit dieser Welt zu tun, die aus vielen, vielen Myriaden von Teilchen aufgebaut ist. Teil V handelt davon, wie die Quantenphysik diese Vielteilchenprobleme handhabt.

Teil VI: Der Top-Ten-Teil

Diesen Teil gibt es in allen *Für-Dummies*-Büchern, er besteht aus Zehner-Listen mit kurzgefassten Informationen. In diesem Buch finden Sie hier zehn wichtige Webseiten über Quantenphysik und eine Darstellung der zehn wichtigsten Entdeckungen der Quantenphysik.

Symbole in diesem Buch

In diesem Buch werden einige Symbole benutzt, die die folgende Bedeutung haben:



Dieses Symbol markiert wichtige Hinweise, die vor allem für die Lösung von Aufgaben von Bedeutung sind.



Dieses Symbol weist auf Dinge, die man sich merken sollte, wie etwa wichtige physikalische Gesetze oder besonders nützliche Gleichungen.



Dieses Symbol bedeutet, dass es sich im Folgenden um Wissen für Experten handelt. Sie müssen es nicht lesen, wenn Sie nicht wollen, aber wenn Sie ein Profi in Quantenphysik werden wollen (und wer will das nicht?), sollten Sie einen Blick riskieren.



Dieses Symbol warnt vor mathematischen Verständnisfehlern.

Nun kann es losgehen!

An dieser Stelle ist alles gesagt, und es kann losgehen. Sie können an jedem Punkt dieses Buches beginnen. Wenn Sie glauben, dass der Elektronenspin das Partythema am nächsten Wochenende sein wird, beginnen Sie mit Kapitel 6. Wenn Sie aber Ihre nächsten Ferien in Genf verbringen und dabei auch Ihren Lieblings-Teilchenbeschleuniger – den LHC – besuchen möchten, sollten Sie Kapitel 12 lesen und sich mit Streuungstheorie beschäftigen. Wenn Sie aber das ganze Thema von Beginn an interessiert, lesen Sie zuerst Kapitel 1 – hier werden die Grundlagen gelegt.

Teil I

Ist die Welt nicht klein? Die Grundlagen

In diesem Teil ...

Dieser Teil führt in die Arbeitsweise der Quantenphysik ein. Er stellt die Probleme dar, die ihre Entwicklung ausgelöst haben und zeigt die Lösungen dieser Probleme. Darüber hinaus wird die Mathematik vorgestellt, die man für die Quantenphysik benötigt; dies schließt auch die Schreibweise von Zustandsvektoren ein.

Entdeckungen und wesentliche Grundlagen der Quantenphysik

In diesem Kapitel ...

- ▶ Einführung der Quantisierung und unteilbarer Einheiten
- ▶ Experimente mit Wellen, die sich wie Teilchen verhalten
- ▶ Experimente mit Teilchen, die sich wie Wellen verhalten
- ▶ Unschärfe und Wahrscheinlichkeiten

Der klassischen Physik zufolge sind Teilchen Teilchen und Wellen Wellen. Beide haben keine Gemeinsamkeiten. Teilchen besitzen eine Energie E und einen Impulsvektor $\mathbf{p}$, und das ist alles. Dagegen besitzen Wellen, wie beispielsweise Lichtwellen, eine Amplitude A und einen Wellenvektor $\mathbf{k}$ (wobei der Betrag von λ k , $|k| = 2\pi/\lambda$ und λ die Wellenlänge ist), der in die Richtung zeigt, in die sich die Welle fortpflanzt. Und das ist, der klassischen Physik zufolge, auch hier alles.

Aber die Wirklichkeit sieht anders aus – es zeigt sich, dass Teilchen einen wellenartigen Charakter besitzen können, genauso wie Wellen einen Teilchencharakter. Hauptsächlich weil uns klar geworden ist, dass Wellen (z. B. Licht) sich wie Teilchen (z. B. Elektronen) verhalten können und umgekehrt, kann die Quantenphysik heute eine so äußerst wichtige Rolle in der Welt der Physik spielen. Dieses Kapitel wirft einen Blick auf die Herausforderungen, denen sich die Physik zu Beginn des 20. Jahrhunderts gegenüber sah, und zeigt, wie die Quantenphysik diese Herausforderungen nach und nach löste. Bis zu diesem Zeitpunkt war es der klassischen Physik möglich, alles, aber auch alles genau zu erklären. Aber diese vertrackten Experimentalphysiker waren unermüdlich, und damals brachten sie eine ganze Reihe von Ergebnissen, die die theoretischen Physiker nicht erklären konnten. Das war für diese natürlich unerträglich, und so machten sie sich an die Arbeit. Die Probleme kamen aus der mikroskopischen Welt, jener Welt, die zu klein ist, als dass man sie sehen könnte. In der üblichen, makroskopischen Welt konnte die klassische Physik fast alles erklären; wenn es aber um Effekte im Zusammenhang mit der Mikrowelt ging, begann sie zu versagen. Wenn man sich dieses Versagen genauer ansieht, erhält man eine gute Einführung in die Quantenphysik und versteht, warum sie notwendig ist.

Diskret werden: Der Ärger mit der Strahlung schwarzer Körper

Eine der wesentlichen Neuerungen der Quantenphysik ist natürlich die *Quantisierung* – das Auftreten von diskreten, unteilbaren, nicht-kontinuierlichen Einheiten. Diese Idee der Quantisierung, wie etwa die der Energie, wurde im Zusammenhang mit einer der ersten Herausforderungen der klassischen Physik entwickelt: Der Strahlung eines schwarzen Körpers.

Wenn man einen Körper erhitzt, beginnt er zu glühen. Doch auch bevor dieses Glühen sichtbar wird, strahlt der Körper, nämlich im infraroten Bereich des Spektrums. Der Grund für dieses Glühen eines Körpers beim Erhitzen ist, dass Elektronen an der Oberfläche des Materials thermisch angeregt werden, und dass beschleunigte oder abgebremste Elektronen Licht aussenden.

Die Physiker beschäftigten sich im späten 19. und frühen 20. Jahrhundert vor allem mit dem Lichtspektrum, das von sogenannten schwarzen Körpern ausgesendet wird. Ein *schwarzer Körper* ist ein Stoff, der seiner Temperatur entsprechend strahlt, aber auch Licht aus seiner Umgebung absorbiert und reflektiert. Um das Problem möglichst einfach zu halten, nimmt die Physik jedoch an, dass ein schwarzer Körper nicht reflektiert sondern alles einfallende Licht absorbiert (daher der Name *schwarzer Körper*, denn ein Objekt erscheint vollkommen schwarz, wenn es das gesamte einfallende Licht absorbiert). Wenn man einen schwarzen Körper erhitzt, beginnt er zu strahlen, das heißt, er emittiert Licht.

Es war nicht leicht, einen vollkommen schwarzen Körper zu entwickeln, denn welches Material absorbiert schon 100 % des einfallenden Lichts und reflektiert überhaupt nicht. Aber Physiker sind zumeist überaus findig, und sie entwickelten Hohlkörper mit einem Loch, wie in Abbildung 1.1 dargestellt.

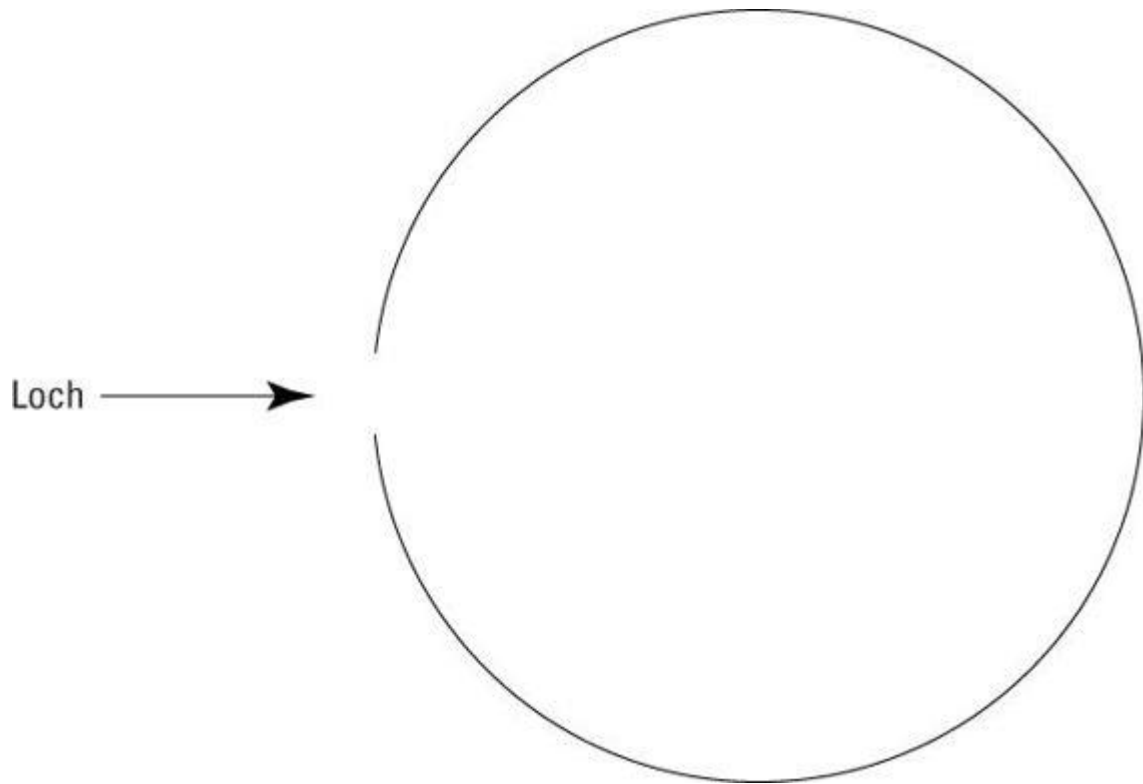


Abbildung 1.1: Ein schwarzer Körper

Wenn man Licht auf das Loch fallen lässt, wird alles in das Innere des Hohlkörpers gelangen, wo es dann wieder und wieder reflektiert wird, bis es schließlich absorbiert wird (ein verschwindend geringer Anteil wird wieder durch das Loch entkommen). Wenn man den Hohlkörper erhitzt, wird das Loch zu glühen beginnen. Damit ist das Ziel erreicht: eine ziemlich gute Annäherung an einen vollkommenen schwarzen Körper.

Das Spektrum eines schwarzen Körpers und Versuche, es zu modellieren, sind in Abbildung 1.2 für zwei verschiedene Temperaturen T_1 und T_2 dargestellt. Das Problem war, dass niemand in der Lage war, eine theoretische Erklärung für die beobachteten Spektren zu geben. Jeder Ansatz der klassischen Physik erwies sich als falsch.

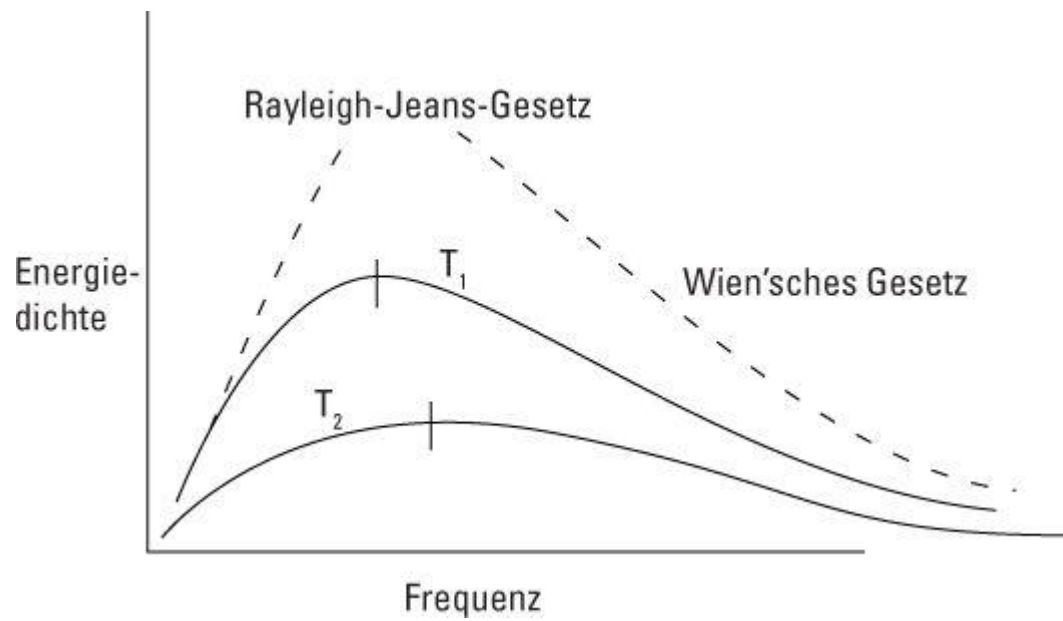


Abbildung 1.2: Das Spektrum eines schwarzen Körpers

Der erste Versuch: Das Wien'sche Gesetz

Der erste, dem es gelang, einen Teil des Spektrums eines schwarzen Körpers zu erklären, war 1889 Wilhelm Wien. Mithilfe der klassischen Thermodynamik entwickelte er folgende Formel:

$$u(\nu, T) = A\nu^3 e^{-\beta\nu/T}$$

Dabei sind A und β Konstanten, die sich aus der experimentellen Anordnung ergeben, ν ist die Frequenz des Lichts und T die Temperatur des schwarzen Körpers. (Das Spektrum ist angegeben als $u(\nu, T)$, also der Energiedichte des emittierten Lichts als Funktion der Frequenz und der Temperatur.)

Die Gleichung, das Wien'sche Verschiebungsgesetz, liefert sehr gute Ergebnisse für hohe Frequenzen, wie in Abbildung 1.2 zu sehen ist; für niedrige Frequenzen versagt es hingegen.

Der zweite Versuch: Das Rayleigh-Jeans-Gesetz

Der nächste Versuch, das Spektrum eines schwarzen Körpers zu erklären, war das Rayleigh-Jeans-Gesetz, das um 1900 entwickelt wurde. Dieses Gesetz beschreibt das Spektrum durch folgende Formel:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT$$

wobei k die Boltzmann-Konstante ist ($1,38 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$). Allerdings zeigte sich, dass beim Rayleigh-Jeans-Gesetz die Probleme – im Gegensatz zum Wien'schen Gesetz – im Bereich hoher Frequenzen lagen. Während es für niedrige Frequenzen gut mit den beobachteten Daten übereinstimmt (siehe Abbildung 1.2), divergiert es für hohe Frequenzen. Dieses Phänomen nannte man die *Ultraviolett-Katastrophe*, da die beste Beschreibung, die man hatte, bei hohen Frequenzen (also im ultravioletten Bereich) unendlich hohe Energiedichten lieferte. Damit war die Zeit reif für die Quantenmechanik.

Ein intuitiver (Quanten-)Sprung: Das Planck'sche Spektrum

Es war schwierig, das Problem der Strahlung schwarzer Körper zu lösen; dies führte zu den Anfängen der Quantenphysik. Max Planck machte damals einen revolutionären Vorschlag. Was ist, wenn der Betrag an Energie, den eine Lichtwelle mit Materie austauschen kann, nicht kontinuierlich ist, wie es die klassische Physik fordert, sondern *diskret* (unteilbar)? Mit anderen Worten, Planck behauptete, dass die Energie des Lichts, das von den Wänden des Schwarzkörper-Hohlraums ausgestrahlt wird, nur in ganzzahligen Vielfachen einer Größe $h\nu$ auftritt, wobei h eine universelle Konstante ist:

$$E = nh\nu, \text{ wobei } n = 1, 2, \dots$$

Mit dieser Theorie, die am Anfang des 20. Jahrhunderts reichlich verrückt klang, wandelte Planck die kontinuierlichen Integrale der Rayleigh-Jeans-Theorie in diskrete Summen über eine unendliche Zahl von Summanden um. Durch diese Änderung gelangte Planck zur folgenden Formel für das Spektrum der Strahlung eines schwarzen Körpers:

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

Diese Gleichung erwies sich als voller Erfolg; sie beschrieb das Spektrum eines schwarzen Körpers genau, sowohl für niedrige als auch für hohe Frequenzen (und natürlich auch für mittlere).

Das war eine revolutionäre Vorstellung. Planck sagte, dass die Energie strahlender Oszillatoren im schwarzen Körper nicht jeden beliebigen Wert annehmen kann, wie es nach der klassischen Theorie möglich ist; vielmehr gibt es nur bestimmte, *quantisierte* Energien. Planck nahm darüber hinaus an, dass dies für *jeden* Oszillator gilt – die Energie eines jeden Oszillators beträgt ein ganzzahliges Vielfaches von $h\nu$.



In der Folge wurde diese Planck'sche Theorie als Planck'sches Gesetz bekannt; die Konstante h wird als *Planck'sches Wirkungsquantum* bezeichnet: $h = 6,626 \times 10^{-34}$ Js. Die Forderung, dass die Energie aller Oszillatoren quantisiert ist, war die Geburtsstunde der Quantenphysik.

Man kann sich fragen, wie Planck auf diese Idee kam, da sie keine offensichtliche Lösung ist. Warum sollen Oszillatoren nur mit bestimmten Energien schwingen können? Wie kann man all das erklären? Unabhängig von den Antworten auf diese Fragen: Die Revolution war da, und niemand konnte sie aufhalten.

Stück für Stück: Licht als Teilchen

Licht als Teilchen? Besteht Licht nicht aus Wellen? Es stellte sich heraus, dass Licht sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften aufweisen kann. Der folgende Abschnitt liefert für beides Beweise.

Die Erklärung des photoelektrischen Effektes

Der photoelektrische Effekt war ein weiteres der vielen experimentellen Ergebnisse, die die Krise der klassischen Physik am Beginn des 20. Jahrhunderts auslösten. Seine Erklärung war eigentlich einer der ersten Erfolge Einsteins; zudem liefert der Effekt einen Beweis für die Quantisierung von Licht. Es ging dabei um Folgendes:

Wenn man ein Metall mit Licht bestrahlt, wie es in Abbildung 1.3 dargestellt ist, werden Elektronen emittiert, denn sie absorbieren das einfallende Licht und wenn sie genügend Energie aufnehmen, können sie die Metalloberfläche verlassen. Der klassischen Physik zufolge besteht Licht aus Wellen, und diese können jeden beliebigen Energiebetrag mit dem Metall austauschen. Wenn man also ein Stück Metall mit Licht bestrahlt, sollten die Elektronen im Metall das Licht absorbieren und so nach und nach genügend Energie aufnehmen, um es verlassen zu können. Daraus folgt, dass die kinetische Energie der emittierten Elektronen umso größer sein sollte, je mehr Licht auf das Metall fällt. Bei sehr schwachen Lichtstrahlen sollten überhaupt keine Elektronen austreten (es sei denn nach mehreren Stunden).

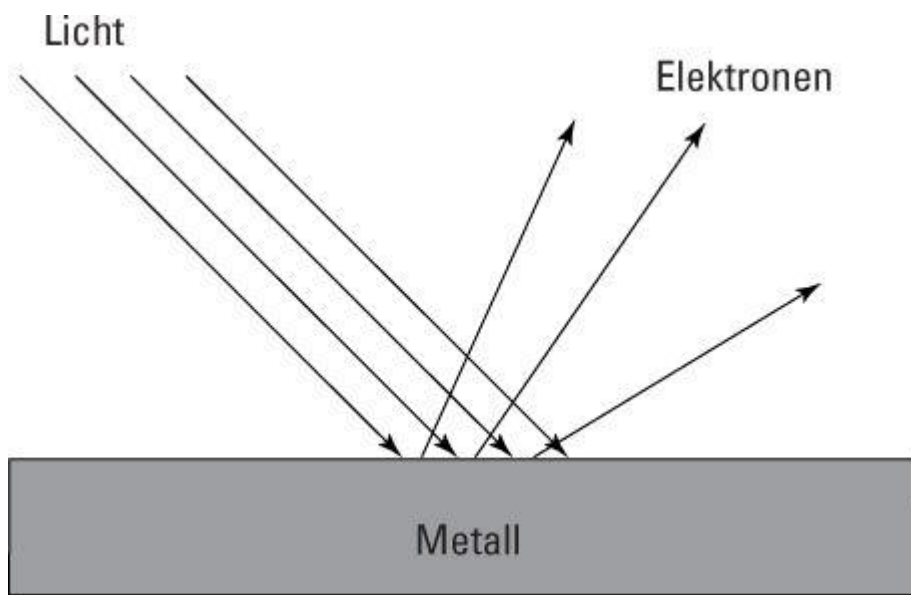


Abbildung 1.3: Der

photoelektrische Effekt

Aber das entspricht nicht den Beobachtungen: Sobald Licht auf das Metall fällt, treten Elektronen aus. Unabhängig davon, wie schwach die Intensität des einfallenden Lichts ist, werden Elektronen emittiert, und zwar sofort (und in einigen Experimenten arbeiteten die Experimentalphysiker mit so schwachem Licht, dass die Emission von Elektronen Stunden erfordern sollte).

Die Experimente mit dem photoelektrischen Effekt ergeben, dass die kinetische Energie E_{kin} der emittierten Elektronen nur von der Frequenz, nicht aber von der Intensität des einfallenden Lichts abhängt, wie in Abbildung 1.4 dargestellt ist.

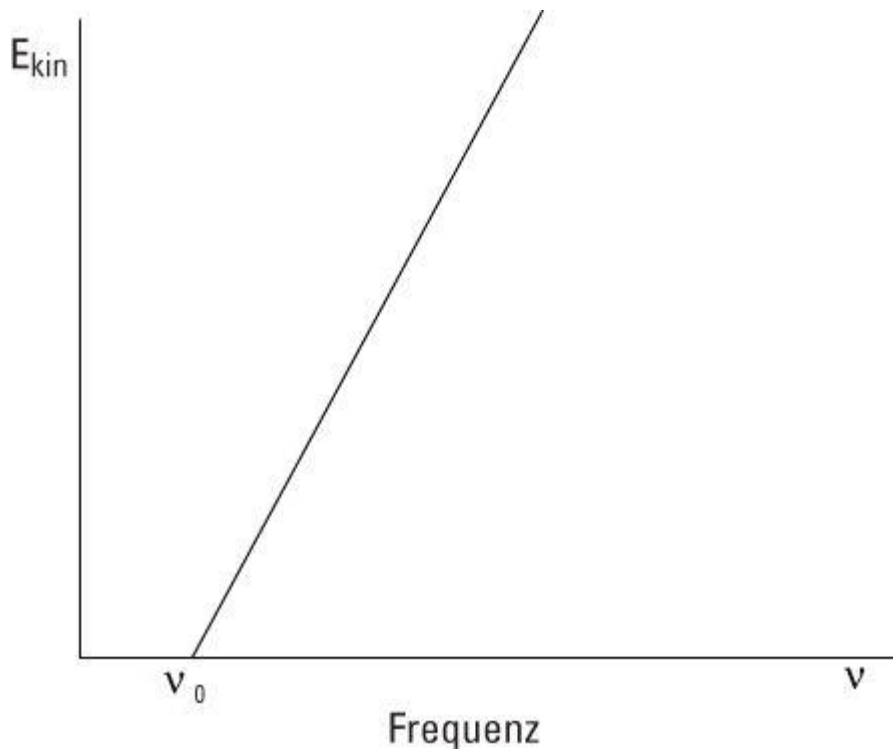


Abbildung 1.4:

Kinetische Energie der emittierten Elektronen als Funktion der Frequenz des einfallenden Lichts

Dabei wird ν_0 *Schwellfrequenz* genannt; benutzt man Licht mit einer geringeren Frequenz, werden überhaupt keine Elektronen emittiert. Die emittierten Elektronen stammen aus dem sogenannten freien Elektronengas des Metalls (alle Metalle besitzen ein solches freies Elektronengas). Damit sie aus dem Metall austreten können, muss man ihnen eine Energie zuführen, die der Austrittsarbeit W des Metalls entspricht. Also gilt $W = h \nu_0$.

Die Ergebnisse konnte man klassisch nicht erklären. Hier kommt nun Einstein ins Spiel. Das war in seinem großen Jahr 1905. Ermutigt von Plancks Erfolg (siehe den vorangegangenen Abschnitt) forderte Einstein, dass nicht nur Oszillatoren quantisiert sind, sondern auch Licht: es besteht aus unteilbaren Einheiten, die man *Photonen* nennt. Licht, so schlug er vor, kann sich sowohl wie ein Teilchen als auch wie eine Welle verhalten.

Nach dieser Vorstellung treffen die Photonen, wenn Licht auf eine Metalloberfläche fällt, auf die freien Elektronen und werden dabei jeweils von einem Elektron absorbiert. Nur wenn die Energie $h\nu$ des Photons größer als die Austrittsarbeit des Metalls ist, kann das Elektron das Metall verlassen. Es gilt:

$$h\nu = W + E_{\text{kin}}$$

wobei W die Austrittsarbeit des Metalls und E_{kin} die kinetische Energie des emittierten Elektrons ist. Auflösen nach E_{kin} ergibt:

$$E_{kin} = h\nu - W$$

Man kann diese Gleichung auch mithilfe der Schwellfrequenz ν_0 schreiben:

$$E_{kin} = h(\nu - \nu_0)$$

Ganz augenscheinlich ist Licht also nicht nur eine Welle; manchmal verhält es sich wie Teilchen, die Photonen. Mit anderen Worten: Licht ist quantisiert.

Dieses Ergebnis Einsteins war völlig unerwartet, obwohl es auf die früheren Arbeiten Plancks zurückgriff. Licht ist also *quantisiert*? Es besteht aus unteilbaren Energieeinheiten? Was kommt als Nächstes?

Streuung von Licht an Elektronen: Der Compton-Effekt

Einer Welt, die sich immer noch weigerte, sich Licht als Teilchen vorzustellen (siehe den vorhergehenden Abschnitt), versetzte Arthur Compton mit dem nach ihm benannten Effekt den letzten Schlag. Seine Experimente befassten sich mit der Streuung von Photonen an Elektronen, wie Abbildung 1.5 zeigt.

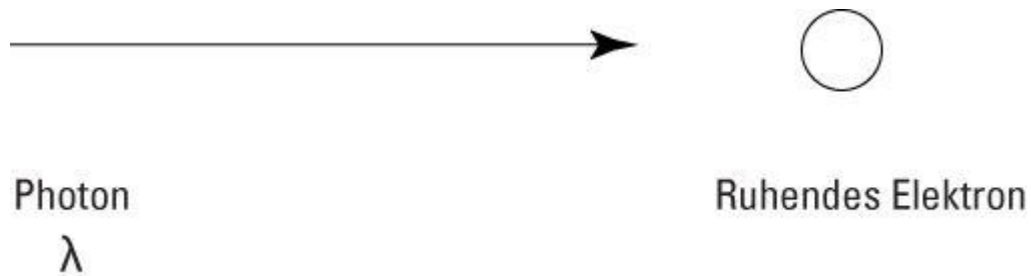


Abbildung 1.5:

Licht fällt auf ein ruhendes Elektron

Licht mit einer Wellenlänge λ fällt auf ein ruhendes Elektron. Dabei wird es gestreut, wie Abbildung 1.6 zeigt.

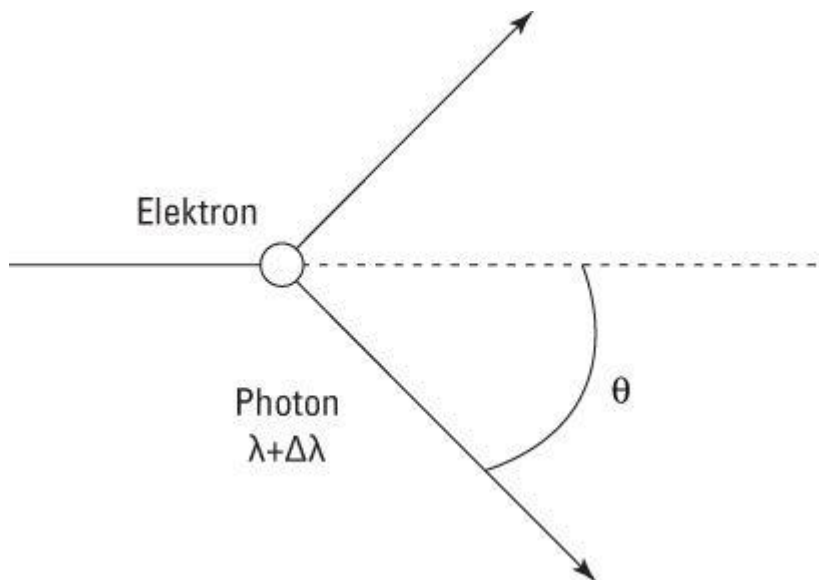


Abbildung 1.6:

Photonenstreuung an einem Elektron

Der klassischen Physik zufolge sollte folgendes passieren: Das Elektron absorbiert das einfallende Licht, beginnt zu schwingen und emittiert es dann wieder mit der ursprünglichen Wellenlänge und mit einer Intensität, die von der Intensität des einfallenden Lichts abhängt. Aber genau dies wurde nicht beobachtet; vielmehr erhöht sich die Wellenlänge um einen Betrag $\Delta\lambda$,

den sogenannten *Wellenlängenshift*. Das gestreute Licht besitzt also eine Wellenlänge $\lambda + \Delta\lambda$, was mit anderen Worten bedeutet, dass es an Energie verloren hat. $\Delta\lambda$ hängt im Übrigen vom Streuwinkel θ ab, nicht aber von der Intensität des einfallenden Lichts.

Arthur Compton konnte die Ergebnisse seiner Experimente nur erklären, wenn er annahm, dass er es mit zwei Teilchen zu tun hatte, nämlich einem Photon und einem Elektron. Das bedeutet, dass er Licht als einzelne Teilchen behandeln musste, nicht als Welle. Zudem musste er annehmen, dass Photon und Elektron einen elastischen Stoß ausführten, dass also bei dem Stoß sowohl die gesamte kinetische Energie als auch der Gesamtimpuls erhalten blieben.

Unter der Annahme, dass sowohl das Licht als auch das Elektron Teilchen sind, konnte Compton die folgende Formel für die Erhöhung der Wellenlänge herleiten (wenn man annimmt, dass Licht aus Photonen der Energie $h\nu$ und des Impulses $p = E/c$ besteht, ist die Ableitung ziemlich einfach):

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta)$$

wobei h die Plank'sche Konstante, m_e die Elektronenmasse, c die Lichtgeschwindigkeit und θ der Streuwinkel sind.

Manchmal wird diese Gleichung auch wie folgt geschrieben:

$$\Delta\lambda = 4\pi\lambda_c \sin^2(\theta/2)$$

wobei $\lambda_c = \hbar / m_e c$ die Compton-Wellenlänge eines Elektrons ist (mit $\hbar = h/2\pi$). Alle Experimente bestätigen diese Gleichungen – in beiden Formen.

Es soll an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen werden, dass Compton zur Herleitung dieser Gleichung annehmen musste, dass sich Licht wie ein Teilchen verhält, nicht wie eine Welle. Ein weiteres Mal dominierte der Teilchencharakter von Licht über dessen Wellencharakter.

Das Positron als Beweis? Dirac und die Paarerzeugung

Im Jahr 1928 sagte der Physiker Paul Dirac die Existenz eines positiv geladenen Anti-Elektrons voraus, des sogenannten *Positrons*. Er arbeitete an einer Erweiterung der sich gerade entwickelnden Quantenphysik durch Kombination mit der Relativitätstheorie zur sogenannten relativistischen Quantenmechanik. Diese Theorie sagte nun, wenn man mit den Vorzeichen plus und minus spielte, die Existenz des Positrons voraus.

Das war eine kühne Vorhersage: ein *Anti-Teilchen* des Elektrons? Aber es vergingen nur vier Jahre, bis Physiker das Positron wirklich beobachteten. In der heutigen Zeit können die gut ausgerüsteten Elementarteilchenphysiker viele verschiedene Synchrotrone und andere Teilchenbeschleuniger benutzen, um all die Elementarteilchen zu erzeugen, die sie gerade benötigen; aber im frühen 20. Jahrhundert sah das ganz anders aus.

Damals mussten die Physiker die kosmische Strahlung als Teilchenquelle benutzen, also die Teilchen und hochenergetischen Photonen (die sogenannten Gamma-Strahlen), die aus dem Weltall auf die Erde treffen. Sie verwendeten *Nebelkammern*, die mit dem Dampf von Trockeneis gefüllt waren, um die Spuren dieser Teilchen sichtbar zu machen. Wenn man diese Kammern in Magnetfelder brachte, konnte man anhand der Krümmung der Bahnen den Impuls der Teilchen bestimmen.

Im Jahr 1932 beobachtete ein Physiker ein sehr überraschendes Ereignis. Ein Paar von entgegengesetzt geladenen Teilchen (das konnte man anhand der Krümmungen im Magnetfeld feststellen) erschien plötzlich wie aus dem Nichts. Es gab keine Teilchenspur, die zum Entstehungsort der beiden neuen Teilchen führte. Diesen Prozess nennt man *Paarerzeugung*: Die Umwandlung eines hochenergetischen Photons in ein Elektron und ein Positron, zu der es kommen kann, wenn das Photon an einem schweren Atomkern vorbeifliegt.

Die Physiker hatten nun also experimentell beobachtet, wie sich ein Photon in ein Teilchenpaar umwandelt. Mehr Beweise für die Teilchennatur von Licht brauchte man nun wirklich nicht! Später wurde übrigens auch die *Paarvernichtung* beobachtet: Die Umwandlung eines Elektrons und eines Positrons in Licht.

Es stellte sich heraus, dass Paarerzeugung und -vernichtung von Einsteins neuer Relativitätstheorie bestimmt werden. Insbesondere gilt seine berühmte Formel $E = mc^2$, die die Beziehung zwischen Energie und Masse herstellt. Zu diesem Zeitpunkt verfügte man also über eine Vielzahl von Beweisen für die Teilchennatur von Licht.

Eine doppelte Identität: Die Wellennatur von Teilchen

Im Jahr 1923 schlug der Physiker Louis de Broglie vor, dass nicht nur Wellen Teilchencharakter besitzen, sondern dass umgekehrt auch alle Materie-Teilchen wellenartige Eigenschaften aufweisen.

Wie kann man sich das vorstellen? Ein Photon besitzt den Impuls $p = h\nu/c = h/\lambda$, wobei ν die Frequenz des Photons und λ seine Wellenlänge ist. Sein Wellenvektor $\mathbf{k}$ ist $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ (mit $\hbar = h/2\pi$). De Broglie postulierte, dass diese Beziehungen für alle Teilchen gelten sollten:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$$

De Broglie machte diese augenscheinlich überraschenden Vorschläge in seiner Doktorarbeit. Um sie zu überprüfen und festzustellen, ob sich ein Elektronenstrahl wie ein Teilchen oder wie eine Welle verhält, wurde ein Experiment entwickelt, bei dem ein Elektronenstrahl auf eine Doppelspaltanordnung fällt. Versuchsaufbau und Ergebnisse sind in Abbildung 1.7 dargestellt.

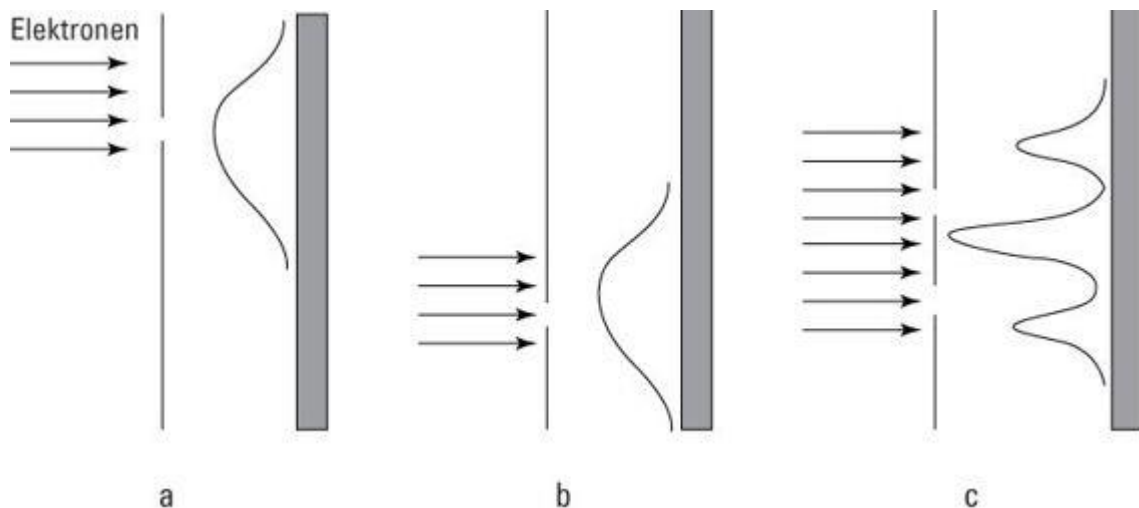


Abbildung 1.7: Ein Elektronenstrahl passiert eine Doppelspaltanordnung

Abbildung 1.7a zeigt einen Elektronenstrahl, der auf einen einzelnen Spalt fällt, sowie die sich auf einem dahinter befindlichen Schirm ergebende Intensitätsverteilung. In Abbildung 1.7b passieren die Elektronen einen zweiten Spalt. Klassisch würde man erwarten, dass sich die Intensitäten aus den Abbildungen 1.7a und 1.7b einfach addieren, wenn beide Spalte offen sind:

$$I = I_1 + I_2$$

Aber genau das passiert nicht. Tatsächlich beobachtet man, wenn beide Spalte offen sind, ein Interferenzmuster (Abbildung 1.7c) und nicht einfach die Summe der Elektronenintensitäten der Einzelspalte.

Dieses Ergebnis war ein Beweis für de Broglies Annahme des Wellencharakters von Teilchen. Die Experimente ergaben, dass die Beziehung $\lambda = h/p$ gilt, wie de Broglie gefordert hatte.



Der Wellencharakter von Teilchen spielt eine große Rolle im Rest dieses Buches. Speziell ergibt sich, dass man die Amplituden der Wellenfunktionen $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ und $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ addieren muss und nicht die Intensitäten:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)$$

Man quadriert die Amplitude, um die Intensität zu erhalten. Die beobachteten Interferenzmuster beruhen auf der Phasendifferenz von $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ und $\psi_2(\mathbf{r}, t)$.

Man kann nicht alles wissen (aber die Wahrscheinlichkeiten berechnen)



Ganz augenscheinlich besitzen Teilchen Wellencharakter und Wellen Teilchencharakter. Aber was ist nun ein Elektron – ist es eine Welle oder ein Teilchen? Die Antwort ist, dass physikalisch gesehen ein Elektron ein Elektron ist und man nicht von vornherein sagen kann, ob es sich wie eine Welle oder ein Teilchen verhält. Erst der Prozess der *Messung* legt den Charakter des Elektrons fest. Diese Vorstellung wird uns durch das ganze Buch begleiten.

Die Quantenphysik lebt eigentlich sehr gut mit diesen Unbestimmtheiten. Zu Beginn missfielen sie vielen bedeutenden Physikern, insbesondere Albert Einstein, dessen berühmter Ausspruch lautete: »Gott würfelt nicht.« Der folgende Abschnitt erläutert den Begriff der Unschärfe und wie die Physiker mit Wahrscheinlichkeiten arbeiten.

Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Die Tatsache, dass Teilchen einen wellenartigen Charakter besitzen, wirft ein weiteres Problem auf: Wellen sind im Raum nicht lokalisiert. Das Wissen um dieses Problem veranlasste im Jahr 1927 Werner Heisenberg dazu, seine berühmte Unschärferelation zu entwickeln.

In der klassischen Physik ist es möglich, ein Objekt durch die Angabe seines Impulses und seines Ortes zu beschreiben. Beide können sehr genau gemessen werden. Mit anderen Worten: die klassische Physik ist vollständig *deterministisch*.

Auf atomarer Ebene hingegen zeichnet die Quantenphysik ein völlig anderes Bild. Die Heisenberg'sche Unschärferelation besagt, dass eine inhärente Unschärfe in der Beziehung zwischen Ort und Impuls existiert. Für die x-Richtung lautet sie beispielsweise:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2}$$

wobei Δx die Messunschärfe der Position eines Teilchens in x-Richtung ist, Δp_x die Unschärfe des Impulses in x-Richtung und $\hbar = h/2\pi$.

Dies besagt mit anderen Worten folgendes: Je genauer man die Position eines Teilchens kennt, umso größer ist die Unschärfe des Impulses, und umgekehrt. Diese Beschreibung gilt für alle drei Richtungen:

$$\Delta y \Delta p_y \geq \frac{h}{2}$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{h}{2}$$

Die Heisenberg'sche Unschärferelation ist eine direkte Folge des Wellencharakters von Teilchen, da man eine Welle nicht genau lokalisieren kann.



Anders als die klassische Physik ist die Quantenphysik vollkommen undeterministisch. Man kann Ort und Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig *genau* kennen. Man kann für diese gekoppelten Größen nur Wahrscheinlichkeiten angeben.

Die Würfel rollen: Quantenphysik und Wahrscheinlichkeiten

In der Quantenphysik wird der Zustand eines Teilchens durch seine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben. Diese Wellenfunktion gibt die de-Broglie-Welle des Teilchens an, wobei ihre Amplitude eine Funktion von Raum und Zeit ist (weitere Einzelheiten über de Broglie findet man weiter vorne im Abschnitt »Eine doppelte Identität: Die Wellennatur von Teilchen«).



Man beachte, dass die Wellenfunktion die Amplitude eines Teilchens angibt, nicht die Intensität. Wenn man die Intensität einer Wellenfunktion wissen will, muss man sie quadrieren: $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Diese *Intensität* einer Wellenfunktion ergibt dann die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort anzutreffen.

Auf diese Weise wandelt die Quantenphysik die Frage nach Ort und Impuls in Wahrscheinlichkeiten um. Sie benutzt Wellenfunktionen, deren Quadrat die *Wahrscheinlichkeitsdichte* angibt, dass ein Teilchen sich an einem bestimmten Ort befindet oder einen bestimmten Impuls besitzt. Mit anderen Worten ist $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Teilchen zur Zeit t in einem Volumenelement am Ort $\mathbf{r}$ befindet.

Neben der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ im Ortsraum gibt es auch eine entsprechende Wellenfunktion $\phi(\mathbf{p}, t)$ im Impulsraum.

Dieses Buch beschäftigt sich vorwiegend mit derartigen Wellenfunktionen: Wellenfunktionen freier Teilchen, von Teilchen, die innerhalb eines Potentials gefangen sind, von identischen Teilchen, die einander stoßen, von Teilchen, die harmonische Bewegungen ausführen, von Licht, das an Teilchen gestreut wird usw. Mit dieser Art von Physik kann man das Verhalten aller möglichen physikalischen Systeme vorhersagen.

Nicht immer einfach: Die Quantenmechanik

In diesem Kapitel ...

- ▶ Die Schrödinger-Gleichung und die Grundbegriffe
- ▶ Darstellungsweisen
- ▶ Die Quantenmechanik und die folgenden Kapitel

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die Arbeitsweise und den Aufbau der Quantenphysik. Hier werden keine quantenmechanischen Probleme gelöst, sondern es wird gezeigt, wie die Quantenphysik derartige Probleme angeht und welche Werkzeuge sie verwendet. Die Quantenphysik ist eng mit der Mathematik verbunden. Infolgedessen tauchen in diesem Kapitel viele Begriffe auf, die für einen Mathematiker selbstverständlich sind, die Sie aber sicher noch nie gehört haben. Lassen Sie sich davon aber keinesfalls entmutigen! Diese Begriffe werden in diesem Kapitel eingeführt und definiert und dann im Rest des Buches mit Leben gefüllt.



Sie sollten beim Studieren dieses Buches immer wieder auf dieses Kapitel zurückgreifen, wenn Ihnen die Bedeutung eines Begriffes nicht ganz klar ist.

Was ist Quantenphysik?

Ziel der Quantenmechanik oder Quantenphysik ist es, die Vorgänge in der uns umgebenden Welt auf mikroskopischer oder gar nanoskopischer Ebene zu beschreiben, genau so wie die klassische Physik die uns umgebende makroskopische Welt beschreibt. Aus der Darstellung des letzten Kapitels geht hervor, dass die klassische Physik versagt, wenn die Dimensionen klein werden:

- ✓ Teilchen verhalten sich wie Wellen und umgekehrt.
- ✓ Energien und andere Größen sind nicht länger kontinuierlich, sondern quantisiert.
- ✓ Der Aufenthaltsort von Teilchen wird durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte angegeben.



All diesen Beobachtungen ist gemeinsam, dass die klassische Physik nicht in der Lage ist, sie zu beschreiben. Deshalb ist ein völlig neuer Weg erforderlich, um die mikroskopische Welt darzustellen: Die *Quantenphysik* oder *Quantenmechanik*, die in den ersten Jahrzehnten des 20. Jahrhunderts entwickelt wurde. Die Ansätze der Quantenmechanik sind völlig neu; sie unterscheiden sich völlig von denen der klassischen Physik.

Ziel dieses Buches ist es, Ihnen diese Ansätze und die daraus folgenden Lösungen auf einfache Art nahe zu bringen.

Wie jeder physikalische Ansatz, jede physikalische Theorie macht auch die Quantenmechanik ausgiebig Gebrauch von der Mathematik. Physik ohne Mathematik geht nicht. Und Quantenphysik schon gar nicht. Im Gegenteil, die Quantenphysik hat eine spezielle Art von Mathematik hervorgebracht; im Laufe dieser Entwicklung haben sich Quantenphysik und Mathematik gegenseitig befruchtet und so zur jeweiligen Weiterentwicklung beigetragen.

Aber dies ist ein Buch über die Quantenphysik, nicht über die Mathematik. Infolgedessen werden die verschiedenen mathematischen Techniken wie etwa die Lösung von Differentialgleichungen, die Anwendung von Leiteroperatoren oder die Darstellung in verschiedenen Basissystemen angewendet, ohne die mathematischen Grundlagen dieser Techniken zu diskutieren.

Das sollte eine gute Nachricht für Sie sein. Die schlechte Nachricht ist allerdings, dass die Quantenphysik auch ohne die ausführliche Behandlung der mathematischen Grundlagen nicht ganz einfach ist.

Dies können Sie ganz leicht erkennen, wenn Sie die wichtigste und grundlegendste Gleichung der Quantenphysik betrachten, die sogenannte *Schrödinger-Gleichung*. Sie lautet in ihrer allgemeinsten Form:

$$H\psi = E\psi$$

Das sieht eigentlich ganz einfach aus. Ist es aber nicht, bei weitem nicht. In dieser einfachen, aus vier Zeichen bestehenden Gleichung steckt nämlich im Prinzip die gesamte Quantenphysik. Deshalb beginnt dieser kurze Überblick über die Techniken, Ziele, Ansätze und Arbeitsweisen der Quantenphysik mit einer eingehenden Betrachtung der Schrödinger-Gleichung.

Die Schrödinger-Gleichung und die Wellenfunktion



In der Quantenmechanik werden die meisten Situationen durch die sogenannte Schrödinger-Gleichung beschrieben. Die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung* für ein beliebiges Teilchen lautet folgendermaßen:

$$H\psi = E\psi$$

Da die Bestandteile dieser Gleichung in der Quantenmechanik von grundlegender Bedeutung sind, sollten Sie sich gründlich mit ihnen vertraut machen. Es sind

- ✓ der Hamilton-Operator H
- ✓ die Wellenfunktion ψ
- ✓ die Energieeigenwerte E .

Aufgrund ihrer Wichtigkeit werden sie im folgenden ausführlich erläutert.

Der Hamilton-Operator

In der Quantenmechanik werden *Messgrößen* in Form von *Operatoren* dargestellt; daher spielen Operatoren in der Quantenmechanik eine zentrale Rolle. Ein Operator erzeugt bei der Anwendung auf eine Wellenfunktion eine neue Wellenfunktion. Ein einfacher Operator, den Sie bereits kennen, ist der Differentialoperator d/dx ; wendet man diesen auf eine Funktion $\psi(x)$ an, so erzeugt er eine neue Funktion, in diesem Fall die Ableitung der Funktion nach dem Ort. Der Impuls $\mathbf{p}$ der klassischen Physik geht in der quantenmechanischen Darstellung in den Impulsoperator $i\hbar \nabla$ über, und der quantenmechanische Operator für die kinetische Energie E_{kin}

= $\mathbf{p}^2/2m$ lautet $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$.

Der Hamilton-Operator beschreibt dagegen die Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems. Er lautet somit wie folgt:

$$H\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r)\psi(r)$$

Dabei gilt:

$$\checkmark \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

beschreibt die kinetische Energie der Teilchen des Systems.

✓ $V(r)$ beschreibt bei der Anwesenheit eines äußeren Potentials die potentielle Energie sowie im Fall mehrerer Teilchen die Wechselwirkung zwischen ihnen.

Demzufolge kann man die Schrödinger-Gleichung auch in folgender Form schreiben:

$$H\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Die Wellenfunktion $\psi(r)$

Die Wellenfunktion beschreibt den quantenmechanischen Zustand eines Systems. Wenn Sie die Wellenfunktion $\psi(r)$ kennen, die die Schrödinger-Gleichung für ein gegebenes Potential und die entsprechenden *Randbedingungen* erfüllt, können Sie daraus alle weiteren beobachtbaren Größen dieses Systems herleiten. Sie werden im Laufe dieses Buches anhand zahlreicher, sehr unterschiedlicher Beispiele lernen, auf welche Weise dies möglich ist.



Neben dem Potential werden die *Randbedingungen*, die Sie aus der jeweiligen Aufgabenstellung herauslesen müssen, eine wichtige Rolle bei der Lösung spielen. Aber keine Angst, Sie wissen, Übung macht auch hier den Meister.

Eine weitere Schwierigkeit besteht darin, dass nicht alle mathematisch möglichen Lösungen einer Schrödinger-Gleichung auch physikalisch sinnvoll sind. Einige Anforderungen an sinnvolle Lösungen beziehen sich nur auf das konkrete Problem, andere lassen sich allgemein formulieren, wie die Bedingung der Normierbarkeit, die weiter im Abschnitt »Wie geht man bei der Lösung eines quantenmechanischen Problems vor« erläutert wird.

Die Energieeigenwerte E

Jetzt bleibt nur noch der Begriff Energieeigenwert zu klären. Eine Gleichung der Form $H\psi(r) = E\psi(r)$, wie sie die Schrödinger-Gleichung darstellt, hat in der Theorie der Differentialgleichungen den Namen *Eigenwertgleichung*; ihre Bestandteile haben ebenfalls bestimmte Namen: Eine Lösung $\psi(r)$ dieser Gleichung heißt *Eigenfunktion* zum *Eigenwert* E des Operators H . (Wenn Sie mehr über Differentialgleichungen erfahren wollen, empfehle ich Ihnen das Buch »*Differentialgleichungen für Dummies*« aus dem Wiley-VCH-Verlag. Es soll ja Leute geben, die Spaß am Lösen von Differentialgleichungen haben.)

Dabei gibt der Eigenwert E den eindeutig festgelegten Messwert der Größe H an. Das Ergebnis kann ein Kontinuum von Messwerten sein – in den meisten Fällen werden Sie jedoch sehen, dass sich die Eigenwertgleichung nur durch diskrete Eigenwerte erfüllen lässt, die wiederum von der Wahl der Randbedingungen abhängen. Mit anderen Worten, die erlaubten

Messwerte sind quantisiert; genau aus diesem Grund wird dieses Gebiet der Physik Quantenphysik genannt.

Sie haben in diesem Abschnitt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen und eine Dimension kennen gelernt. Die Erweiterung auf drei Dimensionen und mehrere Teilchen ist völlig unproblematisch; Sie werden sich in den Kapiteln 8–10 bzw. 11 ausführlich mit dreidimensionalen Problemen sowie Vielteilchen-Systemen beschäftigen. Darüber hinaus gibt es auch eine zeitabhängige Form der Schrödinger-Gleichung, auf die in Kapitel 4 kurz eingegangen wird (siehe »Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion«). Da die Zeitabhängigkeit aber darüber hinaus in diesem Buch keine Rolle spielt, wird sie hier nicht näher betrachtet.



Nachdem Sie jetzt einige neue Begriffe kennen gelernt haben, möchte ich Ihnen noch einen Tip mit auf den Weg geben: Betrachten Sie die Schrödinger-Gleichung einfach als eine Grundgleichung der Quantenmechanik, deren Berechtigung auf ihrer Fähigkeit beruht, die richtigen Ergebnisse zu liefern.

Keine Angst, sie müssen nicht in der Lage sein, die Schrödinger-Gleichung herleiten zu können. Sie müssen aber in der Lage sein, mit ihr zu arbeiten. Dies ist das Ziel dieses Buches, in dessen Verlauf diese bislang eher abstrakten Begriffe mit Leben gefüllt werden.

Zustände und Wahrscheinlichkeiten in der Quantenphysik

Als *Zustand* eines Systems bezeichnet man die Gesamtheit aller Parameter, mit deren Hilfe dieses System beschrieben werden kann. In der klassischen Physik werden diese Parameter durch Größen wie Ort, Geschwindigkeit, Energie usw. beschrieben. In der Quantenphysik ist das dagegen nicht so einfach möglich. Man hat aber zwei verschiedene Möglichkeiten, um den physikalischen Zustand eines Systems mathematisch darzustellen:

✓ In Form einer orts- und zeitabhängigen Wellenfunktion $\psi(r, t)$. Diese Möglichkeit wurde bereits im vorangegangenen Abschnitt dargestellt.

✓ In Form eines Zustandsvektors $|\psi\rangle$ in einem unendlich-dimensionalen Vektorraum, der *Hilbert-Raum* genannt wird. In diesem Fall verwendet man die *Dirac-Schreibweise*, auf die im folgenden Abschnitt eingegangen wird.

Die Tatsache, dass sich ein quantenmechanischer Zustand nur noch durch Zustandsvektoren oder Wellenfunktionen beschreiben lässt, hat weitreichende Konsequenzen. In der klassischen Physik kann man den Ort eines Teilchens genau angeben, etwa $x = 9,2 \text{ cm}$. Derartige Angaben sind in der Quantenphysik unmöglich. Statt dessen kann man nur noch *Wahrscheinlichkeiten* dafür angeben, dass sich ein Teilchen an einem bestimmten Ort befindet. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort r im Volumenelement d^3r zu finden, wird durch folgenden Ausdruck beschrieben:

$$|\psi(r)|^2 d^3r$$

Diese Größe wird auch *Wahrscheinlichkeitsdichte* genannt.



Beachten Sie, dass in diesem Ausdruck das Quadrat der Wellenfunktion steht und nicht die Wellenfunktion selbst.

Aus dem Begriff der Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich nun automatisch die Forderung, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Teilchen überhaupt irgendwo zu finden, gleich Eins sein muss. Mathematisch ausgedrückt lautet diese Forderung:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r)|^2 d^3r = 1$$

Mit anderen Worten bedeutet das, dass eine Wellenfunktion, die eine physikalisch sinnvolle Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, sich auf eins normieren lassen muss. Keine Sorge, Sie werden im Verlauf dieses Buches noch viele Wellenfunktionen normieren, doch an dieser Stelle haben Sie schon mal gelernt, dass das nichts anderes ist, als sicherzustellen, dass

sich das Teilchen irgendwo in dem betrachteten Raum befindet. (Und es sich auch nur um ein Teilchen handelt.)



Aus der Tatsache, dass Sie in der Quantenphysik mit Wahrscheinlichkeiten und Wahrscheinlichkeitsdichten rechnen, ergibt sich unmittelbar auch, dass eine Größe hier eine Rolle spielt, die Sie vielleicht aus der Statistik kennen: der Erwartungswert. Der *Erwartungswert* gibt den wahrscheinlichsten Wert einer Größe wie beispielsweise des Ortes x an; er wird mit $\langle x \rangle$ bezeichnet. Er ist der *Mittelwert*, der sich aus zahlreichen Einzelbeobachtungen der Koordinate x am selben System ergibt.

Die Darstellungsweise



In der Quantenmechanik gibt es drei generelle, sich stark voneinander unterscheidende Arten der Darstellung, die auch alle in diesem Buch verwendet werden:

✓ **Matrizenmechanik:** Die erste Formulierung der Quantenmechanik erfolgte 1925 durch Werner Heisenberg, der dafür bereits 1932 den Nobelpreis für Physik erhielt. Mithilfe der Matrix-Darstellung lassen sich zahlreiche Aufgaben in der Quantenphysik lösen; daher wird diese Darstellung in Kapitel 3 eingeführt.

✓ **Wellenmechanik:** Die Wellenmechanik wurde bereits wenige Monate nach der Matrizenmechanik von dem österreichischen Physiker Erwin Schrödinger vorgestellt; er erhielt dafür 1933 gemeinsam mit dem Briten Paul Dirac den Physik-Nobelpreis. Schrödinger ging dabei von de Broglies Bild der Materiewellen aus und entwickelte eine entsprechende Darstellung mithilfe von partiellen Differentialgleichungen. Wenn man Aufgaben anhand der Wellenmechanik löst, arbeitet man gewöhnlich mit der Wellenfunktion im Ortsraum, die ganz allgemein $\psi(\mathbf{r})$ lautet.

✓ **Dirac-Notation:** Der britische Physiker Paul Dirac entwickelte die abstrakte und allgemeinste Formulierung der Quantenmechanik, die die Matrizenmechanik und die Wellenmechanik als Spezialfälle enthält. Daher ergibt sich automatisch, dass diese beide Theorien äquivalent sind. In der Dirac-Darstellung werden die Zustandsvektoren in Form von Bra- $|\psi\rangle$ und Ket-Vektoren $\langle\psi|$ angegeben; daher wird sie auch *Bra-Ket-Schreibweise* genannt.

Sie fragen sich jetzt wahrscheinlich, ob Sie das wirklich wissen müssen und ob es Ihnen bei der Lösung quantenmechanischer Probleme hilft. Ja, es ist hilfreich, dies zu wissen; es sollte Ihnen helfen, denn eins der Hauptprobleme, das auftreten wird, wenn Sie selbstständig Aufgaben oder Probleme der Quantenphysik lösen wollen, wird in der Wahl der Darstellungsweise liegen. Natürlich führen alle Wege irgendwie zum Ziel, aber eine Rechnung kann lang und schmutzig, zeitraubend und unübersichtlich sein oder einfach, kurz und elegant. Und da die Mathematik der Quantenphysik nicht gerade einfach ist, sollten Sie sich den Lösungsansatz immer sorgfältig überlegen.

Die Darstellung in der Bra-Ket-Schreibweise ist kurz, klar und übersichtlich. Sie wird heutzutage am häufigsten verwendet; allerdings ist sie für den Ungeübten auch etwas gewöhnungsbedürftig. Sie wird in Kapitel 3 eingeführt und erläutert, so dass Sie sich im folgenden schnell an diese Schreibweise gewöhnen können. Im folgenden Abschnitt wird allerdings zunächst einmal erläutert, wie man ganz allgemein an die Lösung einer quantenmechanischen Aufgabe heran geht.

Die Lösung quantenmechanischer Probleme

Da Sie im Verlauf dieses einleitenden Kapitels schon mehrfach darauf hingewiesen wurden, *wie sehr* sich die Quantenmechanik von der klassischen Mechanik unterscheidet, wundern Sie sich sicher nicht, wenn Sie an dieser Stelle lesen, dass sich die Lösung quantenmechanischer Aufgaben stark von der Lösung klassischer Physikaufgaben unterscheidet. In der klassischen Physik kann man beispielsweise die Geschwindigkeit zweier sich stoßender Teilchen nach einem Stoß einfach mithilfe von Impuls- und Energieerhaltungssatz berechnen. Es ist offensichtlich, *welche Größen* das System beschreiben und *wie* man diese berechnen kann. In der Quantenmechanik ist es dagegen sehr viel schwieriger, auch nur zu entscheiden, welche Größen man überhaupt bestimmen kann.

Dasselbe gilt natürlich auch für den Lösungsweg. Zum einen haben Sie es in der Quantenphysik mit sehr umfangreichen Fragestellungen zu tun; zum anderen ist, wie bereits mehrfach erwähnt, die Mathematik sehr viel aufwendiger. Um so wichtiger ist es, den richtigen Ansatz und das richtige mathematische Verfahren zu wählen (Sie werden in den folgenden Kapiteln die verschiedenen Verfahren kennen lernen). Daher wird in den folgenden Abschnitten zunächst die Frage beantwortet, welche Größe man bestimmen kann und wie man bei dieser Bestimmung vorgeht.

Welche Größe kann man bestimmen?

Wenn man es mit einem quantenmechanischen Problem zu tun hat, wie etwa ein Teilchen in einem Potentialtopf oder einem quantenmechanischen Oszillator stellt sich zunächst die Frage, welche Größe will man eigentlich bestimmen, und welche Größen kann man auch wirklich bestimmen?

Eine nützliche Information ist natürlich der Aufenthaltsort eines Teilchens. Aus der obigen Darstellung geht hervor, dass die Quantenmechanik nur Aussagen über die Wahrscheinlichkeitsdichte des Aufenthaltsortes erlaubt:

$$P(r) = |\psi(r)|^2 d^3r$$

Um diese Wahrscheinlichkeit zu berechnen, muss man also die Wellenfunktion $\psi(r)$ kennen!



Die Bestimmung der Wellenfunktion ist also eins der wichtigsten Ziele bei der Berechnung quantenphysikalischer Probleme.

Natürlich möchte man nicht nur den wahrscheinlichen Aufenthaltsort eines Teilchens wissen, sondern auch weitere Eigenschaften wie etwa mögliche Energiewerte und die Wahrscheinlichkeiten, dass ein Teilchen unter gegebenen Umständen einen bestimmten Energiewert besitzt. Dazu ist es notwendig, anhand der Schrödinger-Gleichung oder eines anderen Lösungsansatzes die *Energieeigenwerte* eines Systems zu berechnen. Es wird sich herausstellen, dass in den meisten Fällen Größen wie die Energie quantisiert sind; sie können also nicht jeden beliebigen Wert annehmen, sondern nur bestimmte diskrete Werte, die durch eine entsprechende *Quantenzahl* beschrieben werden. Wenn ein Zustand durch mehrere Parameter beeinflusst wird, können auch mehrere Quantenzahlen notwendig sein, um diesen Zustand zu beschreiben.

Ein Beispiel dafür ist das Elektron in einem Wasserstoffatom, zu dessen vollständiger Beschreibung vier Quantenzahlen notwendig sind. Diese sind:

✓ **Hauptquantenzahl n :** Die *Hauptquantenzahl* n beschreibt die »Schale«, zu der der Zustand des Elektrons gehört. Für den Grundzustand gilt $n = 1$, für den nächsten Zustand $n = 2$ usw.; n kann also beliebige natürliche Zahlenwerte größer als Null annehmen: $n = 1, 2, 3 \dots$; je größer n ist, desto geringer ist die Bindungsenergie des Elektrons und desto größer ist somit die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron weiter entfernt vom Kern befindet.

✓ **Drehimpulsquantenzahl l :** Die Drehimpulsquantenzahl oder Nebenquantenzahl l gibt an, in welchem der erlaubten Drehimpulszustände sich das Elektron befindet. Bei gegebenem n kann l gerade n Werte annehmen: $l = 0, 1, 2, 3 \dots n - 1$.

✓ **Magnetquantenzahl m :** Die *magnetische Quantenzahl* m beschreibt die Komponente des Elektronen-Bahndrehimpulses in z -Richtung, daher kann m Werte von $-l$ bis $+l$ annehmen. Aus diesem Grund bezeichnet man sie manchmal auch mit m_l .

✓ **Spinquantenzahl m_s oder s :** Die *Spinquantenzahl* m_s des Elektrons beschreibt die Orientierung seines Spins zur z -Achse.



Der Spin ist der jedem Teilchen innewohnende *Eigendrehimpuls*. Die beiden möglichen Zustände für den Spin eines Elektrons $m_s = +1/2$ und $m_s = -1/2$ werden mit *up* und *down* bezeichnet.

Die Eigenzustände des gebundenen Elektrons und seine Wellenfunktion im Wasserstoffatom werden somit durch vier Quantenzahlen beschrieben, die sich folgendermaßen darstellen lassen:

✓ In Form eines Zustandsvektors: $|\psi\rangle = |n, l, m_l, m_s\rangle$

✓ In Form einer Wellenfunktion: $\psi_{n,l,m_l,m_s}(\mathbf{r}, t)$



Dieser Satz von Quantenzahlen wurde 1924 von Wolfgang Pauli gefunden. Sie legen jeweils einen einzigen Zustand eines Elektrons fest; mit ihrer Hilfe kann man das nach ihm benannte *Pauli-Prinzip* folgendermaßen formulieren: In einem Atom können keine zwei Elektronen in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen.



Zur Bestimmung der Energieeigenwerte eines quantenphysikalischen Systems ist es notwendig, nach Ermittlung der Wellenfunktion eines Systems die Schrödinger-Gleichung in Bezug auf diese Energiewerte zu lösen.

Wie weiter oben bereits betont wurde, gibt es in der mikroskopischen Welt sehr viele unterschiedliche Situationen, die mathematisch beschrieben und quantenmechanisch berechnet werden können. Das hat unmittelbar zur Folge, dass in verschiedenen Fällen neben den im Allgemeinen interessanten Größen wie den Energiewerten auch Größen berechnet werden können, die nur bei der jeweiligen Problemstellung von Interesse sind. Beispiele dafür sind der Transmissions- und der Reflexionskoeffizient (siehe Kapitel 4), wobei ersterer die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein Teilchen eine Potentialbarriere durchdringt, ein Effekt, der in der klassischen Physik nicht auftritt. Ein weiteres Beispiel für eine Größe, die nur in besonderen Situationen eine Rolle spielt, ist die Bestimmung von Streuquerschnitten, die bei der Behandlung von Streuproblemen erfolgt; Sie lernen sie in Kapitel 13 kennen.

Wie geht man bei der Lösung eines quantenmechanischen Problems vor?

Sie sollten sich zu Beginn dieses Abschnitts zwei Tatsachen bewusst machen:

- ✓ Es gibt nur wenige Aufgaben in der Quantenmechanik, die exakt und vollständig lösbar sind.
- ✓ Es gibt keine Standardmethode, die in jedem Fall direkt zum Ziel führt, wenn Sie sie nur sorgfältig genug anwenden.

An dieser Stelle dürfen Sie jetzt einmal kurz seufzen, aber dann sollten Sie sich den guten Neuigkeiten widmen: Physiker lieben es über alles, Probleme so einfach wie möglich zu halten, und diesem Prinzip bleiben sie natürlich auch in der Quantenphysik treu. Das bedeutet für Sie insbesondere:

✓ Die Aufgaben, die gelöst werden sollen, werden immer auf ein einfaches Problem zurückgeführt. In den meisten Fällen, die Sie im Verlauf dieses Buches kennen lernen, spielt die Zeitabhängigkeit keine Rolle; Sie können also auf die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung verzichten und rechnen mit der einfacheren zeitunabhängigen Form. Darüber hinaus werden zunächst nur eindimensionale Aufgaben behandelt; die Dreidimensionalität kommt erst ins Spiel, wenn Sie einige Erfahrung gesammelt haben.

✓ Wenn man sich erst einmal in die Gedankenwelt der Quantenphysik eingearbeitet hat (und Sie sind in diesem Kapitel schon mitten drin), erkennt man, welche Möglichkeiten die Mathematik bietet, um Aufgaben einfach zu lösen. Dazu gehört auch die Verwendung von Leiteroperatoren, die in Kapitel 5 eingeführt werden, und die Ihnen noch sehr viel Arbeit abnehmen werden.

✓ Wie Sie bereits wissen, kann man den Zustand eines Systems mithilfe unterschiedlicher mathematischer Methoden untersuchen. Das bietet Ihnen vor allem den Vorteil, dass Sie immer auf die anschauliche Form der Wellendarstellung zurückgreifen können, wenn Ihnen der Umgang mit Zustandsvektoren am Anfang noch zu abstrakt ist.

Die folgende Anleitung soll Ihnen zeigen, wie man im Allgemeinen an ein quantenmechanisches Problem herangeht und welche Schritte man machen muss, um zu einer Lösung zu kommen:

1. Die Schrödinger-Gleichung aufstellen.

Die allgemeine Form der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in einer Dimension lautet:

$$H\psi(r) = E\psi(r)$$

2. Den Hamilton-Operator bestimmen.

Wie Sie wissen, beschreibt der Hamilton-Operator die Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems. Somit enthält er immer einen Term, der die kinetische Energie der Teilchen beschreibt; bei Anwesenheit eines äußeren Potentials gibt es einen zusätzlichen

Term, der die potentielle Energie beschreibt. Das bedeutet, dass Sie zunächst untersuchen müssen, ob ein Potential $V(x)$ vorhanden ist und, wenn dies der Fall ist, in welcher Form man dieses Potential darstellen kann. Im Fall des quantenmechanischen harmonischen Oszillators (der in Kapitel 5 ausführlich dargestellt wird) enthält die Schrödinger-Gleichung beispielsweise neben dem Ausdruck für die kinetische Energie einen weiteren Term, der das quadratische Potential des harmonischen Oszillators beschreibt:

$$H\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

3. Randbedingungen aus der Aufgabenstellung ablesen.

Die Randbedingungen hängen immer von der jeweiligen Aufgabenstellung ab. Da sie bei der Lösung des jeweiligen Problem eine wichtige Rolle spielen, sollten Sie diese vor Beginn der Rechnung aus der Aufgabe ablesen und notieren.

Man betrachtet beispielsweise häufig Potentiale, die in verschiedene Regionen zerfallen, innerhalb derer sie relativ konstant sind, wobei der Übergang von einem Bereich zum anderen innerhalb einer sehr kurzen Distanz erfolgt. Da $\psi(x)$ und seine Ableitung $\psi'(x)$, auch wenn das Potential nur stückweise stetig ist, *stetige Funktionen* sein müssen (auf die mathematische Argumentation wird an dieser Stelle verzichtet), kann man daraus die *Rand-* oder *Anschlußbedingungen* ableiten. Liegt die Sprungstelle zwischen den Bereichen I und II zum Beispiel bei a , so kann man die Randbedingung folgendermaßen formulieren

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$$

$$\psi'_I(a) = \psi'_{II}(a)$$

4. Die Funktion bestimmen, die diese Gleichung unter diesen Randbedingungen erfüllt.

In diesem Schritt müssen Sie die Schrödinger-Gleichung, also eine Differentialgleichung zweiter Ordnung lösen. Das kann sehr einfach sein, wie sich bei der Behandlung von Potentialtöpfen zeigen wird; das kann aber auch sehr viel aufwendiger sein. Und aus genau diesem Grund wurde dieses Buch geschrieben: In den folgenden Kapitel wird anhand zahlreicher quantenmechanischer Aufgabenstellungen erläutert, auf welchem Wege man jeweils zum Ziel gelangt.

5. Normierung

Wie bereits in dem Abschnitt »Zustände und Wahrscheinlichkeiten in der Quantenphysik« erläutert wurde, muss sicher gestellt werden, dass sich die Wahrscheinlichkeiten $|\psi(x)|^2 dx$, ein Teilchen zwischen x und dx zu finden, zu 1 summieren, wenn man über den gesamten betrachteten Bereich, beispielsweise von $x = 0$ bis $x = a$, integriert. Mathematisch ausgedrückt bedeutet das:

$$1 = \int_0^a |\psi(x)|^2 dx$$

Diese Bedingung kann beispielsweise bei der Berechnung von unbekannten Konstanten innerhalb einer Wellenfunktion ein sehr nützliches Hilfsmittel sein.

6. Eigenwerte bestimmen

Nachdem man die Wellenfunktion bestimmt und geeignet normiert hat, löst man die Schrödinger-Gleichung in Bezug auf die Eigenwerte. Da dies ein sehr wichtiger Bestandteil der Beschreibung von quantenmechanischen Systemen ist und somit einen Schwerpunkt dieses Buches bildet, möchte ich an dieser Stelle nur darauf hinweisen, dass Sie in den folgenden Kapiteln ausreichend Gelegenheit haben werden, um Erfahrung mit der Lösung von Eigenwertproblemen zu sammeln.



Diese Anleitung kann Ihnen nur einen Leitfaden zur Lösung von Problemen bieten, aber im Verlauf dieser Schritte zeigt sich gewöhnlich auch, welche Fragen in einem bestimmten Fall des weiteren von Interesse sind und welche Informationen sie liefern können. Verlieren Sie daher an dieser Stelle keinesfalls den Mut, Sie werden im Verlauf dieses Buches ein Gespür dafür bekommen, welche Aufgaben Sie auf welche Weise lösen und welche Fragen Sie an welcher Stelle stellen müssen.

Die Quantenmechanik und die folgenden Kapitel

Nachdem Sie in den vorangegangenen Abschnitten bereits eine Reihe von grundlegenden Begriffen, Zusammenhängen und Konzepten kennen gelernt haben, die in der Quantenphysik eine wichtige Rolle spielen, wird in den folgenden Abschnitten der Aufbau der verschiedenen Teile dieses Buches erläutert. Wie Sie wissen, gehen Physiker gerne an ein Teilgebiet heran, indem sie zunächst einfache Fragen stellen und beantworten, um anschließend zu den komplexeren Fragestellungen überzugehen. Genau so ist auch dieses Buch aufgebaut: Nachdem Sie sich das mathematische Handwerkszeug erworben haben, bearbeiten Sie zuerst einfache eindimensionale Problemstellungen. Im weiteren Verlauf des Buches erfolgt dann der Übergang zu dreidimensionalen Problemen und später dann zur Betrachtung von Vielteilchen-Systemen.

In den folgenden Abschnitten dieses Kapitels geht es darum, Sie auf inhaltliche Zusammenhänge hinzuweisen, die *ohne Mathematik* zu verstehen sind und die Ihnen helfen sollen, den Überblick auch dann zu behalten, wenn die Mathematik in den folgenden Kapiteln »etwas heftig« wird.



Blättern Sie beim Bearbeiten der einzelnen Kapitel immer wieder zu diesem Kapitel zurück, wenn Sie das Gefühl haben, vor lauter Rechnungen den Überblick über die physikalischen Inhalte zu verlieren.

Teil I: Ist die Welt nicht klein? Die Grundlagen

In Kapitel 3 lernen Sie zunächst den Umgang mit Wahrscheinlichkeiten und die Darstellung anhand von Zustandsvektoren kennen. Das führt unmittelbar zu der bereits mehrfach angesprochenen Dirac-Notation (Bra-Ket-Darstellung), mit der Sie sich möglichst schnell vertraut machen sollten.

Wie bereits weiter oben erläutert wurde, werden in der Quantenmechanik physikalische Größen durch Operatoren dargestellt. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, einige Eigenschaften dieser Größen zusammenstellen und den mathematischen Umgang mit ihnen zu üben.

Im Anschluss daran wird mithilfe dieser Darstellung von Messgrößen durch Operatoren eine Beziehung hergeleitet, die in der Quantenmechanik von zentraler Bedeutung ist, die *Heisenbergsche Unschärferelation*.

Am Ende dieses in die Mathematik einführenden Kapitels wird schließlich noch einmal auf den Zusammenhang zwischen der Darstellung anhand einer Wellenfunktion $\psi(r)$ im Ortsraum und der Dirac-Notation eingegangen.



Daraus ergibt sich schließlich, dass sich die zentrale Gleichung der Quantenmechanik, die Schrödinger-Gleichung, auf zwei Arten darstellen lässt:

$$H\psi(r) = E\psi(r)$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Beide Darstellungen sind absolut gleichwertig. Es hängt immer von der jeweils betrachteten Situation ab, mit welcher von beiden man am besten arbeitet.

Teil II: Gebunden, aber unbestimmt: Teilchen in gebundenen Zuständen

Die einfachsten Probleme, mit denen man es in der Quantenmechanik zu tun hat, betreffen Teilchen, die in eindimensionalen Potentialen gefangen gehalten werden oder zumindest von ihnen beeinflusst werden. Diese Problemstellungen bilden daher das Thema des zweiten Teils dieses Buches. Die dabei betrachteten Probleme werden allerdings auf äußerst unterschiedliche Weise behandelt:

✓ In Kapitel 4 geht es um Potentialtöpfe (siehe Abbildung 2.1a), Potentialstufen (Abbildung 2.1b) und Potentialbarrieren (Abbildung 2.1c). Hier verwendet man gewöhnlich die Wellenfunktion zur Darstellung und Berechnung.

✓ Auch beim harmonischen Oszillator handelt es sich um ein Teilchen in einem Potential, das allerdings eine parabolische Form hat (siehe Abbildung 2.1d). Wie sich in Kapitel 5 herausstellen wird, besteht die einfachste Methode zur Behandlung dieses Problems in der Verwendung von Leiteroperatoren.

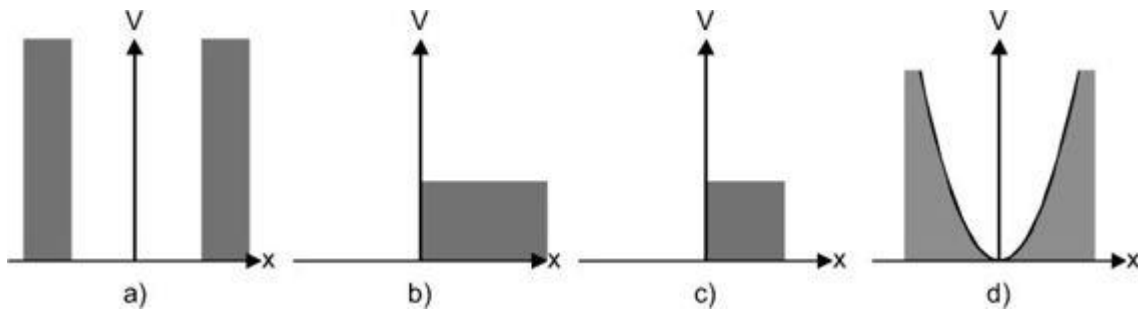


Abbildung 2.1: a) Potentialtopf, b) Potentialstufe, c) Potentialbarriere, d) Potential eines harmonischen Oszillators

Primäres Ziel der in Kapitel 4 behandelten Probleme ist natürlich die Ermittlung der Wellenfunktion. Darüber hinaus ist man bei Potentialtöpfen aber auch an der Frage interessiert, welche energetischen Zustände ein Teilchen einnehmen kann. Bei Potentialstufen und Potentialbarrieren stellt sich des weiteren die Frage, inwieweit das Teilchen die Stufe oder Barriere überwinden kann und nicht einfach an ihnen reflektiert wird. Dies wird durch die sogenannten *Reflexions-* und *Transmissionskoeffizienten* beschrieben, die sich aus der Wellenfunktion relativ einfach bestimmen lassen.

Die Untersuchung des harmonischen Oszillators spielt in der Quantenphysik eine wichtige Rolle, da der entsprechende Hamilton-Operator bei allen Problemen mit quantisierten Schwingungen auftritt, wie beispielsweise in der Theorie der Molekül- und Kristallschwingungen. Darüber hinaus bietet die Untersuchung des harmonischen Oszillators eine ausgezeichnete Möglichkeit, um die allgemeinen Prinzipien und den Formalismus der Quantenphysik besser kennen zu lernen.

Man kann die Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator mithilfe von

Standardmethoden der Analysis zur Lösung von Differentialgleichungen lösen; dieser Weg führt zu den Hermite-Polynomen, die Sie in Kapitel 5 kennen lernen werden. Man kann aber auch eine völlig andere, algebraische Methode benutzen, bei der man H durch das Quadrat eines Operators

darstellt. In diesem Fall definiert man drei neue Operatoren, die *Leiteroperatoren* a und $a^\dagger$ und den *Besetzungszahloperator* N , um das Eigenwertproblem zu lösen. Diese elegante Art der Lösung wird in Kapitel 5 ausführlich erläutert. In diesem Fall erleichtert eine auf den ersten Blick undurchsichtige Mathematik die Lösung einer Problemstellung bei weitem.

Teil III: Alles dreht sich um Drehimpulse und Spin

In diesem Teil wird das Konzept der Untersuchung physikalischer Eigenschaften mithilfe algebraischer Methoden weiter verfolgt. Dabei werden zwei Größen betrachtet, die bei der Beschreibung jedes quantenmechanischen Teilchens von großer Bedeutung sind:

✓ Der Drehimpuls (Kapitel 6)

✓ Der Spin (Kapitel 7)

Der Drehimpuls ist eine Größe, die auch zur Beschreibung makroskopischer Körper verwendet wird. In der klassischen Physik ist er definiert als

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Dabei ist $\mathbf{r}$ der Radiusvektor der Kreisbahn und $\mathbf{p}$ der Impuls des Körpers. Im Unterschied dazu gibt es zum Spin kein klassisches Gegenstück. Der Spin ist eine Eigenschaft, die jedes mikroskopische Teilchen besitzt und die daher bei seiner Beschreibung berücksichtigt werden muss.

Entsprechend den Regeln der Quantenmechanik lässt sich der Beobachtungsgröße Drehimpuls ein Operator zuordnen, mit dem sich eine Eigenwertgleichung aufstellen lässt, durch die die Eigenfunktionen des Drehimpulses und seine reellen Eigenwerte festgelegt werden. Dieser Drehimpulsoperator wird durch folgende Gleichung definiert:

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$$

Daraus ergibt sich unmittelbar, dass der Drehimpulsoperator eine dreidimensionale Größe ist, die aus den Komponenten L_x , L_y und L_z besteht. Betrachtet man nun die algebraischen Beziehungen zwischen diesen Operatoren, so zeigt sich, dass sie nicht miteinander kommutieren.



Da in der Quantenmechanik aber die Regel gilt, dass die zu nicht vertauschbaren Operatoren gehörigen Größen nicht gleichzeitig beobachtbar sind, so können sie auch keine gemeinsamen Eigenzustände haben. Mithilfe weiterer algebraischer Überlegungen lässt sich aber leicht zeigen, dass L^2 , das Quadrat des Drehimpulses, mit den einzelnen Drehimpulskomponenten vertauscht. Es ist üblich, L_z , die z-Komponente des Drehimpulses zu wählen, um die Eigenwerte der gemeinsamen Eigenfunktionen mit L^2 zu bestimmen.

Die weitere Behandlung des Problems erfolgt dann auf die gleiche Weise wie beim harmonischen Oszillator. Man führt Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein, mit deren Hilfe man die Eigenzustände bestimmt. Dabei arbeitet man wieder mit der Dirac-Notation, das heißt, man verwendet die basisunabhängige Darstellung durch Bra- und Ket-Vektoren.

Im Anschluss an die algebraische Behandlung des Drehimpulses werden die

Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses bestimmt. Da hier ein enger Zusammenhang mit der Rotation besteht, ist es sinnvoll, zu *Kugelkoordinaten* überzugehen. In Analogie zum harmonischen Oszillator erhält man auch bei der Behandlung des Drehimpulses eine Differentialgleichung, deren Lösungen bekannte Funktionen der mathematischen Physik sind. Dabei zeigt sich, dass sich als gemeinsame Eigenfunktionen für die Operatoren L^2 und L_z des Bahndrehimpulses die *Kugelfunktionen* ergeben. Ihre Definition und ihre wichtigsten Eigenschaften werden am Ende von Kapitel 6 zusammengestellt.

Wie der Stern-Gerlach-Versuch zeigt, der zu Beginn von Kapitel 7 vorgestellt wird, besitzt das Elektron einen inneren Drehimpuls, der Spin genannt wird; er kann in einer beliebig vorgegebenen Richtung nur die Werte $+\hbar/2$ und $-\hbar/2$ annehmen. Wie oben bereits erwähnt wurde, besitzen alle Elementarteilchen einen Spin. Dabei unterscheidet man zwei unterschiedliche Klassen von Teilchen:

- ✓ **Fermionen:** Fermionen haben einen *halbzahligen Spin*.
- ✓ **Bosonen:** Bosonen haben einen *ganzzahligen Spin* (einschließlich Null).

Da der Spin ebenso wie der Bahndrehimpuls ein Drehimpuls ist, gelten die gleichen algebraischen Eigenschaften, und die Spinoperatoren S lassen sich analog zu den Drehimpulsoperatoren L beschreiben.

Teil IV: Die Quantenphysik wird dreidimensional

Die bisherige Darstellung behandelte insbesondere Teilchen in eindimensionalen Systemen. Dabei bestand die Untersuchung des Systems im wesentlichen in der Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung. In der Wellenmechanik ist dies eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung. Wie in Teil II gezeigt wird, reduziert sie sich für ein eindimensionales System auf eine gewöhnliche Differentialgleichung, die sich relativ einfach lösen lässt.

Da die uns umgebende Welt aber dreidimensional ist, stellt sich natürlich auch die Frage, wie man mit der Schrödinger-Gleichung im Dreidimensionalen umgeht. Ihre Erfahrung sagt Ihnen zu Recht, dass ein Problem im Allgemeinen sehr viel schwieriger zu lösen ist, wenn ein System eine größere Anzahl von Freiheitsgraden besitzt. Doch auch dann gibt es Wege, die die Lösung vereinfachen: so besitzt der Hamilton-Operator oftmals Symmetrieeigenschaften, die eine Lösung erleichtern. In manchen Fällen erhält man beispielsweise durch eine Änderung der Variablen eine partielle Differentialgleichung, die *separiert*, also abgespaltet werden kann. Dadurch zerfällt das Eigenwertproblem in mehrere einfache Eigenwertprobleme.

Je nach Fragestellung verwendet man bei dreidimensionalen Problemen

- ✓ Rechtwinklige Koordinaten
- ✓ Kugelkoordinaten (sphärische Polarkoordinaten)

Abbildung 2.2 zeigt eine Darstellung der rechtwinkligen Koordinaten x , y und z (links) und der Kugelkoordinaten r , θ und ϕ .

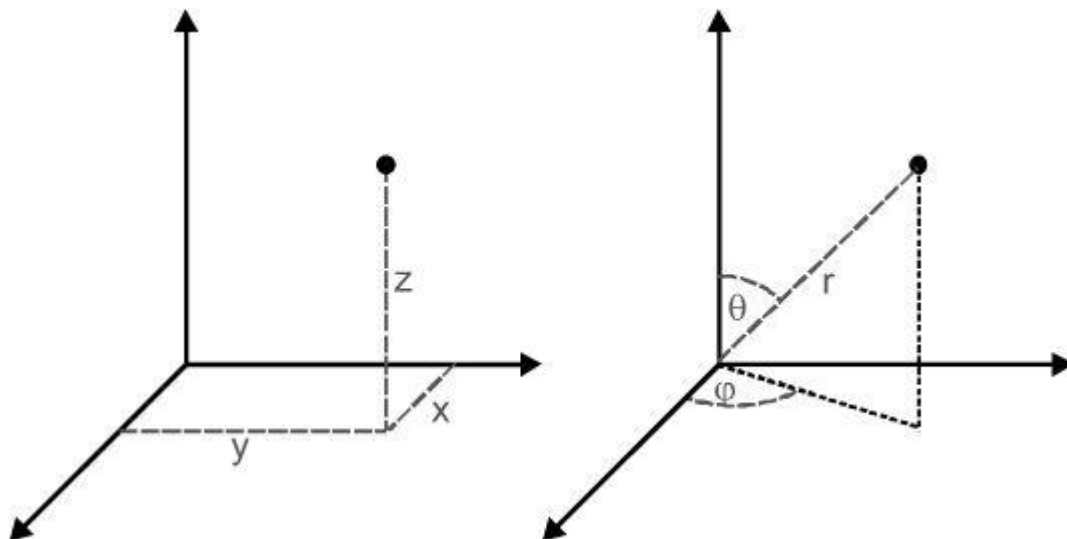


Abbildung 2.2: Rechtwinklige Koordinaten (links) und Kugelkoordinaten (rechts)

In Kapitel 8 wird zunächst gezeigt, dass man bei bestimmten Aufgaben mit rechtwinkligen Koordinaten arbeitet und die x-, y- und z-Abhängigkeit voneinander abspalten und die Lösung für jede Dimension getrennt berechnen kann. Das heißt, man verwandelt die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung in drei eindimensionale Schrödinger-Gleichungen:

$$\begin{aligned}\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + V_x(x) X(x) &= E_x X(x) \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) + V_y(y) Y(y) &= E_y Y(y) \\ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) + V_z(z) Z(z) &= E_z Z(z)\end{aligned}$$

Im Anschluss daran werden die Ihnen bereits aus Teil II bekannten Beispiele eines freien Teilchens, eines Teilchens in einem rechtwinkligen Potential und in einem harmonischen Oszillator behandelt – jetzt allerdings nicht mehr eindimensional sondern im realen dreidimensionalen Raum.

In Kapitel 9 wird die Bewegung von Teilchen in *Zentralpotentialen* untersucht, das heißt, in einem Potential das nur vom Abstand r des Teilchens vom Kraftzentrum, nicht aber von der Richtung des Vektors $\mathbf{r}$ abhängt, der vom Zentrum zum Teilchen weist (siehe Abbildung 2.2 rechts). Da dieses Potential Drehsymmetrie besitzt, ist es sinnvoll, zu Kugelkoordinaten überzugehen. Dann kann man die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$ vollständig separieren, so dass man eine *Radialgleichung* und einen *winkelabhängigen Teil* erhält. Die Wellenfunktion lautet in diesem Fall:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Dabei ist die Radialgleichung eine Differentialgleichung, die nur von r abhängt und sich somit mathematisch lösen lässt.

Bei der Untersuchung des sphärisch symmetrischen Kastenpotentials am Ende von Kapitel 9 wird schließlich dargestellt, wie man die Radialgleichung mithilfe von Funktionen löst, die aus der Mathematik wohlbekannt sind.

Das *Wasserstoffatom* ist das einfachste Atom des Periodensystems. Es besteht aus einem Proton und einem Elektron, die sich gegenseitig umkreisen. Es gehört zu den größten Leistungen der Quantenmechanik, dass sie in der Lage ist, dieses System vollständig bis in die letzten Einzelheiten zu beschreiben. Es muss an dieser Stelle aber auch gesagt werden, dass das Wasserstoffatom in dieser Beziehung eine Ausnahme bildet. Alle anderen Atome sind zu komplex, als dass sie vollständig beschrieben werden könnten. Dennoch liefert die vollständige quantenmechanische Beschreibung des Wasserstoffatoms den Schlüssel zum Verständnis des Aufbaus und der Eigenschaften aller Atome, inklusive einer Erklärung des Periodensystems der

Elemente.

Wenn Sie die Bewegung eines Elektrons um ein Proton betrachten, das sich auf einer Bahn mit dem Radius r_p um den Schwerpunkt der Massen bewegt, so haben Sie es mit zwei sich bewegenden Körpern zu tun; dies macht die Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom zunächst einmal sehr kompliziert. Sie lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$$

Dabei beschreiben die beiden ersten Terme die kinetischen Energien der beiden Teilchen, der dritte die elektrostatische Wechselwirkung zwischen ihnen.

Wenn man nun annimmt, das sich das Proton in Ruhe befindet und somit $r_p = 0$ ist, so vereinfacht sich das Problem erheblich. In diesem Fall ist die Gleichung zwar nicht mehr exakt, aber sie bietet den Vorteil, dass sie so sehr viel leichter zu lösen ist und immer noch eine Fülle von neuen Informationen liefert. Die Schrödinger-Gleichung lautet jetzt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e|} \psi(\mathbf{r}_e) = E \psi(\mathbf{r}_e)$$

Da das Potential hier nur vom Relativabstand abhängt, führt man Relativ- und Schwerpunktskoordinaten ein sowie die reduzierte Masse $m = m_e m_p / (m_e + m_p)$ und die Gesamtmasse $M = m_e + m_p$. Als Folge erhält man zwei Schrödinger-Gleichungen, die man unabhängig voneinander lösen kann.

Bei dieser Lösung werden Sie sehen, dass sich die Wellenfunktion wiederum in einen radialen und einen winkelabhängigen Teil aufspalten lässt. Die Untersuchung dieser Komponenten erfolgt schließlich mithilfe des mathematischen Weges, den Sie bereits in Kapitel 9 bei der Untersuchung von Zentralpotentialen kennen gelernt haben. Darüber hinaus werden Sie in diesem Kapitel die anschauliche Bedeutung der vier Quantenzahlen kennen lernen, die zur vollständigen Beschreibung des Elektrons in einem Wasserstoffatom notwendig sind.

Teil V: Komplexe Systeme

Nach der Behandlung des Wasserstoffatoms hört die Quantenmechanik endgültig damit auf, »einfach« zu sein, was aber nicht bedeutet, dass man über komplexere Systeme keine Aussagen machen kann.

Wenn man es mit mehr als zwei Teilchen oder gar einer Vielzahl von Teilchen zu tun hat, dann ist es unmöglich, exakte Lösungen zu bestimmen, da die Physik und damit vor allem auch die Mathematik beliebig kompliziert wird. Allerdings gibt es verschiedene Möglichkeiten, um auch weiterhin wichtige Erkenntnisse zu gewinnen. Man betrachtet in diesem Fall Systeme nur unter bestimmten Aspekten und verzichtet auf den Versuch, exakte, vollständige Lösungen zur Beschreibung zu finden. Eine Möglichkeit besteht beispielsweise darin, Teilchen in folgende Gruppen zu unterteilen:

- ✓ Unterscheidbare Teilchen
- ✓ Identische (ununterscheidbare) Teilchen



Wenn man ein Viel-Teilchen-System aus *unterscheidbaren* Teilchen betrachtet, stellt sich zunächst die Frage nach der Wechselwirkung zwischen diesen Teilchen. Kann man diese vernachlässigen, so bedeutet das, dass man ein System aus N wechselwirkungsfreien Teilchen untersucht. In diesem Fall ist die Wellenfunktion das Produkt aus den N Einteilchen-Wellenfunktionen, der zugehörige Energieeigenwert ist die Summe aus den Einteilchen-Energien.

Betrachtet man dagegen *identische*, d. h. ununterscheidbare Teilchen, so ist die Situation komplizierter. In diesem Fall kann man das Viel-Teilchen-System mithilfe des *Permutations-* oder *Austauschoperators* P_{ij} untersuchen, der die Teilchen i und j miteinander vertauscht. Da zweimaliges Anwenden zum Ausgangszustand zurückführt, gilt $P_{ij}^2 = 1$; somit hat der Austauschoperator P_{ij} die möglichen Eigenwerte $+1$ und -1 , wenn eine Wellenfunktion eine Eigenfunktion von P_{ij} ist. Bei der weiteren Untersuchung zeigt sich, dass es zwei Arten von Eigenfunktionen des Austauschoperators gibt:

- ✓ Die Wellenfunktion ψ ist *symmetrisch* bei Teilchenaustausch; das bedeutet:

$$P_{ij}\psi_s = \psi_s$$

- ✓ Die Wellenfunktion ψ ist *antisymmetrisch* bei Teilchenaustausch; das bedeutet:

$$P_{ij}\psi_a = -\psi_a$$



Dieser Symmetriecharakter eines Systems ist eine *Erhaltungsgröße*. Das

bedeutet, dass ein Viel-Teilchen-System bei Teilchenaustausch in jedem Fall entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist und diese Eigenschaft auch immer beibehält.

Ob ein System identischer Teilchen symmetrisch oder antisymmetrisch ist, hängt von der Natur der Teilchen ab. Wie Wolfgang Pauli zeigen konnte, besteht ein Zusammenhang zwischen Spin und Symmetriecharakter:

✓ Teilchen mit halbzahligem Spin haben antisymmetrische Wellenfunktionen; sie heißen *Fermionen*.

✓ Teilchen mit ganzzahligem Spin haben symmetrische Wellenfunktionen; sie heißen *Bosonen*.



Das ist von großer Bedeutung für die gesamte Quantenphysik und führt schließlich zum Pauli-Prinzip, das am Ende von Kapitel 11 erläutert wird. Wie Sie sehen, bietet die Quantenmechanik erheblich mehr als die Lösung der Schrödinger-Gleichung!

Völlig andere Ansätze machen die *Störungs-* und die *Streutheorie*. Die Störungstheorie beschäftigt sich mit der Frage, was passiert, wenn ein Teilchen ein zusätzliches Potential erfährt, etwa ein elektrisches oder magnetisches Feld. Dieses muss natürlich im Hamilton-Operator berücksichtigt werden, so dass die Schrödinger-Gleichung in den meisten Fällen unlösbar ist. In der Störungstheorie geht man davon aus, dass die durch das zusätzliche Feld hervorgerufene Änderung der Energieeigenwerte nur klein ist, und versucht, die genauen Werte durch ein iteratives Verfahren anzunähern.

Die Streutheorie betrachtet schließlich zwei Teilchen, die sich aufeinander zu bewegen, wechselwirken und sich dann wieder voneinander entfernen. Ziel der Streutheorie ist es vorauszusagen, in welche Richtung sich die Teilchen nach der Wechselwirkung fortbewegen.

In die Matrix überführen: Was sind Zustandsvektoren?

In diesem Kapitel ...

- ▶ Erstellen von Zustandsvektoren
- ▶ Dirac-Schreibweise von Zustandsvektoren
- ▶ Bra- und Ketvektoren
- ▶ Matrizen
- ▶ Übergang zur Wellenmechanik

In der klassischen Physik kann man jedem physikalischen System, dessen Zustand oder dessen zeitliche Veränderung man beschreiben will, eine Anzahl von Größen zuordnen. Dabei besitzt *jede* dieser Größen zu jedem Zeitpunkt einen *wohldefinierten Wert*; wenn man diese Werte angibt, kann man den Zustand des Systems vollständig beschreiben. Darüber hinaus kann man die zeitliche Entwicklung des Systems bestimmen, wenn man den Zustand des Systems zu einem gegebenen Anfangszeitpunkt kennt.

In der Quantenphysik, die sich mit der Untersuchung mikroskopischer Objekte und Systeme beschäftigt, ist das nicht der Fall. Man kann einem quantenmechanischen Teilchen keinen exakten Ort zuschreiben, sondern nur eine *Wahrscheinlichkeit* angeben, das Teilchen in einem bestimmten Bereich des Raumes zu finden, wenn man eine Ortsmessung durchführt.

Um sich mit dem Umgang mit Wahrscheinlichkeiten vertraut zu machen, kann man sehr gut einen Würfel verwenden und beispielsweise die Wahrscheinlichkeiten berechnen, mit denen die verschiedenen Werte fallen. Anschließend kann man diese Werte in einer Art und Weise darstellen, die in der Quantenphysik üblich ist. Dazu zählt sowohl die Darstellung in Form von *Matrizen* als auch von *Zustandsvektoren* oder *Wellenfunktionen*.

Ein Schwerpunkt dieses Kapitels besteht demzufolge darin, zu erläutern, wie man mit Wahrscheinlichkeiten in der Quantenphysik umgeht. Wie bereits in Kapitel 2 dargestellt wurde, besteht die geläufigste Methode der Darstellung in der Verwendung der *Dirac-* oder *Bra-Ket-Schreibweise*. Daher werden Sie im folgenden bei der Behandlung der Wahrscheinlichkeit bereits mit dieser Schreibweise vertraut gemacht.

Darüber hinaus lernen Sie in diesem Kapitel das mathematische Handwerkszeug kennen, das Sie für den weiteren Umgang mit der Quantenphysik unbedingt benötigen. Keine Angst, die Mathematik ist in diesem Buch möglichst einfach gehalten, aber ohne geht es in der

Quantenmechanik nun einmal nicht. Erschrecken Sie vor allem nicht vor Begriffen, die komplizierter klingen als sie tatsächlich sind; meistens gibt es eine einfache Erklärung. So ist beispielsweise der in diesem Buch immer wieder erwähnte Hilbert-Raum nichts weiter als ein bestimmter Vektorraum, der auf Grund seiner mathematischen Struktur die Behandlung quantenphysikalischer Probleme deutlich vereinfacht.

Da in der Quantenmechanik Messgrößen in Form von *Operatoren* dargestellt werden, ist es von grundlegender Bedeutung, sich im Umgang mit Operatoren zu üben. Sie haben in Kapitel 2 bereits den Hamilton-Operator kennen gelernt, mit dem Sie sich im Verlauf dieses Buches noch sehr ausführlich beschäftigen werden. Darüber hinaus sind natürlich der Orts- und der Impulsoperator grundlegende Größen der Quantenphysik. Aus diesem Grund werden im zweiten Teil dieses Kapitels verschiedene Arten von Operatoren mit bestimmten nützlichen Eigenschaften eingeführt, und die Anwendung der Operator-Mathematik wird ausführlich erläutert.

Nach der Einführung von Bra- und Ket-Vektoren und hermitescher Operatoren folgt eine Rechnung, bei der von wenigen grundlegenden Definitionen ausgehend die *Heisenberg'sche Unschärferelation* hergeleitet wird. Anhand dieses Beispiels werden Sie erkennen, dass die Anwendung der Dirac-Schreibweise die Darstellung und Lösung eines quantenmechanischen Problems deutlich vereinfachen kann.

Im letzten Punkt dieses Kapitels wird schließlich der Zusammenhang zwischen der Dirac-Schreibweise, der Heisenbergschen Matrizenmechanik und der von Erwin Schrödinger entwickelten Wellenmechanik hergestellt. Am Ende des Kapitels steht schließlich eine der zentralen Gleichungen der Quantenmechanik, die *Schrödinger-Gleichung*.

Vektoren im Hilbert-Raum erstellen

In der Quantenphysik ersetzen Wahrscheinlichkeiten die absoluten Messwerte. Angenommen, Sie haben ein Würfelpaar geworfen und wollen nun die Wahrscheinlichkeiten dafür angeben, dass die Würfel bestimmte Werte zeigen. Sie erstellen eine Liste, die die relativen Wahrscheinlichkeiten enthält, dass eine 2, 3, 4, ..., 12 fällt:

Summe der Augen Anzahl der Möglichkeiten, diese Zahl zu würfeln 2 1 3 2 4 3 5 4 6 5 7 6 8 5 9 4 10 3 11 2 12 1 Mit anderen Worten, eine 3 zu werfen ist doppelt so wahrscheinlich wie eine 2, und eine 5 ist viermal so wahrscheinlich wie eine 2 usw. Um sie besser verfolgen zu können, können Sie die relativen Wahrscheinlichkeiten nun in einen Vektor übertragen (wenn Sie »Vektoren« aus der Physik kennen, müssen Sie berücksichtigen, dass hier die Komponenten- und nicht die Länge-Richtung-Schreibweise gemeint ist):

1
2
3
4
5
6
5
4
3
2
1

Jetzt kommen Sie also der Art und Weise, wie Quantenphysik funktioniert, schon etwas näher. Hier steht ein Vektor mit der Zahl der Möglichkeiten für die verschiedenen Zustände, die die beiden Würfel einnehmen können. Allerdings sollte die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 sein. Die Summe der ursprünglichen Zahlen ist 36; also sollten die Einträge durch 36 dividiert werden:

$$\begin{pmatrix} 1/36 \\ 2/36 \\ 3/36 \\ 4/36 \\ 5/36 \\ 6/36 \\ 5/36 \\ 4/36 \\ 3/36 \\ 2/36 \\ 1/36 \end{pmatrix}$$

Allerdings arbeitet die Quantenphysik nicht direkt mit Wahrscheinlichkeiten, sondern mit *Wahrscheinlichkeitsamplituden*, die die Quadratwurzeln aus den Wahrscheinlichkeiten sind. Um die aktuelle Wahrscheinlichkeit zu finden, dass ein Teilchen sich in einem bestimmten Zustand befindet, muss man die Wellenfunktionen addieren, die gerade durch diese Vektoren ausgedrückt werden, und dann quadrieren (in Kapitel 1 wird erklärt warum). Um die Wahrscheinlichkeitsamplituden zu erhalten, bildet man also die Quadratwurzeln:

$$\begin{pmatrix} 1/6 \\ 2^{1/2}/6 \\ 3^{1/2}/6 \\ 2/6 \\ 5^{1/2}/6 \\ 6^{1/2}/6 \\ 5^{1/2}/6 \\ 2/6 \\ 3^{1/2}/6 \\ 2^{1/2}/6 \\ 1/6 \end{pmatrix}$$

Jetzt kann man die Wahrscheinlichkeit, eine Zahlenkombination zwischen 2 und 12 zu werfen, im Vektor ablesen; die Wahrscheinlichkeit, eine 2 zu werfen, ist $1/6$, eine 3 zu werfen $2^{1/2}/6$ usw.

Mit der Dirac-Schreibweise das Leben vereinfachen

Wenn man einen Zustandsvektor hat, der die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür angibt, dass sich ein Würfelpaar in den verschiedenen möglichen Zuständen befindet, hat man im Grunde einen Vektor im Würfelraum. Dies ist ein 11-dimensionaler Raum, der aus all den möglichen Zuständen gebildet wird, die ein Würfelpaar einnehmen kann. (Mehr über Zustandsvektoren steht im vorhergehenden Abschnitt.)

Allerdings können die Vektoren bei den meisten Problemen der Quantenphysik unendlich groß sein; ein sich bewegendes Teilchen kann sich beispielsweise in einer unendlichen Anzahl von Zuständen befinden. In der Vektorschreibweise ist es allerdings nicht einfach, mit einer so großen Zahl von Zuständen zu rechnen. Statt den ganzen Vektor jedes Mal vollständig auszuschreiben, benutzt man daher in der Quantenphysik gewöhnlich eine Schreibweise, die von dem Physiker Paul Dirac entwickelt wurde, die *Dirac-* oder *Bra-Ket-Schreibweise*.

Verkürzte Schreibweise durch Ket-Vektoren

Die Dirac-Schreibweise verkürzt den Zustandsvektor folgendermaßen zu einem Ket-Vektor: $|\psi\rangle$. Damit kann man den Zustandsvektor aus dem Würfelbeispiel als Ket-Vektor schreiben:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 2^{1/2}/6 \\ 3^{1/2}/6 \\ 2/6 \\ 5^{1/2}/6 \\ 6^{1/2}/6 \\ 5^{1/2}/6 \\ 2/6 \\ 3^{1/2}/6 \\ 2^{1/2}/6 \\ 1/6 \end{pmatrix}$$

In diesem Fall bestehen die Komponenten des Zustandsvektors aus Zahlen des 11-dimensionalen Würfelraums. Normalerweise bestehen die Komponenten allerdings aus Funktionen; das sieht dann etwa so aus:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} e^{ikx - \omega t} \\ \frac{2^{1/2}}{6} e^{i2kx - \omega t} \\ \frac{3^{1/2}}{6} e^{i3kx - \omega t} \\ \frac{2}{6} e^{i4kx - \omega t} \\ \frac{5^{1/2}}{6} e^{i5kx - \omega t} \\ \frac{6^{1/2}}{6} e^{i6kx - \omega t} \\ \frac{5^{1/2}}{6} e^{i7kx - \omega t} \\ \frac{2}{6} e^{i8kx - \omega t} \\ \frac{3^{1/2}}{6} e^{i9kx - \omega t} \\ \frac{2^{1/2}}{6} e^{i10kx - \omega t} \\ \frac{1}{6} e^{i11kx - \omega t} \end{pmatrix}$$



Man kann Funktionen als Komponenten von Zustandsvektoren verwenden, solange diese Funktionen linear unabhängig sind (und so als unabhängige Achsen im Hilbert-Raum betrachtet werden können). Im Allgemeinen ist ein Satz von Vektoren ϕ_N im Hilbert-Raum linear unabhängig, wenn die einzige Lösung der folgenden Gleichung darin besteht, dass alle Koeffizienten $a_i = 0$ sind:

$$\sum_{i=1}^N a_i \phi_i = 0$$

Solange man keinen der Vektoren als Linearkombination der anderen Vektoren ausdrücken kann, sind diese Vektoren linear unabhängig und bilden somit eine Basis im Hilbert-Raum.

Den hermitesch Konjugierten als Bra-Vektor schreiben

Zu jedem Ket-Vektor gibt es einen entsprechenden *Bra-Vektor*. (Die beiden Wörter Bra und Ket leiten sich vom englischen Wort *bracket* ab, was im folgenden Abschnitt »Spaß mit Operatoren« genauer erläutert wird.) Ein Bra-Vektor ist der hermitesch Konjugierte des entsprechenden Ket-Vektors.

Stellen Sie sich vor, Sie haben diesen Ket:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 2^{1/2}/6 \\ 3^{1/2}/6 \\ 2/6 \\ 5^{1/2}/6 \\ 6^{1/2}/6 \\ 5^{1/2}/6 \\ 2/6 \\ 3^{1/2}/6 \\ 2^{1/2}/6 \\ 1/6 \end{pmatrix}$$

Das Zeichen * steht für komplex konjugiert. (Die *komplexe Konjugation* ändert das Vorzeichen zwischen Real- und Imaginärteil einer komplexen Zahl.) Der entsprechende Bra, der in der Form $\langle\psi|$ geschrieben wird, ist gleich $|\psi\rangle^T*$. Er sieht wie folgt aus:

$$\langle\psi| = \left(\frac{1}{6} \quad \frac{2^{1/2}}{6} \quad \frac{3^{1/2}}{6} \quad \frac{2}{6} \quad \frac{5^{1/2}}{6} \quad \frac{6^{1/2}}{6} \quad \frac{5^{1/2}}{6} \quad \frac{2}{6} \quad \frac{3^{1/2}}{6} \quad \frac{2^{1/2}}{6} \quad \frac{1}{6} \right)$$



Wenn eine der Komponenten des Kets eine komplexe Zahl ist, muss man bei der Bildung des entsprechenden Bras darauf achten, dass an dieser Stelle die komplex konjugierte Zahl stehen muss. Ist beispielsweise die komplexe Zahl im Ket $a + bi$, so lautet die komplex konjugierte im Bra $a - bi$.

Bras und Kets miteinander multiplizieren: Eine Wahrscheinlichkeit von 1

Man kann auch das Produkt aus Ket und Bra bilden, es wird in der folgenden Form geschrieben:

$$\langle \psi | \psi \rangle =$$

$$\left(\frac{1}{6} \quad \frac{2^{1/2}}{6} \quad \frac{3^{1/2}}{6} \quad \frac{2}{6} \quad \frac{5^{1/2}}{6} \quad \frac{6^{1/2}}{6} \quad \frac{5^{1/2}}{6} \quad \frac{2}{6} \quad \frac{3^{1/2}}{6} \quad \frac{2^{1/2}}{6} \quad \frac{1}{6} \right)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{2^{1/2}}{6} \\ \frac{3^{1/2}}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{5^{1/2}}{6} \\ \frac{6^{1/2}}{6} \\ \frac{5^{1/2}}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{3^{1/2}}{6} \\ \frac{2^{1/2}}{6} \\ \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

Das ist einfache Matrizen-Multiplikation, und man erhält das gleiche Ergebnis wie bei der Bildung der Summe der Quadrate:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \frac{1}{36} + \frac{2}{36} + \frac{3}{36} + \frac{4}{36} + \frac{5}{36} + \frac{6}{36} + \frac{5}{36} + \frac{4}{36} + \frac{3}{36} + \frac{2}{36} + \frac{1}{36} = 1$$



Und genau so sollte es ja auch sein, da die Gesamtwahrscheinlichkeit 1 ergeben muss. Deshalb ist das Produkt aus Bra und Ket immer 1:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Wenn diese Beziehung gilt, sagt man, der Ket $|\psi\rangle$ ist *normalisiert*.

Nicht an eine Basis gebundene Zustandsvektoren: Bras und Kets

Der Grund dafür, dass man in der Quantenphysik hauptsächlich die Ket-Schreibweise benutzt, liegt darin, dass man so mit Zustandsvektoren arbeiten kann, ohne an eine bestimmte Basis gebunden zu sein. Mit anderen Worten, man ist weder an den Ortsraum, noch an den Impuls- oder Energieraum gebunden. Das ist äußerst hilfreich, da die meiste Arbeit in der Quantenphysik aus abstrakten Rechnungen besteht und man nicht all die Komponenten der Zustandsvektoren durch diese Rechnungen mitschleppen will (oftmals geht das auch gar nicht – bei manchen Rechnungen, die man durchführen will, können unendlich viele Zustände vorhanden sein).

Stellen Sie sich vor, Sie beschreiben die Zustände durch Ortsvektoren in einem dreidimensionalen Hilbert-Raum. Dort haben Sie die x-, y- und z-Achsen, die die *Basis* in Ihrem Ortsraum bilden. Das ist zwar prima, aber wahrscheinlich können Sie nicht bei all Ihren Rechnungen den Ortsraum benutzen.

Jetzt wollen Sie beispielsweise die Zustände in einem dreidimensionalen Impulsraum mit den drei Achsen p_x , p_y und p_z im Hilbert-Raum darstellen. Dann müssen Sie alle Ortsvektoren in Impulsvektoren umwandeln, indem Sie jede einzelne Komponente umschreiben und genau verfolgen, was mit jeder einzelnen Komponente während der Rechnung passiert.

Hier kommt nun Diracs Bra-Ket-Schreibweise zu Hilfe. Sie benutzen sie, um die Mathematik durchzuführen und setzen dann erst die verschiedenen Komponenten Ihrer Zustandsvektoren ein. Das ist der Trick; Sie können Ihre Rechnungen mithilfe rein symbolischer Terme durchführen, ohne dabei auf eine Basis festgelegt zu sein.

Und wenn Sie sich tatsächlich mit den Komponenten des Kets befassen müssen, wenn Sie also physikalische Antworten wollen, dann können Sie die Kets in jeder Basis benutzen, indem Sie die Komponenten auf die Achsen der Basis übertragen. Man kann beispielsweise den Ket $|\psi\rangle$ in dem durch $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$ und $\mathbf{k}$ beschriebenen Ortsraum betrachten. Diese sind Einheitsvektoren des Ortes entlang der x-, y- und z-Achsen; man muss jetzt nur die drei Komponenten von $|\psi\rangle$ entlang von $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$ und $\mathbf{k}$ finden, um die neue Formulierung des Kets, $|\phi\rangle$ genannt, zu erhalten. Das sieht im Allgemeinen folgendermaßen aus, wobei ϕ_i Einheitsvektoren in der Basis sind, zu der man wechseln will:

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N \langle \psi | \phi_i \rangle$$

Rechenregeln in der Ket-Schreibweise

Mit der Ket-Schreibweise kann man sehr viel einfacher rechnen als in der Matrixform, da man auf einige mathematische Beziehungen zurückgreifen kann. Als Beispiel folgt hier die sogenannte Schwarz'sche Ungleichung für Zustandsvektoren:

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$$

Sie besagt, dass das Quadrat des Absolutbetrags des Produkts zweier Zustandsvektoren – also $|\langle \psi | \phi \rangle|^2$ – kleiner oder gleich $\langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$ ist. Es stellt sich heraus, dass diese Gleichung das Analogon zu folgender Vektorungleichung ist:

$$|A \cdot B|^2 \leq |A|^2 |B|^2$$

Aber warum ist die Schwarz'sche Ungleichung so nützlich? Zum Beispiel, weil man die Heisenberg'sche Unschärferelation aus ihr ableiten kann, die wir ja schon in Kapitel 1 kennengelernt haben.

Hier kommen noch einige weitere Beziehungen zwischen Kets, die Ihre Rechnungen deutlich vereinfachen können. Man sagt, zwei Kets $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ sind *orthogonal*, wenn gilt:

$$|\langle \psi | \phi \rangle| = 0$$

Zwei Kets heißen *orthonormal*, wenn sie die folgenden Bedingungen erfüllen:

$$\checkmark |\langle \psi | \phi \rangle| = 0$$

$$\checkmark |\langle \psi | \psi \rangle| = 1$$

$$\checkmark |\langle \phi | \phi \rangle| = 1$$

Mit diesem Wissen im Hinterkopf sind Sie nun so weit, dass Sie mit Operatoren arbeiten können.

Sie bringen die Physik in's Spiel: Operatoren

Eine der wichtigsten Grundlagen der Quantenphysik besteht darin, dass den Messgrößen der klassischen Physik in der Quantenmechanik Operatoren entsprechen. Sie kennen bereits einige der wichtigsten Operatoren, mit denen Sie in den folgenden Kapiteln arbeiten werden, wie etwa den Orts- und den Impulsoperator oder den Hamilton-Operator. Nach der Definition von Operatoren im Allgemeinen werden in den folgenden Abschnitten sowohl der Erwartungswert eines Operators definiert als auch verschiedene Eigenschaften dieser Größen zusammengestellt.

Arbeiten mit Operatoren

Die allgemeine Definition für einen Operator in der Quantenphysik lautet: Ein Operator ist eine mathematische Vorschrift, die, wenn sie auf einen Ket $|\psi\rangle$ wirkt, diesen in einen neuen Ket $|\psi'\rangle$ im selben Raum überführt (das kann zum Beispiel der ursprüngliche Ket multipliziert mit einem Skalar sein). Wenn man einen Operator A hat, ändert dieser den Ket wie folgt:

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$

Der gleiche Operator kann auch auf Bras wirken:

$$\langle\psi|A = \langle\psi'|$$



Hier folgen Beispiele für die verschiedenen Arten von Operatoren:

✓ **Hamilton-Operator (H):** Wenn man den Hamilton-Operator (der für jede physikalische Situation anders aussieht) auf einen Ket anwendet, dann erhält man die Energie E des Teilchens, das durch den Ket $|\psi\rangle$ beschrieben wird. E ist eine skalare Größe:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

✓ **Einheitsoperator (I):** Der Einheitsoperator lässt den Ket unverändert:

$$I|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

✓ **Gradient (∇):** Der Gradient wirkt folgendermaßen:

$$\nabla|\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial x}|\psi\rangle \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}|\psi\rangle \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}|\psi\rangle \mathbf{k}$$

✓ **Impulsoperator (P):** Der Impulsoperator sieht in der Quantenphysik folgendermaßen aus:

$$P|\psi\rangle = -i\hbar\nabla|\psi\rangle$$

✓ **Laplace-Operator (Δ):** Man benutzt den Laplace-Operator, der ein Gradient zweiter Ordnung ist, um den Hamilton-Operator zu erzeugen, der die Energie bestimmt:

$$\Delta|\psi\rangle = \nabla^2|\psi\rangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2}|\psi\rangle + \frac{\partial^2}{\partial y^2}|\psi\rangle + \frac{\partial^2}{\partial z^2}|\psi\rangle$$



Im Allgemeinen sind Operatoren nicht kommutativ; für die Operatoren A und B gilt: $AB \neq BA$.

Ein Operator A heißt linear, wenn:

$$A(c_1 |\psi\rangle + c_2 |\psi\rangle) = c_1 A|\psi\rangle + c_2 A|\psi\rangle$$

In großer Erwartung: Erwartungswerte bestimmen

Da in der Quantenphysik alle Werte in der Form von Wahrscheinlichkeiten angegeben werden, ist es sehr wichtig, Voraussagen machen zu können. Die wichtigste dieser Voraussagen ist der Erwartungswert. Der *Erwartungswert* eines Operators ist der Mittelwert, den man messen würde, wenn man zahlreiche Messungen durchführen würde. So ist beispielsweise der Erwartungswert für den Hamilton-Operator (siehe den vorangegangenen Abschnitt) die mittlere Energie des Systems, das betrachtet wird.



Der Erwartungswert ist ein gewichteter Mittelwert der Wahrscheinlichkeiten, dass das System sich in den verschiedenen möglichen Zuständen befindet. Man findet den Erwartungswert eines Operators folgendermaßen:

$$\text{Erwartungswert} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Man beachte, dass man den Operator A in Form einer quadratischen Matrix ausdrücken kann, da man $\langle \psi |$ als Zeilen- und $|\psi\rangle$ als Spaltenvektor schreiben kann.

Stellen Sie sich beispielsweise vor, Sie arbeiten mit einem Würfelpaar und notieren die Wahrscheinlichkeiten aller möglichen Summen (siehe den früheren Abschnitt »Vektoren im Hilbert-Raum erstellen«). In diesem Würfelbeispiel ist der Erwartungswert eine Summe von Termen; jeder Term besteht aus einer Zahl, die durch die Würfel angezeigt werden kann, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, dass die Zahl fallen wird.

Der Bra und der Ket verarbeiten diese Wahrscheinlichkeiten; daher ist es die Aufgabe des Operators, den Sie zu diesem Zweck aufstellen – nennen Sie ihn den Würfeloperator W –, für jede Augenzahl (von 2 bis 12) die Wahrscheinlichkeit zu speichern. Somit sieht der Operator W folgendermaßen aus:

$$W = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$$

Um den Erwartungswert von W zu bestimmen, muss man nun $\langle \psi | W | \psi \rangle$ berechnen. Komponentenweise aufgeschrieben sieht das wie folgt aus:

$$\langle \psi | W | \psi \rangle = \left(\frac{1}{6} \quad \frac{2^{1/2}}{6} \quad \frac{3^{1/2}}{6} \quad \frac{2}{6} \quad \frac{5^{1/2}}{6} \quad \frac{6^{1/2}}{6} \quad \frac{5^{1/2}}{6} \quad \frac{2}{6} \quad \frac{3^{1/2}}{6} \quad \frac{2^{1/2}}{6} \quad \frac{1}{6} \right)$$

$$\times \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{2^{1/2}}{6} \\ \frac{3^{1/2}}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{5^{1/2}}{6} \\ \frac{6^{1/2}}{6} \\ \frac{5^{1/2}}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{3^{1/2}}{6} \\ \frac{2^{1/2}}{6} \\ \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

Führt man die Mathematik aus, so erhält man:

$$\langle \psi | W | \psi \rangle = 7$$

Der Erwartungswert für das Würfeln ist also 7. Jetzt kann man auch verstehen, woher die Wörter Bra und Ket stammen: »Bracket« ist das englische Wort für Klammer; Bra und Ket klammern also bei der Berechnung des Erwartungswertes den Operator ein. Diese Bestimmung des Erwartungswertes kommt so häufig vor, dass $\langle \psi | W | \psi \rangle$ oft zu $\langle W \rangle$ abgekürzt wird:

$$\langle W \rangle = 7$$

Lineare Operatoren

Ein Operator A heißt linear, wenn er die folgende Bedingung erfüllt:

$$A(c_1 |\psi\rangle + c_2 |\psi\rangle) = c_1 A|\psi\rangle + c_2 A|\psi\rangle$$

Der Ausdruck $|\phi\rangle \langle\psi|$ ist zum Beispiel ein linearer Operator. Um das zu veranschaulichen, lässt man $|\phi\rangle \langle\psi|$ auf einen Ket $|\chi\rangle$ wirken:

$$|\phi\rangle \langle\psi| \chi\rangle$$

Das kann man aber auch so schreiben:

$$\langle\psi| \chi\rangle |\phi\rangle$$

Der Ausdruck $\langle\psi|\chi\rangle$ ist stets eine komplexe Zahl (die auch nur aus einem Realteil bestehen kann), sodass sich der Ausdruck auch wie folgt vereinfachen lässt:

$$c |\phi\rangle$$

wobei c eine komplexe Zahl ist. Also ist $|\phi\rangle \langle\psi|$ in der Tat ein linearer Operator.

Hermitesche Operatoren und ihre Adjungierten

Der Operator $A^\dagger$ heißt zu A *hermitesch adjungierter* Operator oder auch *Adjungierter* oder *hermitesch Konjugierter*. Um den hermitesch Adjungierten zu finden, muss man folgende Schritte ausführen:

1. Man vertauscht die komplexen Konstanten mit ihren komplex konjugierten.

Die hermitesch adjungierte einer komplexen Zahl ist die komplex konjugierte dieser Zahl:

$$a^\dagger = a^*$$

2. Man ersetzt die Kets durch die entsprechenden Bras und die Bras durch die entsprechenden Kets.



Man muss die Bras und Kets austauschen, wenn man den hermitesch Adjungierten zu einem Operator bestimmen will. Deshalb ist das Aufstellen des hermitesch Adjungierten eines Operators mathematisch nicht das gleiche wie das Bilden des komplex Konjugierten.

3. Man muss die Operatoren durch ihre hermiteschen Operatoren ersetzen.

In der Quantenmechanik heißen Operatoren, die gleich ihrem hermitesch Adjungierten sind, *hermitesche Operatoren*. Mit anderen Worten, ein Operator heißt hermitesch, wenn gilt:

$$A^\dagger = A$$

Hermitesche Operatoren kommen überall in diesem Buch vor, und sie besitzen besondere Eigenschaften. So kann beispielsweise die Matrix eines hermiteschen Operators *diagonalisiert* werden. Das bedeutet, dass bei dieser Matrix die einzigen von null verschiedenen Elemente in ihrer Diagonale stehen. Außerdem ist der Erwartungswert eines hermiteschen Operators garantiert keine komplexe, sondern eine reelle Zahl (siehe den früheren Abschnitt »Erwartungswerte bestimmen«).

4. Man schreibt die Gleichung hin.

$$\langle \psi | A | \phi \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle$$



Hier folgen einige Beziehungen, die für hermitesch adjungierte Operatoren gelten:

✓ $(aA)^\dagger = a^*A^\dagger$

✓ $(A^\dagger)^\dagger = A$

✓ $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$

✓ $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

✓ $(AB|\psi)^\dagger = \langle \psi|B^\dagger A^\dagger$

Vorwärts und Rückwärts: Kommutatoren bestimmen



Es ist etwas anderes, ob man zunächst den Operator A und anschließend den Operator B anwendet oder ob man sie umgekehrt anwendet; das Maß für diesen Unterschied wird *Kommutator* genannt. Der Kommutator der beiden Operatoren A und B ist wie folgt definiert:

$$[A, B] = AB - BA$$

Kommutieren der Operatoren

Zwei Operatoren kommutieren, wenn ihr Kommutator gleich null ist. Das bedeutet, dass es keinen Unterschied macht, in welcher Reihenfolge man sie anwendet:

$$[A, B] = 0$$

Man beachte insbesondere, dass jeder Operator mit sich selber kommutiert:

$$[A, A] = 0$$

Es ist leicht zu zeigen, dass der Kommutator von A und B das Negative des Kommutators von B und A ist:

$$[A, B] = -[B, A]$$

Außerdem sind Kommutatoren linear:

$$[A, B + C + D + \dots] = [A, B] + [A, C] + [A, D] + \dots$$

Für das hermitesch Konjugierte eines Kommutators gilt:

$$[A, B]^\dagger = [B^\dagger, A^\dagger]$$

Man kann auch den Antikommutator $\{A, B\}$ bestimmen:

$$\{A, B\} = AB + BA$$

Anti-hermitesche Operatoren

Hier kommt eine neue Frage: Was kann man wohl über das hermitesch Adjungierte eines Kommutators zweier hermitescher Operatoren sagen? Hier kommt die Antwort. Zunächst schreibt man die Adjungierte:

$$[A, B]^\dagger$$

Die Definition des Kommutators sagt das Folgende:

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger$$

Man weiß, dass $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ ist (siehe den früheren Abschnitt »Hermitesche Operatoren und ihre Adjungierten«; dort findet sich mehr über die Eigenschaften der Adjungierten). Damit folgt:

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger$$

Da für hermitesche Operatoren $A = A^\dagger$ gilt, kann man das Zeichen † weg lassen:

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB$$

Aber $BA - AB$ ist gerade $-[A, B]$ und somit folgt:

$$[A, B]^\dagger = -[A, B]$$



A und B sind hier hermitesche Operatoren. Wenn man das hermitesch Adjungierte eines Ausdrucks bildet und dieses genauso aussieht wie der ursprüngliche Ausdruck, nur mit einem negativen Vorzeichen, dann heißt dieser *anti-hermitesch*. Der Kommutator von zwei hermiteschen Operatoren ist also anti-hermitesch. (Und da wir gerade dabei sind, der Erwartungswert eines anti-hermiteschen Operators ist garantiert rein imaginär.)

Bei Null starten und bei Heisenberg enden

Wenn Sie die letzten Abschnitte gelesen haben, kennen Sie nun hermitesche Operatoren und Kommutatoren. Aber wie arbeitet man damit? Man kann zum Beispiel die Heisenberg'sche Unschärferelation von Grund auf herleiten.

Hier folgt nun eine Rechnung, die Sie, von wenigen grundlegenden Definitionen ausgehend, direkt zur Heisenberg'schen Unschärferelation führt. Diese Art der Rechnung zeigt, wie viel einfacher es ist, statt der Matrixschreibweise der Zustandsvektoren die nicht an eine Basis gebundenen Bras und Kets zu benutzen. In der Schule haben Sie sicherlich andere Rechenmethoden geübt, aber folgen Sie dieser einfach – zu wissen, wie man Kets, Bras, Kommutatoren und hermitesche Operatoren anwendet, wird in den nächsten Kapiteln entscheidend sein.

Die Unsicherheit einer Messung des hermiteschen Operators A ist formal gegeben durch:

$$\Delta A = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2}$$

Das besagt, dass ΔA gleich der Quadratwurzel aus der Differenz zwischen dem Erwartungswert von A^2 und dem Quadrat des Erwartungswertes von A ist. Wenn Sie sich jemals mit Statistik beschäftigt haben, sollte Ihnen diese Formel vertraut sein. Die Unsicherheit bei der Messung des hermiteschen Operators B lässt sich ebenso formulieren:

$$\Delta B = (\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)^{1/2}$$

Nun vergleicht man die beiden Operatoren ΔA und ΔB (nicht mehr die Unsicherheiten ΔA und ΔB) und nimmt an, dass die Anwendung der Operatoren ΔA und ΔB folgende Messwerte liefert:

$$\Delta A = A - \langle A \rangle$$

$$\Delta B = B - \langle B \rangle$$

Das Anwenden der Operatoren ΔA und ΔB kann wie bei allen anderen Operatoren zu neuen Kets führen:

$$\Delta A |\psi\rangle = |\chi\rangle$$

$$\Delta B |\psi\rangle = |\phi\rangle$$

Die Schwarz'sche Ungleichung (aus dem früheren Abschnitt »Rechenregeln in der Ket-Schreibweise«) liefert hier den Schlüssel dazu:

$$\langle \chi | \chi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geq |\langle \chi | \phi \rangle|^2$$

Man sieht jetzt, dass sich das Ungleichheitszeichen $\geq$, das eine wichtige Rolle in der Heisenberg'schen Unschärferelation spielt, inzwischen in die Rechnung eingeschlichen hat.

Da ΔA und ΔB hermitesch sind, ist $\langle \chi | \chi \rangle$ gleich $\langle \psi | \Delta A^2 | \psi \rangle$ und $\langle \phi | \phi \rangle$ gleich $\langle \psi | \Delta B^2 | \psi \rangle$. Da $\Delta A^\dagger = \Delta A$ (das ist die Definition eines hermiteschen Operators), gilt folgendes:

$$\langle \chi | \chi \rangle = \langle \psi | \Delta A \Delta A | \psi \rangle$$

Damit folgt:

$$\langle \chi | \chi \rangle = \langle \psi | \Delta A \Delta A | \psi \rangle = \langle \psi | \Delta A^2 | \psi \rangle$$

Das besagt, dass $\langle \chi | \chi \rangle$ gleich $\langle \Delta A^2 \rangle$ und $\langle \phi | \phi \rangle$ gleich $\langle \Delta B^2 \rangle$ ist. Somit kann man die Schwarz'sche Ungleichung wie folgt umschreiben:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2$$

Ja, aber was hat uns das gebracht? Jetzt heißt es, clever zu sein. Man kann $\Delta A \Delta B$ wie folgt ausdrücken:

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\}$$

Dabei ist $\{\Delta A, \Delta B\} = \Delta A \Delta B + \Delta B \Delta A$ der Antikommutator der Operatoren ΔA und ΔB . Da $[\Delta A, \Delta B] = [A, B]$ (die Konstanten $\langle A \rangle$ und $\langle B \rangle$ fallen raus), kann man die Gleichung folgendermaßen schreiben:

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [A, B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\}$$

An dieser Stelle wird die Mathematik heftig. Lassen Sie uns daher einen Blick auf das werfen, was wir wissen:

- ✓ Der Kommutator $[A, B]$ zweier hermitescher Operatoren ist anti-hermitesch.
- ✓ Der Erwartungswert eines anti-hermiteschen Operators ist imaginär.
- ✓ $\{\Delta A, \Delta B\}$ ist hermitesch.

✓ Der Erwartungswert eines hermiteschen Operators ist reel.

Das bedeutet, dass man den Erwartungswert der Gleichung als eine aus einem Real- und einem Imaginärteil bestehende Summe betrachten kann:

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\{\Delta A, \Delta B\}|^2$$

Da der zweite Term auf der rechten Seite positiv oder gleich null ist, kann man das Folgende schreiben:

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

Puuuh! Nun vergleicht man diese Gleichung mit der oben benutzten Schwarz'schen Ungleichung:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2$$

Verknüpft man diese beiden Gleichungen, so erhält man folgende Beziehung:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

Das hat die Form der Heisenberg'schen Unschärferelation, abgesehen von den verflixten Erwartungswertklammern $\langle \rangle$ und der Tatsache, dass ΔA und ΔB hier quadriert auftreten. Sie wollen hier die Heisenberg'sche Unschärferelation herleiten, die wie folgt aussieht:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Okay, wie wandeln Sie also die linke Seite der Gleichung von $\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle$ in $\Delta A \Delta B$ um? Da eine frühere Gleichung Ihnen sagt, dass $\Delta A = A - \langle A \rangle$ ist, wissen Sie das folgende:

$$\langle \Delta A^2 \rangle = \langle A^2 + \langle A \rangle^2 - 2A \langle A \rangle \rangle$$

Setzt man den Erwartungswert des letzten Terms in diese Gleichung ein, erhält man folgendes Ergebnis:

$$\langle \Delta A^2 \rangle = \langle A^2 + \langle A \rangle^2 - 2A \langle A \rangle \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Jetzt quadriert man die frühere Gleichung $\Delta A = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2}$, um das folgende zu erhalten:

$$\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Vergleicht man diese Gleichung mit der vorherigen, so kann man daraus schließen, dass:

$$\langle \Delta A^2 \rangle = \Delta A^2$$

Klasse! Das Ergebnis besagt, dass $\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$ folgende Form annimmt:

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

Diese Ungleichung besagt am Ende, dass

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

Ausgezeichnet! Das Produkt zweier Unsicherheiten ist größer oder gleich der Hälfte des Absolutbetrags des Kommutators aus den jeweiligen Operatoren? Toll! Aber ist das die Heisenberg'sche Unschärferelation? Nun gut, werfen Sie noch einen Blick darauf. In der Quantenmechanik sieht der Impulsoperator wie folgt aus:

$$P = -i\hbar \nabla$$

Und der Impulsoperator in x-Richtung ist:

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Wie lautet also der Kommutator der Operatoren X (der immer die x-Position eines Teilchens angibt) und P_x ? $[X, P_x] = -i\hbar$; damit erhält man aus $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$ die folgende Gleichung (man beachte, dass Δx und Δp_x hier die Unsicherheiten von x und p_x sind und nicht die Operatoren):

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Mensch, das ist tatsächlich die Heisenberg'sche Unschärferelation! (Beachten Sie aber, dass Sie beim Herleiten der Formel nicht die physikalische Realität durch das Benutzen von abstrakter Mathematik bezwungen haben, sondern nur mithilfe einiger grundlegender Annahmen gezeigt haben, dass Sie die physikalische Welt nicht mit absoluter Genauigkeit *messen* können.)

Eigenvektoren und Eigenwerte: Natürlich sind sie eigenartig!

Wenn Sie dieses Kapitel durchgearbeitet haben, wissen Sie, dass man einen neuen Ket erhalten kann, wenn man einen Operator auf einen Ket wirken lässt:

$$A|\psi\rangle = |\chi\rangle$$



Um die Sache leichter zu machen, kann man mit Eigenvektoren und Eigenwerten arbeiten. Beispielsweise ist $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor des Operators A , wenn:

- ✓ die Zahl a eine komplexe Konstante ist
- ✓ $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$

Man beachte, was hier passiert: Lässt man A auf einen seiner Eigenvektoren $|\psi\rangle$ wirken, so bekommt man $|\psi\rangle$ zurück, multipliziert mit dem *Eigenwert* a des Eigenvektors.

Obwohl a eine komplexe Konstante sein kann, sind die Eigenwerte hermitescher Operatoren reelle Zahlen, und ihre Eigenvektoren sind orthogonal (das bedeutet $\langle\psi|\phi\rangle = 0$).

Das Leben wird viel einfacher, wenn man eine Aufgabe mithilfe von Eigenvektoren und Eigenwerten berechnet, da das Anlegen eines Operators auf seine Eigenvektoren nur denselben Eigenvektor zurück gibt, multipliziert mit seinen Eigenwerten. Es tritt also kein vertrackter Wechsel der Zustände auf, und man muss nicht mit einem anderen Zustandsvektor rechnen.

Um die Begriffe Eigenwerte und Eigenvektoren etwas näher zu erläutern, wird an dieser Stelle noch einmal der Operator W aus dem Würfelexperiment in Matrixform betrachtet (siehe den Abschnitt *In großer Erwartung: Erwartungswerte bestimmen* weiter vorne):

$$W = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$$

Der Operator W wirkt im 11-dimensionalen Raum und ist hermitesch, deshalb gibt es 11 orthogonale Eigenvektoren und 11 entsprechende Eigenwerte.

Da W eine Diagonalmatrix ist, ist es einfach, die Eigenvektoren zu bestimmen. Man kann zum Beispiel Einheitsvektoren in den 11 verschiedenen Richtungen als Eigenvektoren nehmen. Der erste Eigenvektor ξ_1 sieht folgendermaßen aus:

$$\xi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und so sieht der zweite Eigenvektor ξ_2 aus:

$$\xi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und so geht es weiter bis ξ_{11} :

$$\xi_{11} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Man beachte, dass die Eigenvektoren alle orthogonal sind.

Und die Eigenwerte? Das sind Zahlen, die man erhält, wenn man den Operator W an einen Eigenvektor anlegt. Da die Eigenvektoren gerade Einheitsvektoren in allen 11 Dimensionen sind, sind die Eigenwerte die Zahlen in der Diagonale der Matrix W : 2, 3, 4 und so weiter bis 12.

Verstehen, wie sie funktionieren



Die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators bilden einen vollständigen Satz von orthonormalen Vektoren – das ist eine vollständige Basis im Zustandsraum. Von dieser aus Eigenvektoren bestehenden »Eigenbasis« aus betrachtet, ist der Operator in der Matrixform diagonal, und die Elemente entlang der Diagonalen der Matrix sind die Eigenwerte.

Das ist einer der Hauptgründe dafür, warum das Arbeiten mit Eigenvektoren so nützlich ist. Ihr Ursprungsoperator mag wie folgt aussehen (**Beachten Sie:** Die Elemente eines Operators können auch Funktionen sein, nicht nur Zahlen):

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 6 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 3 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Beim Wechsel in die Basis der Eigenvektoren des Operators diagonalisiert man die Matrix, sodass sie wieder vertrauter aussieht und man besser mit ihr arbeiten kann:

$$W = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}$$

Sie können nun verstehen, warum das Wort »*Eigen*« Bestandteil des Wortes Eigenvektoren ist – diese bilden eine natürliche Basis für den Operator.

Sind zwei oder mehr Eigenwerte gleich, dann sagt man, dass die Eigenwerte *entartet* sind. Sind beispielsweise drei Eigenwerte gleich 6, dann ist der Eigenwert 6 dreifach entartet.



Hier folgt noch ein heißer Tipp: Wenn zwei hermitesche Operatoren A und B kommutieren und A keine entarteten Eigenwerte hat, so ist jeder Eigenvektor von A auch ein Eigenvektor von B. (Mehr über Kommutatoren findet sich in dem Abschnitt *Vorwärts und Rückwärts: Kommutatoren bestimmen* weiter vorne.)

Eigenvektoren und Eigenwerte bestimmen

Wenn nun ein Operator in Matrixform gegeben ist, wie findet man dann seine Eigenvektoren und Eigenwerte? Stellen Sie sich vor, Sie sollen folgende Gleichung lösen:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

Diese Gleichung kann man wie folgt umschreiben:

$$(A - aI)|\psi\rangle = 0$$

I ist die Einheitsmatrix, die entlang der Diagonale die 1 enthält und deren übrige Elemente 0 sind:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ & & & & \vdots & & & \end{pmatrix}$$



Die Lösung der Gleichung $(A - aI)|\psi\rangle = 0$ existiert nur, wenn die Determinante der Matrix $(A - aI)$ gleich 0 ist:

$$\det(A - aI) = 0$$

Eigenwerte bestimmen

Alle Werte von a , die die Gleichung $\det(A - aI) = 0$ erfüllen, sind Eigenwerte der Ursprungsgleichung. Versuchen Sie, die Eigenwerte und die Eigenvektoren der folgenden Matrix zu bestimmen:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 2 & -4 \end{pmatrix}$$

Als erstes bringt man die Matrix in die Form $A - aI$:

$$A - aI = \begin{pmatrix} -1-a & -1 \\ 2 & -4-a \end{pmatrix}$$

Danach bestimmt man die Determinante:

$$\det(A - aI) = (-1-a)(-4-a) + 2$$

$$\det(A - aI) = a^2 + 5a + 6$$

Das kann man wie folgt ausklammern:

$$\det(A - aI) = a^2 + 5a + 6 = (a+2)(a+3)$$

Sie wissen, dass $\det(A - aI) = 0$ ist; daher sind die Eigenwerte von A die Nullstellen dieser Gleichung, nämlich $a_1 = -2$ und $a_2 = -3$.

Eigenvektoren bestimmen

Aber wie findet man die Eigenvektoren? Um den zu a_1 (siehe vorangehender Abschnitt) gehörigen Eigenvektor zu finden, setzt man den ersten Eigenwert $a_1 = -2$ in die Matrix ein:

$$A - aI = \begin{pmatrix} -1-a & -1 \\ 2 & -4-a \end{pmatrix}$$

$$A - aI = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}$$

$$\text{Aus } (A - aI) |\psi\rangle = 0$$

erhält man damit:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Da jede Zeile dieser Matrixgleichung stimmen muss, weiß man, dass $\psi_1 = \psi_2$. Das bedeutet, dass der zu a_1 gehörende Eigenvektor, abgesehen von einer willkürlichen Konstante, der folgende ist:

$$c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Man lässt die Konstante wegfallen und schreibt dies als:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Was ist mit dem Eigenvektor, der zu a_2 gehört? Setzt man $a_2 = -3$ in die Matrix ein, erhält man:

$$A - aI = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$$

und daraus folgt:

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Folglich ist $2\psi_1 - \psi_2 = 0$ und daher $\psi_1 = \psi_2/2$. Das bedeutet, dass der zu a_2 gehörende Eigenvektor, mit einer willkürlichen Konstante c wie folgt aussieht:

$$c \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Weglassen der Konstante ergibt:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte des Operators

$$A = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 2 & -4 \end{pmatrix}$$

sind $a_1 = -2$ und $a_2 = -3$. Der zu a_1 gehörende Eigenvektor ist

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und der zu a_2 gehörende Eigenvektor ist

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Auf das Gegenteil vorbereitet sein: Vereinfachung durch unitäre Operatoren

Lässt man das Inverse eines Operators auf diesen wirken, so hebt er dessen Wirkung auf:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I$$

Manchmal kann es sehr hilfreich sein, das Inverse eines Operators zu bestimmen, insbesondere wenn man Gleichungen der Form $Ax = y$ lösen will. Diese Gleichung ist für x einfach zu lösen, wenn man das Inverse von A kennt: $x = A^{-1}y$.

Da es nicht immer einfach ist, die Inverse einer großen Matrix zu berechnen, muss man bei manchen Rechnungen in der Quantenphysik mit unitären Operatoren U arbeiten. Ein Operator ist unitär, wenn sein Inverses die Adjungierte ist: $U^{-1} = U^\dagger$. (Um die Adjungierte eines Operators A zu bestimmen, berechnet man zunächst seine Transponierte A^T , indem man die Zeilen zu Spalten macht. Anschließend nimmt man davon die komplex Konjugierte $A^{T*} = A^\dagger$.) Somit erhält man die folgende Gleichung:

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I$$

Das Produkt zweier unitärer Operatoren U und V ist ebenfalls unitär:

$$(UV)(VU)^\dagger = (UV)(V^\dagger U^\dagger) = U(VV^\dagger)U^\dagger = UU^\dagger = I$$

Wenn man unitäre Operatoren benutzt, ändern sich die Bra- und Ket-Vektoren wie folgt:

$$✓ \quad |\psi'\rangle = U |\psi\rangle$$

$$✓ \quad \langle\psi'| = \langle\psi| U$$

Mithilfe unitärer Operatoren kann man andere Operatoren wie folgt umformen:

$$A' = UAU^\dagger$$

Beachten Sie, dass die obigen Gleichungen auch folgendes beinhalten:

$$✓ \quad |\psi\rangle = U^\dagger |\psi'\rangle$$

$$✓ \quad \langle\psi| = \langle\psi'| U$$

$$✓ \quad A = U^\dagger A' U$$



Hier folgen einige Eigenschaften unitärer Umformungen:

- ✓ Ist ein Operator A hermitesch, dann ist die unitär Transformierte $A' = UAU^\dagger$ ebenfalls hermitesch.
- ✓ Die Eigenwerte eines Operators A und seiner unitär transformierten $A' = UAU^\dagger$ sind identisch.
- ✓ Kommutatoren, die aus komplexen Zahlen bestehen, bleiben bei unitären Umformungen unverändert: $[A', B'] = [A, B]$.

Vergleich zwischen Matrix- und kontinuierlicher Darstellung

Werner Heisenberg entwickelte die Formulierung der Quantenphysik in der Matrix-Darstellung, wie sie in diesem Kapitel benutzt wurde. Sie wird im Allgemeinen *Matrizen-mechanik* genannt. Die Matrix-Darstellung hilft bei der Lösung zahlreicher quantenphysikalischer Probleme – allerdings muss man manchmal auch eine andere Darstellung wählen, wie Sie im Folgenden sehen werden.

Eines der grundlegenden Probleme der Quantenmechanik ist die Bestimmung der Energieniveaus eines Systems. Der Energieoperator heißt *Hamilton-Operator* H , und die Berechnung der Energieniveaus eines Systems ist somit identisch mit der Bestimmung der Eigenwerte der Gleichung:

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

E ist hier also der Eigenwert des Hamilton-Operators H .

An dieser Stelle folgt diese Gleichung in der Matrix-Darstellung:

$$\det \begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & H_{14} & \dots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & H_{24} & \dots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & H_{34} & \dots \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} - E & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} = 0$$

Die zulässigen Energieniveaus dieses physikalischen Systems sind die Eigenwerte E .

Das ist schön und gut, wenn man eine diskrete Basis von Eigenvektoren hat – wenn also die Anzahl der Energiezustände endlich ist. Aber was ist, wenn es unendliche viele Energiezustände gibt? In diesem Fall kann man nicht länger mit einer diskreten Basis für die Operatoren, Bras und Kets arbeiten, sondern man benötigt eine *kontinuierliche Basis*.

Mit der Differentialrechnung zu einer kontinuierlichen Basis

Die Darstellung der Quantenmechanik mit einer kontinuierlichen Basis wurde von dem Physiker Erwin Schrödinger eingeführt. Dabei gehen die Summen in Integrale über. Betrachten Sie zum Beispiel die folgende Gleichung, wobei I die Einheitsmatrix ist:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = I$$

Sie hat nun folgendes Aussehen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dn |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = I$$

Dabei kann jeder Ket $|\psi\rangle$ durch eine Basis anderer Ket-Vektoren $|\phi_n\rangle$ beschrieben werden:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dn |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle$$

Jetzt kommen die Wellen

Betrachten Sie nun den Ortsoperator R in einer kontinuierlichen Basis. Legt man diesen Operator an, so erhält man den Ortsvektor $\mathbf{r}$:

$$R |\psi\rangle = \mathbf{r} |\psi\rangle$$

In dieser Gleichung wird der Ortsoperator auf einen Zustandsvektor angewendet; dies liefert den Ort $\mathbf{r}$, an dem das Teilchen gefunden werden kann. Man kann jeden Ket wie folgt im Ortsraum beschreiben:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r |r\rangle \langle r|\psi\rangle$$

Und das wird zu:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \psi(r) |r\rangle$$



An dieser Stelle ist es sehr wichtig, Folgendes zu verstehen: $\psi(r) = \langle r|\psi\rangle$ ist die *Wellenfunktion* für den Zustandsvektor $|\psi\rangle$; das ist die Darstellung des Kets im Ortsraum. Oder mit anderen Worten, es ist eine Funktion, in der die Größe $|\psi(r)|^2 d^3r$ die Wahrscheinlichkeit angibt, dass sich das Teilchen in dem Raum d^3r am Ort $\mathbf{r}$ befindet.

Die Wellenfunktion ist die Grundlage der Methode, die, im Gegensatz zur Matrizenmechanik, *Wellenmechanik* genannt wird. Es ist an dieser Stelle wichtig zu verstehen, dass man bei der Darstellung physikalischer Systeme in der Wellenmechanik nicht die basisfreien Bras und Kets der Matrizenmechanik benutzt. Vielmehr benutzt man Wellenfunktionen, also die Bras und Kets im Ortsraum.

Deshalb benutzt man hier nicht $|\psi\rangle$, sondern $\langle r|\psi\rangle$, was $\psi(r)$ entspricht. Diese Wellenfunktion, die einfach nur ein Ket im Ortsraum ist, wird in den folgenden Kapiteln noch sehr häufig erscheinen. In der Wellenmechanik wird $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ somit in folgender Form geschrieben:

$$\langle r|H|\psi\rangle = E\langle r|\psi\rangle$$

Das kann man auch wie folgt schreiben:

$$\langle r | H | \psi \rangle = E \psi(r)$$

Aber was ist $\langle r | H | \psi \rangle$? Es ist das Gleiche wie $H\psi(r)$. Der Hamilton-Operator H gibt die gesamte Energie des Systems an, also sowohl die kinetische ($p^2/2m$) als auch die potentielle ($V(r)$). Somit erhält man die folgende Gleichung:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

Der Impulsoperator lautet:

$$P | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | \psi \rangle \mathbf{i} + -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} | \psi \rangle \mathbf{j} + -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} | \psi \rangle \mathbf{k}$$

Setzt man diesen in die obige Gleichung ein, so erhält man:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r)$$

Verwendet man den Laplace-Operator, so ergibt sich folgende Gleichung:

$$\Delta | \psi \rangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} | \psi \rangle + \frac{\partial^2}{\partial y^2} | \psi \rangle + \frac{\partial^2}{\partial z^2} | \psi \rangle$$

Diese Gleichung kann man jetzt folgendermaßen umschreiben (sie heißt *Schrödinger-Gleichung*):

$$H\psi(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Wenn man also Quantenphysik mithilfe der Wellenmechanik beschreibt, arbeitet man mit einer Differentialgleichung statt mit Matrizen. Das hängt damit zusammen, dass man hier im Ortsraum mit $\psi(r) = \langle r | \psi \rangle$ rechnet und nicht mit dem Zustandsvektor $|\psi\rangle$.

Der größte Teil dieses Buches beschäftigt sich nun damit, diese Differentialgleichung für eine Anzahl verschiedener Potentiale $V(r)$ zu lösen. Der Schwerpunkt liegt also im Folgenden darin, die Wellenfunktionen zu finden, die die Schrödinger-Gleichung für verschiedene physikalische Systeme erfüllen. Wenn man die Schrödinger-Gleichung für $\psi(r)$ löst, kann man sowohl die erlaubten Energiezustände eines physikalischen Systems angeben als auch die

Wahrscheinlichkeit, dass sich das System in einem bestimmten Ortszustand befindet.

Man beachte, dass man neben Wellenfunktionen im Ortsraum auch solche im Impulsraum bzw. in einer anderen Basis angeben kann.



Die Heisenberg'sche Matrizenmechanik ist ein Weg, mit der Quantenphysik umzugehen, und man benutzt sie am besten, wenn man mit physikalischen Systemen mit wohldefinierten Zuständen arbeitet, wie etwa dem harmonischen Oszillator. Die von Schrödinger entwickelte Wellenmechanik benutzt dagegen Wellenfunktionen, häufig im Ortsraum, um die Fragen der Quantenphysik mithilfe von Differentialgleichungen zu beantworten.

Teil II

Gebunden, aber unbestimmt: Teilchen in gebundenen Zuständen

In diesem Teil ...

In diesem Teil erfahren Sie alles über eines des Lieblingsthemen der Quantenphysik: Die Bestimmung der Wellenfunktionen und Energieniveaus von Teilchen, in verschiedenen gebundenen Zuständen. Unter anderem werden wir Teilchen in einem Potentialtopf betrachten, was so etwas ist wie eine Erbse in einer Schachtel. Ein anderes Beispiel sind Teilchen, die harmonische Schwingungen ausführen. Die Quantenphysik beschreibt diese Situationen meisterhaft.

Gefangen in Potentialtöpfen

In diesem Kapitel ...

- ▶ Potentialtöpfe
- ▶ Unendliche rechteckige Potentialtöpfe
- ▶ Bestimmung von Energieniveaus
- ▶ Teilchen in Potentialbarrieren
- ▶ Freie Teilchen

Um den Umgang mit der zentralen Gleichung der Quantenmechanik zu üben, der Schrödinger-Gleichung, wird in diesem Kapitel die Wellenmechanik eindimensionaler Systeme behandelt. Diese Art von Systemen ist zum einen als einfaches Modell interessant, an dem man eine Reihe von Eigenschaften der Quantenphysik aufzeigen kann, die auch bei komplizierteren Fällen auftreten. Zum anderen sind sie von großer Bedeutung, weil man zahlreiche Probleme anhand geeigneter Umformungen auf Gleichungen in der Form der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung zurückführen kann.

In einen Potentialtopf schauen

In diesem Kapitel wird zunächst die auf eine Dimension, die x -Richtung, beschränkte Bewegung eines Teilchens der Masse m in einem Potential $V(x)$ untersucht. Die einfachste Art eines solchen Potentials ist ein *Rechteckpotential*, wie es in Abbildung 4.1 gezeigt wird. Das Potential macht bei $x=0$ und $x=a$ Sprünge, ist sonst aber konstant. Es gilt also:

- ✓ $V(x) = \infty$, für $x < 0$
- ✓ $V(x) = 0$, für $0 \leq x \leq a$
- ✓ $V(x) = \infty$, für $x > a$

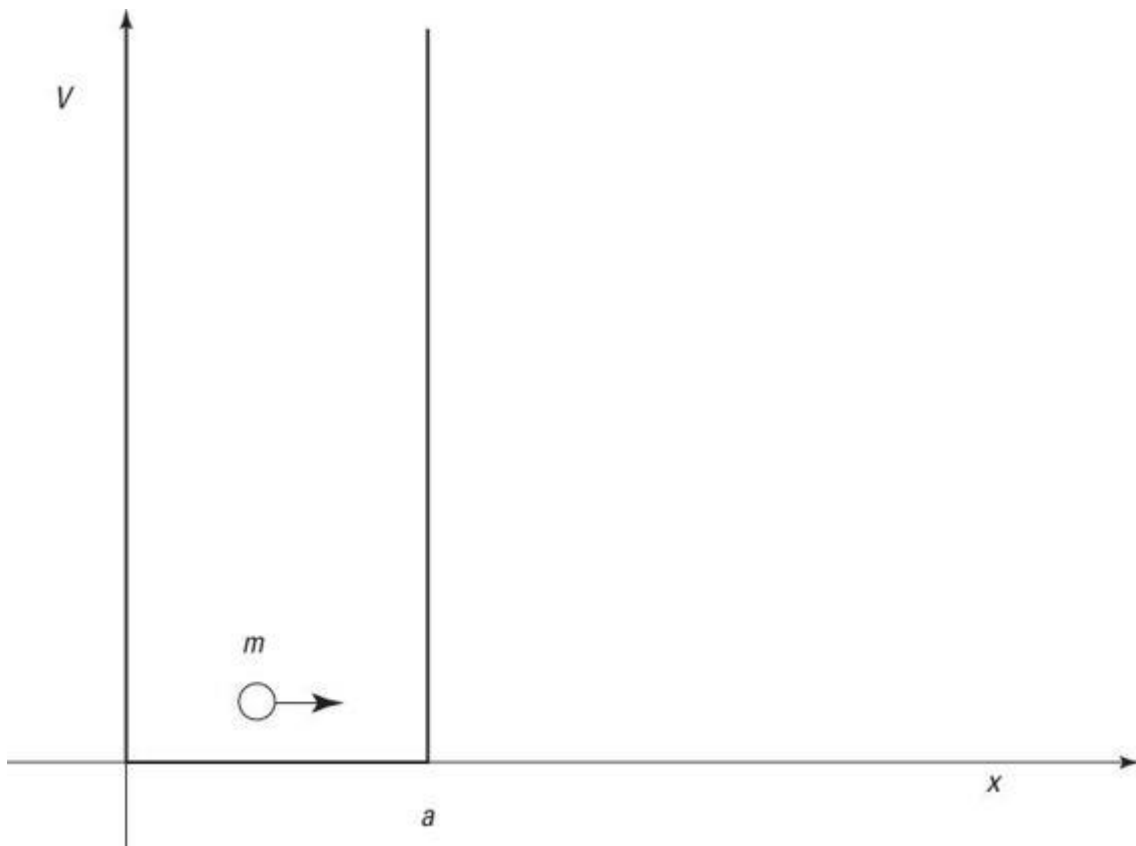


Abbildung 4.1: Ein rechteckiger Potentialtopf

Man benutzt rechteckige Potentialtöpfe, um Teilchen einzufangen. Wenn man ein Teilchen mit einer begrenzten Energie in einen rechteckigen Potentialtopf steckt, bleibt es darin gefangen, da es das unendliche Potential an jeder Seite des Topfes nicht überwinden kann. Deshalb kann sich das Teilchen nur innerhalb des Potentialtopfes bewegen.

Wie geht man nun bei der Untersuchung einer derartigen Problemstellung vor? Sie

können sich dabei direkt an das in Kapitel 2 in dem Abschnitt »Wie geht man bei der Lösung eines quantenmechanischen Problems vor?« vorgestellte Konzept halten und die einzelnen Schritte nach und nach ausführen.

1. Zunächst stellen Sie die Schrödinger-Gleichung auf; sie lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

2. Anschließend bestimmen Sie den Hamilton-Operator. Im oben angegebenen Beispiel eines rechteckigen Potentialtopfes ist das Potential im Inneren des Topfes $V(x) = 0$. Daraus folgt die in diesem Fall zu lösende Schrödinger-Gleichung.

Danach arbeiten Sie Ihre Liste weiter ab:

3. Randbedingungen bestimmen.

4. Die Wellenfunktion bestimmen, die die Schrödinger-Gleichung unter diesen Randbedingungen erfüllt.

5. Normierung der Wellenfunktion.

6. Bestimmung der Energieeigenwerte.

In den folgenden Abschnitten erfahren Sie zunächst noch einige allgemeine Informationen zu gebundenen Zuständen in Potentialtöpfen, und im Anschluss daran wird ausführlich erläutert, wie Sie diese Aufgabe und weitere ähnliche Probleme lösen.

Teilchen in Potentialtöpfen einschließen

Betrachten Sie das Potential in Abbildung 4.2, insbesondere die Mulde im Potential, den *Topf*, in dem Teilchen, die nicht ausreichend Energie besitzen, gefangen sein können.

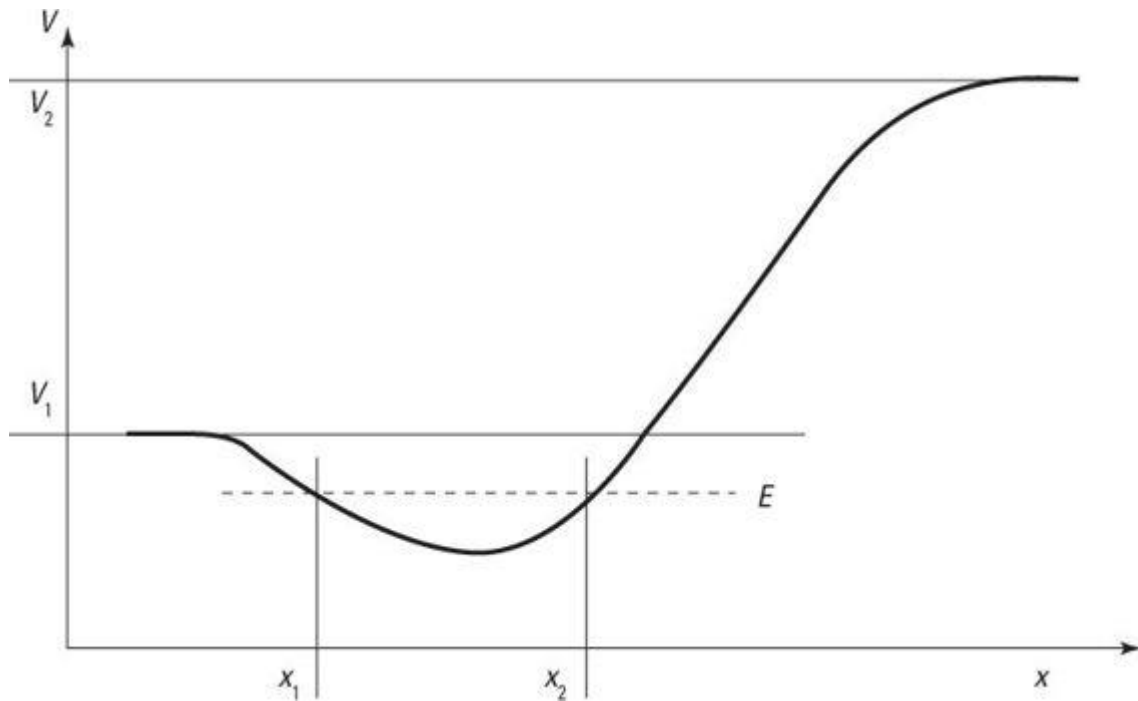


Abbildung 4.2: Ein Potentialtopf

Die Summe aus kinetischer und potentieller Energie des Teilchens ist eine Konstante, die seiner Gesamtenergie entspricht:

$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$

Ist die Gesamtenergie des Teilchens kleiner als V_1 , so ist es im Potentialtopf gefangen, wie man in Abbildung 4.2 erkennen kann. Um aus dem Topf entkommen zu können, müsste die kinetische Energie des Teilchens negativ werden, um die Gleichung zu erfüllen, und das ist unmöglich.

In diesem Abschnitt werden die verschiedenen möglichen Zustände gezeigt, die ein Teilchen der Energie E in einem Potential einnehmen kann, wie es in Abbildung 4.2 dargestellt ist. Quantenmechanisch ausgedrückt können diese Zustände in zwei Gruppen eingeteilt werden: gebundene und ungebundene. Dieser Abschnitt zeigt sie im Überblick.

Gebundene Teilchen in Potentialtöpfen

Gebundene Zustände treten auf, wenn das Teilchen nicht in der Lage ist, sich in das Unendliche fortzubewegen – so einfach ist das. Mit anderen Worten, das Teilchen ist im Potentialtopf eingesperrt.

Ein Teilchen, das sich in dem in Abbildung 4.2 gezeigten Potential bewegt, ist gebunden, wenn seine Energie E kleiner ist als V_1 und V_2 . In diesem Fall bewegt es sich zwischen x_1 und x_2 . Ein in einem solchen Topf gefangenes Teilchen wird durch eine Wellenfunktion beschrieben, und man kann die Schrödinger-Gleichung für die erlaubten Wellenfunktionen und die erlaubten Energiezustände lösen. Man muss zwei Randbedingungen benutzen (die Schrödinger-Gleichung ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung), um das Problem vollständig zu lösen.



Gebundene Zustände sind *diskret*; das heißt, das Energiespektrum besteht aus diskreten Energieniveaus. Diese Zustände erhält man aus der Schrödinger-Gleichung. Bei eindimensionalen Problemen sind die Energieniveaus eines gebundenen Zustands nicht entartet.

Man spricht in der Quantenmechanik von *Entartung*, wenn zu einem Eigenwert mehrere Eigenfunktionen gehören oder, mehr physikalisch ausgedrückt, wenn zwei oder mehr Zustände eines quantenmechanischen Systems zur selben Energie gehören. Somit gehört bei eindimensionalen Problemen nur jeweils ein Zustand zum jeweiligen Energieniveau.

Aus Potentialtöpfen entkommen

Wenn die Energie E eines Teilchens größer ist als das Potential V_1 in Abbildung 4.2, so kann es aus dem Potentialtopf entkommen. Dabei können zwei Fälle auftreten: $V_1 < E < V_2$ und $E > V_2$. Die folgenden Abschnitte betrachten beide Fälle getrennt.

Fall 1: Die Energie liegt zwischen den beiden Potentialen ($V_1 < E < V_2$)

Wenn $V_1 < E < V_2$, so hat das Teilchen im Potentialtopf genügend Energie, um die Barriere auf der linken Seite zu überwinden, nicht aber die auf der rechten Seite. Folglich kann sich das Teilchen bis in das negative Unendliche frei bewegen; der erlaubte x -Bereich liegt also zwischen $-\infty$ und x_2 .

Die erlaubten Energiewerte sind dabei kontinuierlich, nicht diskret, da das Teilchen nicht vollständig gebunden ist. Die Energieeigenwerte sind nicht entartet; das bedeutet, dass es keine zwei gleichen Energieeigenwerte gibt (in Kapitel 2 findet man mehr über Eigenwerte).

Die Schrödinger-Gleichung ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung, demzufolge hat sie zwei linear unabhängige Lösungen. In diesem Fall jedoch gibt es nur eine physikalisch sinnvolle Lösung, die nicht divergiert.

Für $x < x_2$ oszilliert die Wellengleichung, während sie für $x > x_2$ stark abfällt.

Fall 2: Die Energie ist größer als das höhere Potential ($E > V_2$)

Wenn $E > V_2$, ist das Teilchen nicht gebunden und kann sich frei zwischen dem negativen und dem positiven Unendlichen bewegen.

Das Energiespektrum ist kontinuierlich, die Wellenfunktion ist die Summe zweier Funktionen, von denen sich eine nach rechts, die andere nach links bewegt. Die Energieniveaus des erlaubten Spektrums sind daher doppelt entartet.

Das ist der Überblick, den Sie benötigen. Jetzt wird es Zeit, die Schrödinger-Gleichung für verschiedene Potentiale zu lösen; gestartet wird mit dem einfachsten aller Potentiale, dem unendlichen rechteckigen Potentialtopf.

Gebundene Teilchen in unendlichen rechteckigen Potentialtöpfen

Unendliche rechteckige Potentialtöpfe, bei denen die Wände unendlich hoch sind, sind ein beliebtes Thema von Physikaufgaben. Sie werden im folgenden Abschnitt die Quantenphysik erkunden, die sich mit diesen Aufgaben beschäftigt.

Berechnung der Wellenfunktionen

Betrachten Sie noch einmal den unendlichen rechteckigen Potentialtopf aus Abbildung 4.1. Der Potentialtopf sieht folgendermaßen aus:

✓ $V(x) = \infty$, für $x < 0$

✓ $V(x) = 0$, für $0 \leq x \leq a$

✓ $V(x) = \infty$, für $x > a$

Die Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen sieht wie folgt aus:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

Schreibt man die Schrödinger-Gleichung aus, erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

In diesem Kapitel sind Sie nur an einer Dimension interessiert, der Strecke in x-Richtung; somit sieht die Schrödinger-Gleichung wie folgt aus:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Da innerhalb des Potentialtopfes $V(x) = 0$ gilt, erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

Diese Gleichung kann man folgendermaßen umformen:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

An dieser Stelle definiert man im Allgemeinen die Wellenzahl $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und

kann so die Gleichung in eine wohlbekannte Form umwandeln:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

Jetzt hat man eine Differentialgleichung zweiter Ordnung und kann die Wellenfunktion für ein Teilchen bestimmen, das sich in einem unendlichen rechteckigen Potentialtopf befindet.

Man erhält zwei voneinander unabhängige Lösungen, da eine Differentialgleichung zweiter Ordnung vorliegt:

$$\psi_1(x) = A \sin(kx)$$

$$\psi_2(x) = B \cos(kx)$$

A und B sind Konstanten, die noch bestimmt werden müssen.



Die allgemeine Lösung von

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

ist die Summe aus $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Bestimmung der Energieniveaus

Wie bereits erwähnt, spielen die Randbedingungen bei der Bestimmung der Wellenfunktion und der Energieniveaus eine wichtige Rolle. Sie hängen immer von der jeweiligen Aufgabenstellung ab. In diesem Fall besagt die allgemeine Randbedingung einer unendlich hohen Potentialschwelle, dass $\psi|_{\text{Schwelle}} = 0$ ist. Das bedeutet, in diesem Fall muss gelten:

✓ $\psi(0) = 0$

✓ $\psi(a) = 0$

Aus der Tatsache, dass $\psi(0) = 0$ ist, folgt, dass B gleich 0 sein muss, da $\cos(0) = 1$. Und $\psi(a) = 0$ bedeutet, dass $\psi(a) = A \sin(ka) = 0$. Da der Sinus gleich 0 ist, wenn sein Argument ein Vielfaches von π ist, ergibt sich:

$$ka = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Man beachte, dass auch $n = 0$ mathematisch eine Lösung ist; dann wäre aber $\psi(x) = 0$ und das ist keine physikalisch sinnvolle Lösung. Die physikalische Lösung beginnt mit $n = 1$.

Die obige Gleichung kann auch wie folgt geschrieben werden:

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Da $k^2 = 2mE/\hbar^2$, ergibt sich die folgende Gleichung, wobei $n = 1, 2, 3, \dots$ ist – das sind die erlaubten Energiezustände. Dies sind quantisierte Zustände, die zu den Quantenzahlen 1, 2, 3, ... gehören:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$$
$$E = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Man beachte, dass der erste physikalische Zustand $n = 1$ entspricht, sodass man folgende Gleichung erhält:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

Das ist der niedrigste physikalische Zustand, den das Teilchen einnehmen kann. Man kann sich nun den Spaß machen, ein paar Zahlen in die Gleichung einzusetzen. Angenommen, man hat ein Elektron mit der Masse $9,11 \times 10^{-31}$ kg, das in einem unendlichen rechteckigen Potentialtopf eingeschlossen ist, dessen Breite in der Größenordnung des Bohr'schen Radiuses (der durchschnittliche Radius der Elektronenbahn im Wasserstoffatom) von 10^{-10} m liegt.

Die Energie des Grundzustands ist gegeben durch:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Somit folgt:

$$\frac{(1,05 \times 10^{-34})^2 (3,14)^2}{2(9,11 \times 10^{-31})(10^{-10})^2} = 6,00 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Das ist eine sehr kleine Zahl, ungefähr 37 Elektronenvolt (eV: die Menge an Energie, die ein Elektron gewinnt, wenn es 1 V durchläuft). Sie ist in der gleichen Größenordnung wie die Energie eines Elektrons im Grundzustand eines Wasserstoffatoms (13,6 eV) – Sie befinden sich nun also tatsächlich im Spielpark der Quantenphysik.

Die Normalisierung der Wellenfunktion

Okay, Sie haben also folgende Wellenfunktion für ein Teilchen in einem unendlichen rechteckigen Potentialtopf:

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Bei der Wellenfunktion handelt es sich um eine Sinus-Welle, die bei $x = 0$ und $x = a$ den Wert 0 annimmt. Die ersten beiden Wellenfunktionen sind in Abbildung 4.3 dargestellt.

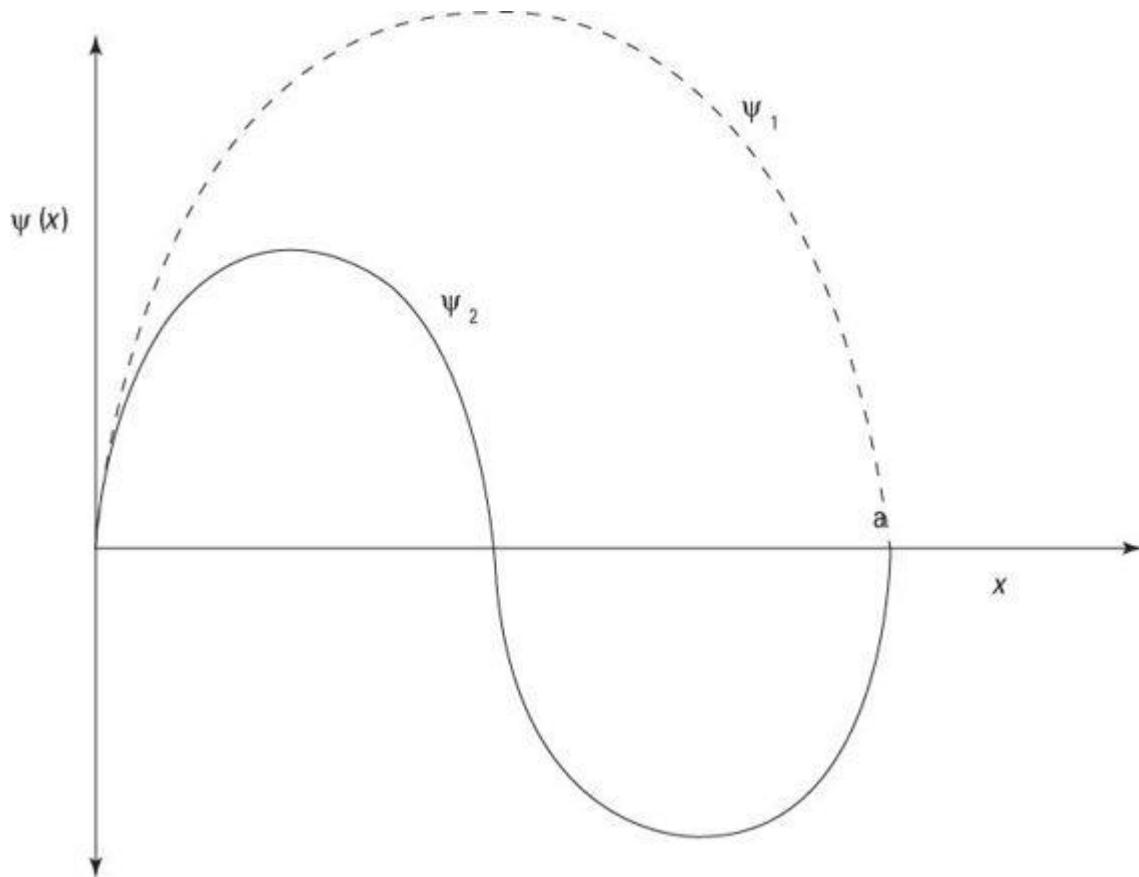


Abbildung 4.3: Wellenfunktionen in einem unendlichen rechteckigen Potentialtopf

Das Normieren der Wellenfunktion erlaubt die Lösung für die unbekannte Konstante A . In einer normierten Funktion summieren sich die Wahrscheinlichkeiten $|\psi(x)|^2 dx$, ein Teilchen zwischen x und dx zu finden, zu 1, wenn man über den gesamten Potentialtopf von $x = 0$ bis $x = a$ integriert:

$$1 = \int_0^a |\psi(x)|^2 dx$$

Setzt man $\psi(x)$ ein, erhält man:

$$1 = |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

Das Integral in dieser Gleichung ist gleich:

$$\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = a/2$$

Damit ergibt sich für die obige Gleichung:

$$1 = |A|^2 \left(a/2\right)$$

Somit ergibt sich für die Lösung von A:

$$A = \left(2/a\right)^{1/2}$$

Die normierte Wellenfunktion mit dem für A eingesetzten Wert lautet also:

$$\psi(x) = \left(2/a\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Das ist die normierte Wellenfunktion für ein Teilchen in einem unendlichen rechteckigen Potentialtopf.

Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion

Wie entwickelt sich die Wellenfunktion für ein Teilchen in einem unendlichen rechteckigen Potentialtopf mit der Zeit? Die Schrödinger-Gleichung sieht folgendermaßen aus:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

Man kann die Schrödinger-Gleichung auch wie folgt schreiben, wobei H der hermitesche Hamilton-Operator ist:

$$H \psi(r) = E \psi(r)$$

Das ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung sieht wie folgt aus:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = H \psi(r, t)$$

Verknüpft man die drei obenstehenden Gleichungen miteinander, so erhält man den folgenden Ausdruck, der eine Form der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung darstellt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, t) + V(r, t) \psi(r, t)$$

Da wir hier nur mit einer Dimension rechnen, nämlich x, erhält die Gleichung folgendes Aussehen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t)$$

Das ist allerdings viel einfacher als es aussieht, da sich das Potential nicht mit der Zeit ändert. Da E insgesamt konstant ist, kann man die Gleichung wieder umschreiben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E \psi(x, t)$$

Diese Gleichung macht das Leben gleich viel einfacher; es ist ganz einfach, die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung zu lösen, wenn man mit einem konstanten Potential

rechnet. In diesem Fall lautet die Lösung:

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



Schön! Wenn sich das Potential nicht mit der Zeit ändert, besteht die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung aus $\psi(x)$, also dem räumlichen Anteil, multipliziert mit $e^{-iEt/\hbar}$, dem zeitabhängigen Anteil.

Wenn man nun also den zeitabhängigen Teil zur zeitunabhängigen Wellenfunktion hinzufügt, so erhält man die zeitabhängige Wellenfunktion, die wie folgt aussieht:

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Die Energie des n-ten Quantenzustands ist bekanntlich:

$$E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Damit erhält man folgendes Ergebnis:

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(\frac{-in^2 \hbar \pi^2 t}{2ma^2}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

wobei $\exp(x) = e^x$.

Der Übergang zu symmetrischen rechteckigen Potentialtöpfen

Für den normalen unendlichen rechteckigen Potentialtopf gilt:

✓ $V(x) = \infty$, für $x < 0$

✓ $V(x) = 0$, für $0 \leq x \leq a$

✓ $V(x) = \infty$, für $x > a$

Aber was ist, wenn Sie seine Eigenschaften so ändern wollen, dass der Potentialtopf symmetrisch zum Ursprung ist? Das bedeutet, dass Sie den Potentialtopf so verschieben, dass er von $-a/2$ bis $+a/2$ reicht. In diesem Fall gilt für den neuen unendlichen rechteckigen Potentialtopf folgendes:

✓ $V(x) = \infty$, für $x < -a/2$

✓ $V(x) = 0$, für $-a/2 \leq x \leq a/2$

✓ $V(x) = \infty$, für $x > a/2$

Das bedeutet aber auch, dass man die Wellenfunktion für den symmetrischen rechteckigen Potentialtopf nicht neu bestimmen muss, sondern die Lösung aus der bereits bekannten Wellenfunktion für den asymmetrischen Potentialtopf ableiten kann:

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Mithilfe der Trigonometrie erkennt man, dass sich die Lösungen für gerade und ungerade Bindungszustände getrennt darstellen lassen:

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{n\pi(x)}{a}\right) \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi(x)}{a}\right) \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

Dies ist eine Folge der Spiegelsymmetrie des Potentials. Es ist offensichtlich, dass sich die geraden und ungeraden Zustände mit anwachsender Energie miteinander abwechseln:

$$✓ \quad \psi_1(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$✓ \quad \psi_2(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$$✓ \quad \psi_3(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

$$✓ \quad \psi_4(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)$$

Und so weiter.

Beachten Sie, dass der Kosinus symmetrisch zum Nullpunkt ist: $\psi(x) = \psi(-x)$. Der Sinus ist dagegen antisymmetrisch: $-\psi(x) = \psi(-x)$.

Begrenztes Potential: Einen Blick auf Teilchen und Potentialstufen

Wirklich unendliche Potentiale (wie die im vorigen Abschnitt diskutierten), treten in der Realität kaum auf. In diesem Abschnitt werden Sie einige realistischere Beispiele kennenlernen, wo das Potential einen endlichen Wert V_0 annimmt und nicht unendlich ist. Betrachten Sie beispielsweise die Abbildung 3.4. Dort bewegt sich ein Teilchen auf eine Potentialstufe zu. Im Moment befindet sich das Teilchen in einem Bereich, in dem das Potential $V = 0$ ist, doch gleich wird es den Bereich $V = V_0$ erreichen.

Betrachtet man die Energie E des Teilchens, so sind zwei Fälle zu unterscheiden:

✓ **$E > V_0$:** Klassisch betrachtet erwarten Sie im Fall $E > V_0$, dass das Teilchen in der Lage ist, seinen Weg in das Gebiet $x > 0$ fortzusetzen.

✓ **$E < V_0$:** Wenn $E < V_0$ ist, erwarten Sie, dass das Teilchen zurückprallt und nicht in der Lage ist, seinen Weg in das Gebiet $x > 0$ fortzusetzen.

In diesem Abschnitt betrachten Sie zunächst den Fall, dass die Energie E des Teilchens größer ist als das Potential V_0 , wie in Abbildung 4.4 dargestellt. Anschließend wird der Fall $E < V_0$ behandelt.

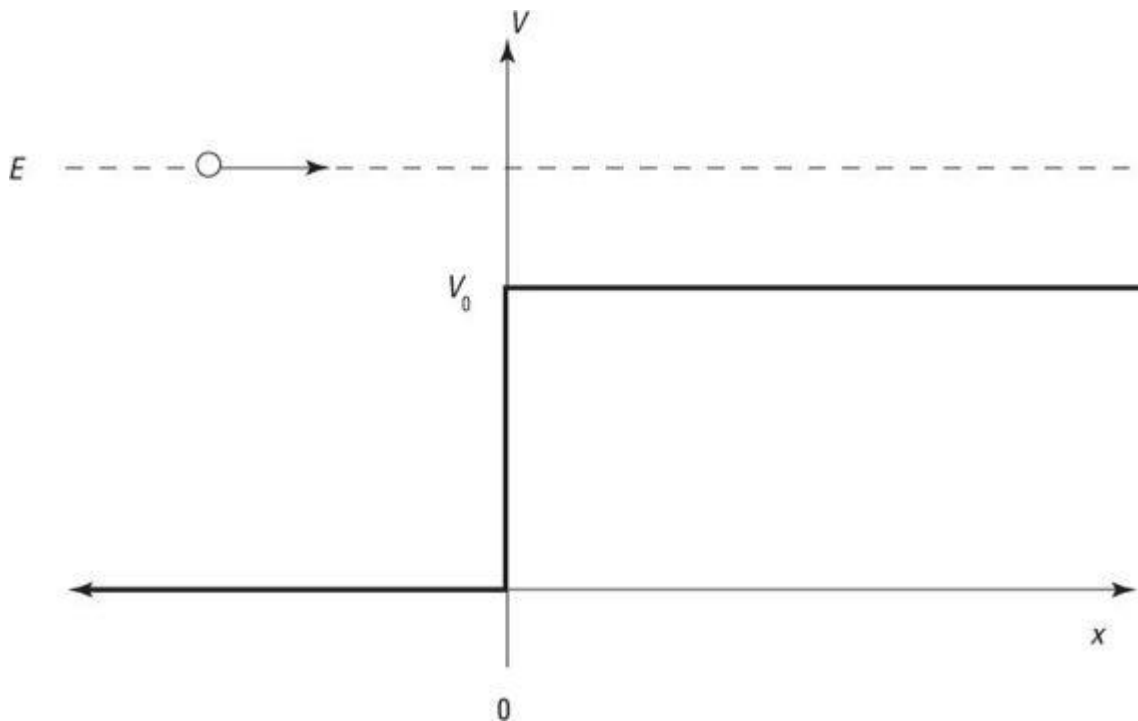


Abbildung 4.4: Eine Potentialstufe mit $E > V_0$

Angenommen, das Teilchen hat genügend Energie

Die Energie E des Teilchens soll in diesem Fall größer als das Potential V_0 sein. Behandelt man die Situation nun quantenmechanisch, so sieht die Schrödinger-Gleichung folgendermaßen aus:

$$\checkmark \text{ Im Gebiet } x < 0: \frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

Dabei ist $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$.

$$\checkmark \text{ Im Gebiet } x > 0: \frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k_2^2\psi_2(x) = 0$$

In dieser Gleichung ist $k_2^2 = 2m(E-V_0)/\hbar^2$.

Somit ändert sich k beim Übergang von einem Bereich in den anderen, wie man in Abbildung 4.4 erkennt.

Behandelt man die erste Gleichung wie eine Differentialgleichung zweiter Ordnung, so lautet die allgemeine Lösung wie folgt:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \text{ für } x < 0$$

Löst man die zweite Gleichung für $x > 0$, so erhält man:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \text{ für } x > 0$$

Man beachte, dass e^{ikx} ebene Wellen beschreibt, die sich in x -Richtung ausbreiten und e^{-ikx} ebene Wellen, die sich in die entgegengesetzte Richtung (nach $-x$) bewegen.

Diese Lösung besagt, dass Wellen von links auf die Potentialstufe treffen können und dann entweder transmittiert (durchgelassen) oder reflektiert werden. Aufgrund dieser Ausgangslage kann die Welle nur nach links reflektiert werden, aber nicht nach rechts: folglich muss D gleich null sein. Demnach sehen die Wellengleichungen wie folgt aus:

$$\checkmark \text{ Für } x < 0: \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\checkmark \text{ Für } x > 0: \psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$

Der Term Ae^{ik_1x} beschreibt die einfallende Welle, der Term Be^{-ik_1x} die reflektierte Welle und Ce^{ik_2x} ist die transmittierte Welle.

Die Wahrscheinlichkeit von Reflexion und Transmission bestimmen

Man kann die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen an der Potentialstufe reflektiert oder transmittiert wird, bestimmen, indem man die *Reflexions-* und *Transmissionskoeffizienten* berechnet. Wenn J_e die einfallende Stromdichte ist, J_r die reflektierte und J_t die transmittierte, so berechnet sich der Reflexionskoeffizient R wie folgt:

$$R = \frac{J_r}{J_e}$$

Der Transmissionskoeffizient T ist gegeben durch:

$$T = \frac{J_t}{J_e}$$

Nun müssen also J_r , J_e und J_t berechnet werden. Zunächst wird J_e bestimmt. Das ist nicht allzu schwer, wenn man die Definition für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte kennt. Sie lautet ganz allgemein:

$$J_e = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_e(x) \frac{d\psi_e^*(x)}{dx} - \psi_e^*(x) \frac{d\psi_e(x)}{dx} \right]$$

Da der einfallende Anteil der Welle $\psi_i(x) = Ae^{ik_1x}$ ist, gilt für die einfallende Stromdichte:

$$J_e = \frac{i\hbar}{2m} \left[Ae^{ik_1x} \cdot (-Aik_1e^{-ik_1x}) - Ae^{-ik_1x} \cdot Aik_1e^{ik_1x} \right]$$

Vereinfacht man diesen Ausdruck, so erhält man für die Stromdichte der einfallenden Welle folgenden Ausdruck:

$$J_e = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2$$

Die Stromdichten J_r und J_t sehen entsprechend aus:

$$J_r = \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2$$

$$J_t = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2$$

Damit ergibt sich für den Reflektionskoeffizienten:

$$R = \frac{J_r}{J_e} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

und für den Transmissionskoeffizienten T:

$$T = \frac{J_t}{J_e} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

A, B und C bestimmen

Doch wie bekommt man die Konstanten A, B und C heraus? Ganz einfach, genauso wie im Fall des unendlichen rechteckigen Potentialtopfes mithilfe der Randbedingungen (siehe den früheren Abschnitt »Gebundene Teilchen in unendlichen rechteckigen Potentialtöpfen«). An dieser Stelle kann man nicht unbedingt sagen, dass $\psi(x)$ gegen null geht, da das Potential hier nicht unendlich ist. Statt dessen besagen die Randbedingungen, dass $\psi(x)$ und $d\psi(x)/dx$ über den Rand der Potentialstufe hinaus stetig sind. Mit anderen Worten:

$$✓ \quad \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$✓ \quad \frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$$

Sie wissen folgendes:

$$✓ \quad \text{Für } x < 0: \quad \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

✓ Für $x > 0$: $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$

Setzt man diese beiden Gleichungen in $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ ein, so erhält man $A + B =$

C. Und das Einsetzen in $\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$ ergibt:

$$k_1 A - k_1 B = k_2 C$$

Löst man nach B auf, erhält man:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A$$

Löst man nach C auf, erhält man:

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Anschließend könnte man A mithilfe der Normalisierungsbedingung für die Wellenfunktion berechnen:

$$1 = \int |\psi(x)|^2 dx$$

Allerdings benötigt man A hier gar nicht, da es aus den Gleichungen für den Reflektions- und Transmissionskoeffizienten herausfällt. Da:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

folgt somit:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Das ist ein interessantes Ergebnis; es weicht von der klassischen Physik ab, die besagt, dass es keine Reflexion von Teilchen geben sollte. Wenn $k_1 \neq k_2$ ist, kommt es, wie Sie sehen, in der Tat zu einer Reflexion der Teilchen.

Wenn k_1 sich k_2 annähert, geht R gegen 0 und T gegen 1, was zu erwarten war.

Sie haben hier also ein Ergebnis, das von der klassischen Physik abweicht – das Teilchen kann an der Potentialstufe reflektiert werden. Hier kommt also der Wellencharakter des Teilchens wieder ins Spiel.

Abbildung 4.5 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(r)|^2$ für eine Potentialstufe mit $E > V_0$.

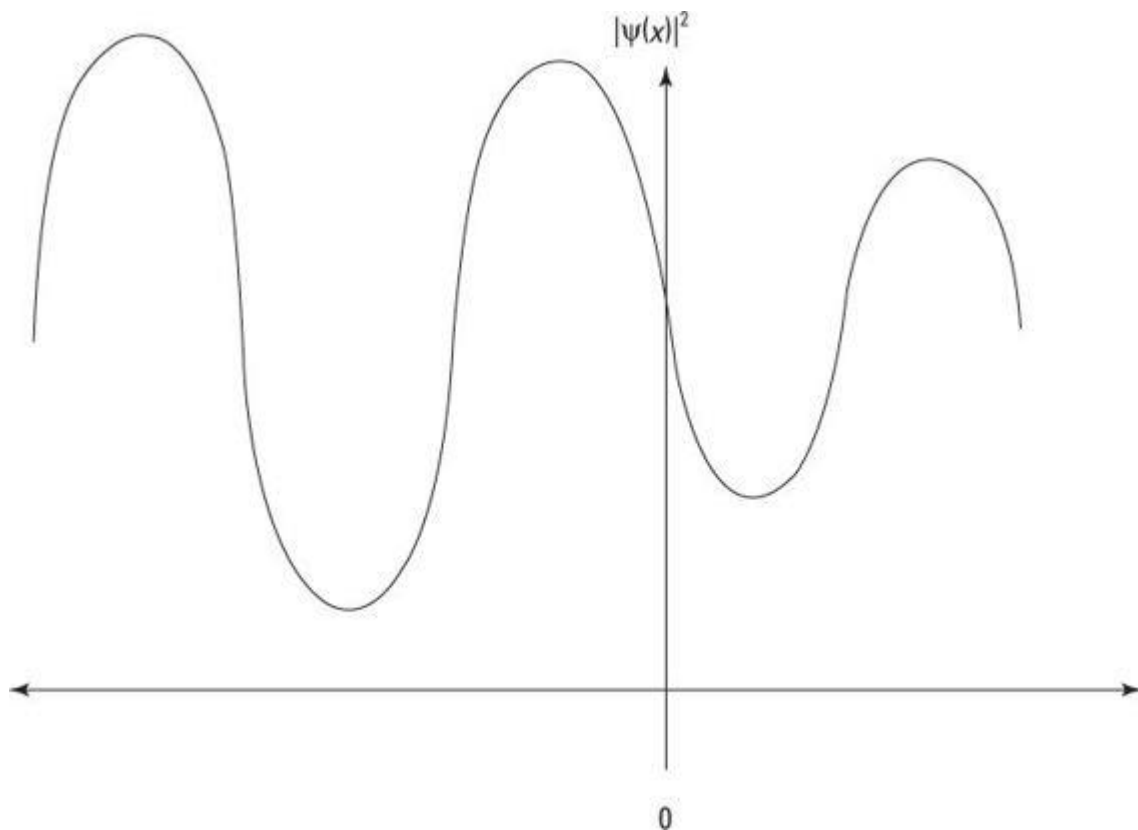


Abbildung 4.5: $|\psi(r)|^2$ für eine Potentialstufe mit $E > V_0$

Angenommen, das Teilchen hat nicht genug Energie

Okay, jetzt betrachten Sie die Potentialstufe für den Fall, dass $E < V_0$ ist, wie in Abbildung 4.6 dargestellt. In diesem Fall hat das Teilchen entsprechend der klassischen Physik nicht genug Energie, um in den Bereich $x > 0$ zu gelangen. Sehen Sie sich nun an, was die Quantenphysik dazu sagt.

Nehmen Sie nun zuerst das Gebiet $x < 0$ in Angriff. Hier sieht die Schrödinger-Gleichung wie folgt aus:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

wobei $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ ist.

Sie kennen das Ergebnis aus der vorangegangenen Diskussion über Potentialstufen (siehe »Begrenztes Potential: Einen Blick auf Teilchen und Potentialstufen«):

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{für } x < 0$$

Okay, doch was ist mit dem Gebiet $x > 0$? Das ist eine andere Geschichte. Die Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k^2\psi_2(x) = 0 \quad \text{für } x > 0$$

wobei $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ ist.

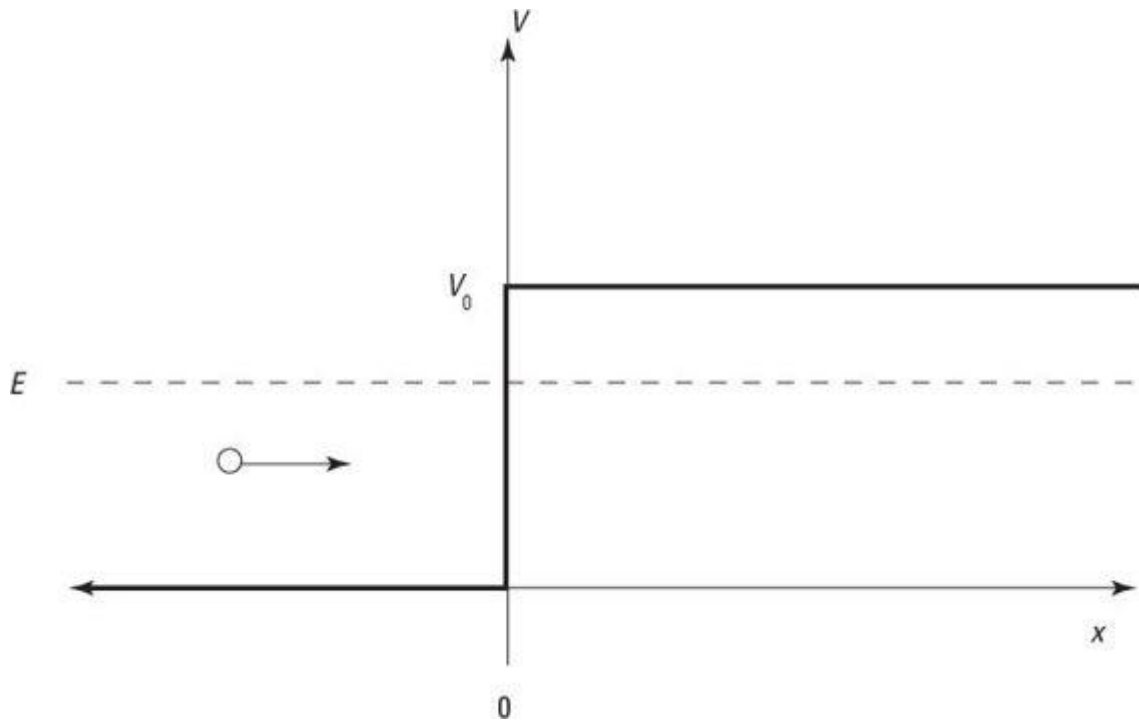


Abbildung 4.6: Eine Potentialstufe mit $E < V_0$

Aber aufgepasst: $E - V_0$ ist kleiner als 0, also wird k imaginär, was physikalisch unmöglich ist. Also tauscht man in der Schrödinger-Gleichung das Plus gegen ein Minus:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0 \quad \text{für } x > 0$$

Dabei gilt für k_2 folgendes (man beachte, dass k_2 für $E < V_0$ positiv ist):

$$k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Jetzt können Sie die Differentialgleichung lösen:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0 \quad \text{für } x > 0$$

Es gibt zwei linear unabhängige Lösungen:

$$\checkmark \quad \psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$

$$\checkmark \psi_2(x) = De^{k_2 x}$$

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2}(x) - k_2^2 \psi_2(x) = 0$$

Daher lautet die allgemeine Lösung für $x > 0$ wie folgt:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x} + De^{k_2 x}$$

Wellenfunktionen müssen allerdings überall endlich sein, aber der zweite Term ist sicher nicht endlich, wenn x gegen unendlich geht, also muss D gleich null sein. (Man beachte, dass auch der erste Term divergiert, wenn x gegen negativ unendlich geht. Da die Potentialstufe aber durch $x > 0$ beschränkt ist, stellt das kein Problem dar.) Die Lösung für $x > 0$ lautet also:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x} \quad x > 0$$

Somit lauten die Wellenfunktionen für die beiden Bereiche:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \quad x < 0$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x} \quad x > 0$$

Betrachtet man nun die einfallende, die reflektierte und die transmittierte Wellenfunktion $\psi_e(x)$, $\psi_r(x)$ und $\psi_t(x)$, so ergibt sich das folgende:

$$\checkmark \psi_e(x) = Ae^{ik_1 x}$$

$$\checkmark \psi_r(x) = Be^{-ik_1 x}$$

$$\checkmark \psi_t(x) = Ce^{-ik_2 x}$$

Reflexions- und Transmissionskoeffizienten bestimmen

Jetzt kann man die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten R und T berechnen (wie es für den Fall $E > V_0$ in dem früheren Abschnitt »Angenommen, das Teilchen hat genügend Energie« durchgeführt wurde):

$$R = \frac{J_r}{J_e}$$

$$T = \frac{J_t}{J_e}$$

In diesem Fall ist das sehr einfach. Betrachten Sie J_t :

$$J_t = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_t(x) \frac{d\psi_t^*(x)}{dx} - \psi_t^*(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} \right]$$

Da $\psi_t(x) = Ce^{-ik_2x}$ ist, ist $\psi_t^*(x)$ reel, sodass in diesem Fall Folgendes gilt:

$$J_t = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_t(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} - \psi_t(x) \frac{d\psi_t(x)}{dx} \right]$$

Und diese Gleichung ist natürlich gleich null.

Da $J_t = 0$ ist, ist auch $T = 0$. Wenn $T = 0$ ist, muss $R = 1$ sein. Das bedeutet, dass man eine totale Reflexion hat, genau wie in der klassischen Lösung.

Die Nichtnull-Lösung: Ein Teilchen im Bereich $x > 0$

Obwohl totale Reflexion vorliegt, gibt es einen Unterschied zwischen der mathematisch quantenmechanischen und der klassischen Lösung: Es besteht eine winzige Chance, in dem Gebiet $x > 0$ ein Teilchen zu finden. Um das zu verstehen, muss man die Wahrscheinlichkeitsdichte für $x > 0$ betrachten, die wie folgt lautet:

$$P(x) = |\psi_t(x)|^2$$

Setzt man die Wellenfunktion $\psi_t(x)$ ein, so erhält man:

$$P(x) = |\psi_t(x)|^2 = |C|^2 e^{-2k_2x}$$

Man kann mithilfe der Stetigkeitsbedingungen C durch A ausdrücken:

$$\checkmark \quad \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\checkmark \quad \frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$$

Benutzt man diese Bedingungen, so erhält man:

$$P(x) = |C|^2 e^{-2k_2 x} = \frac{4k_1^2 |A|^2 e^{-2k_2 x}}{k_1^2 + k_2^2}$$

Dieser Ausdruck geht sehr schnell gegen null, wenn x groß wird, doch in der Nähe von $x = 0$ hat er einen Wert, der von null verschieden ist.

Abbildung 4.7 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte bei einer Potentialstufe für den Fall $E < V_0$:

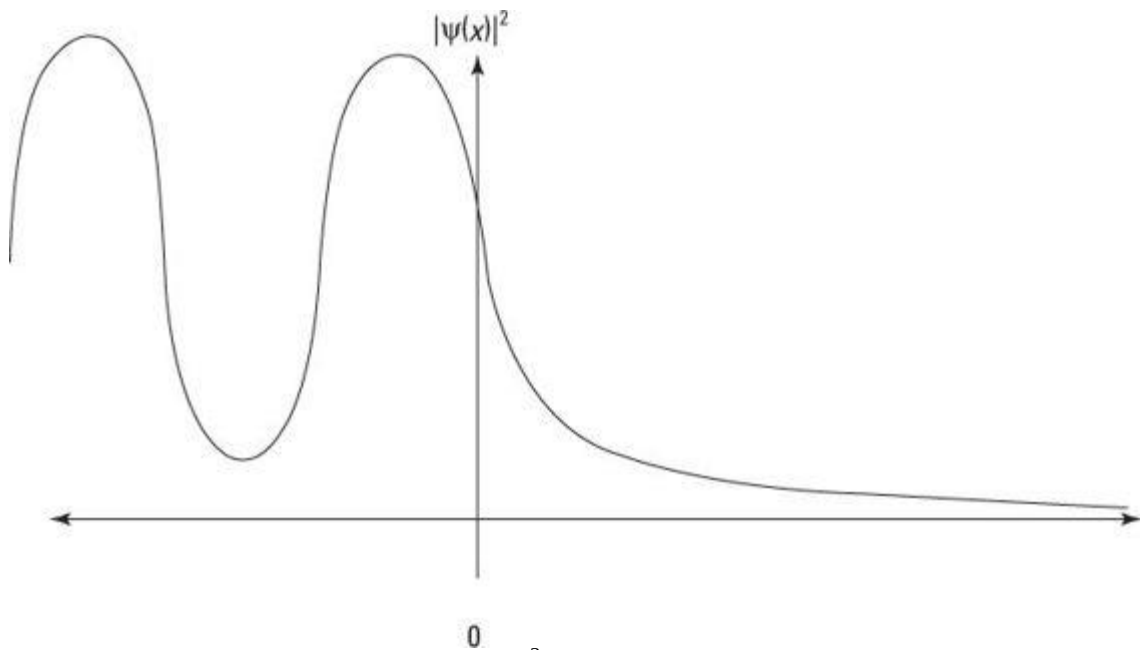


Abbildung 4.7: $|\psi(r)|^2$ für eine Potentialstufe mit $E < V_0$

Okay, Sie kennen sich nun mit unendlichen rechteckigen Potentialtöpfen und Potentialstufen aus. Was ist aber nun, wenn die Potentialstufe, z. B. in x -Richtung nicht bis ins Unendliche reicht, sondern selber beschränkt ist? Das führt zu den Potentialbarrieren auch Potentialschwellen genannt, die im folgenden Abschnitt diskutiert werden.

Gegen die Wand stoßen: Teilchen und Potentialbarrieren

Was wäre, wenn ein Teilchen seinen Weg durch eine Potentialstufe hindurch fortsetzen könnte – wenn die Stufe also von begrenzter Weite wäre? Dann haben Sie es mit einer Potentialbarriere zu tun, wie sie durch folgende Gleichungen beschrieben wird:

- ✓ $V(x) = 0$, für $x < 0$
- ✓ $V(x) = V_0$, für $0 \leq x \leq a$
- ✓ $V(x) = 0$, für $x > a$

Abbildung 4.8 zeigt, wie dieses Potential aussieht.

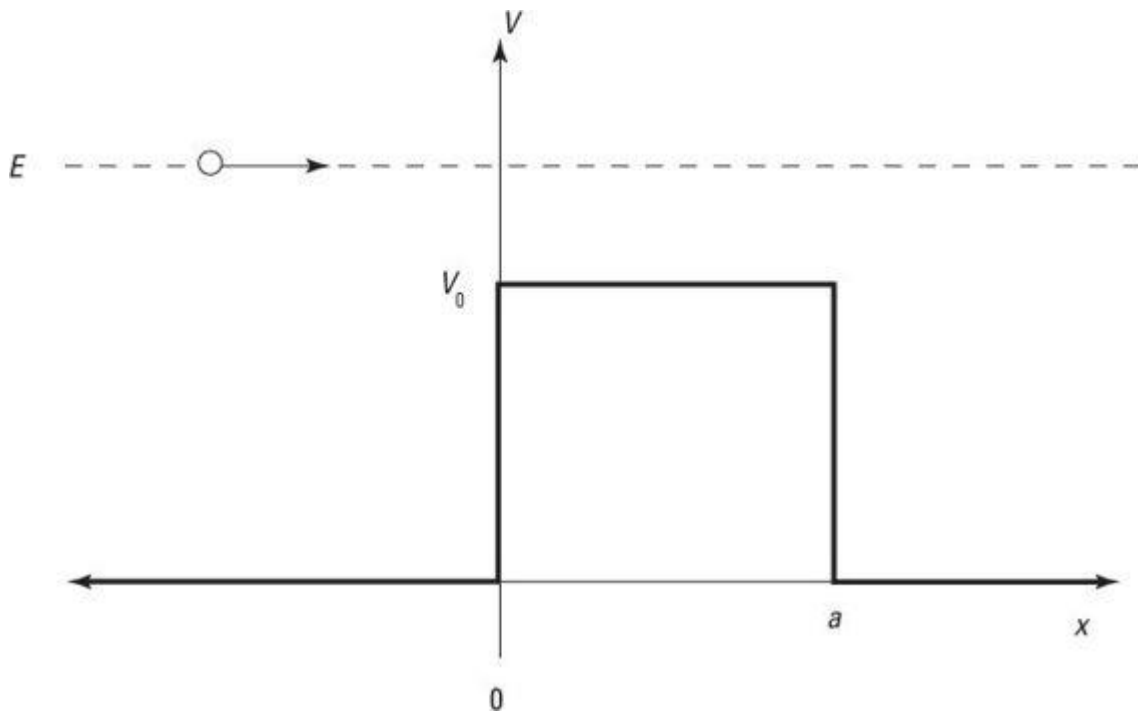


Abbildung 4.8: Eine Potentialbarriere mit $E > V_0$

Bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung für eine Potentialbarriere muss man zwei Fälle unterscheiden, entsprechend der Frage, ob das Teilchen eine größere oder eine geringere Energie als die Potentialbarriere aufweist. Mit anderen Worten, wenn E die Energie des einfallenden Teilchens ist, muss man die beiden Fälle $E > V_0$ und $E < V_0$ betrachten. Dieser Abschnitt beginnt mit $E > V_0$.

Überwinden der Potentialbarriere mit $E > V_0$

In dem Fall $E > V_0$ hat das Teilchen genug Energie, um die Potentialschwelle zu durchdringen und in den Bereich $x > a$ zu gelangen. Die Schrödinger-Gleichung sieht dabei folgendermaßen aus:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

✓ In dem Bereich $x < 0$:
wobei $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ ist.

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k_2^2\psi_2(x) = 0$$

✓ In dem Bereich $0 \leq x \leq a$:
wobei $k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ ist.

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_3(x) = 0$$

✓ In dem Bereich $x > a$:
wobei $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ ist.

Die Lösungen für $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ und $\psi_3(x)$ sind die folgenden:

✓ Für $x < 0$: $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

✓ Für $0 \leq x \leq a$: $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$

✓ Für $x > a$: $\psi_3(x) = Ee^{ik_1x} + Fe^{-ik_1x}$

Da sich in dem Bereich $x > a$ keine nach links laufende Welle befinden kann, ist $F = 0$ und somit $\psi_3(x) = Ee^{ik_1x}$.

Aber wie bestimmt man A, B, C, D und E? Man benutzt die Stetigkeitsbedingungen, die in diesem Fall wie folgt aussehen:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\frac{d\psi_2}{dx}(a) = \frac{d\psi_3}{dx}(a)$$

Okay, mithilfe dieser Gleichungen erhält man die folgenden Beziehungen:

$$\checkmark \quad A + B = C + D$$

$$\checkmark \quad ik_1(A - B) = ik_2(C - D)$$

$$\checkmark \quad Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Ee^{ik_1a}$$

$$\checkmark \quad ik_2Ce^{ik_2a} - ik_2De^{-ik_2a} = ik_1Ee^{ik_1a}$$

Verknüpft man all diese Gleichungen miteinander, so kann man den Koeffizienten E mithilfe von A wie folgt ausdrücken:

$$E = 4k_1k_2Ae^{-ik_1a} \left[4k_1k_2 \cos(k_2a) - 2i(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2a) \right]^{-1}$$

Toll! Aber wie lautet der Transmissionskoeffizient T? T ist:

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2}$$

Und daraus ergibt sich:

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{k_1k_2} \right)^2 \sin^2(k_2a) \right]^{-1}$$

Puh! Man beachte, dass T gegen 1 geht, wenn k_1 gegen k_2 geht, wie man erwarten würde.

Und was ist mit dem Reflexionskoeffizienten R? An dieser Stelle soll Ihnen die Rechnerei erspart bleiben und nur das Ergebnis vorgeführt werden:

$$R = \left[1 + \frac{4 \left(\frac{E}{V_0} \right) \left(\frac{E}{V_0 - 1} \right)}{\sin^2 \left(a \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \left(\frac{E}{V_0 - 1} \right)^{1/2}} \right]$$

Abbildung 4.9 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(r)|^2$ für eine Potentialbarriere mit $E > V_0$.

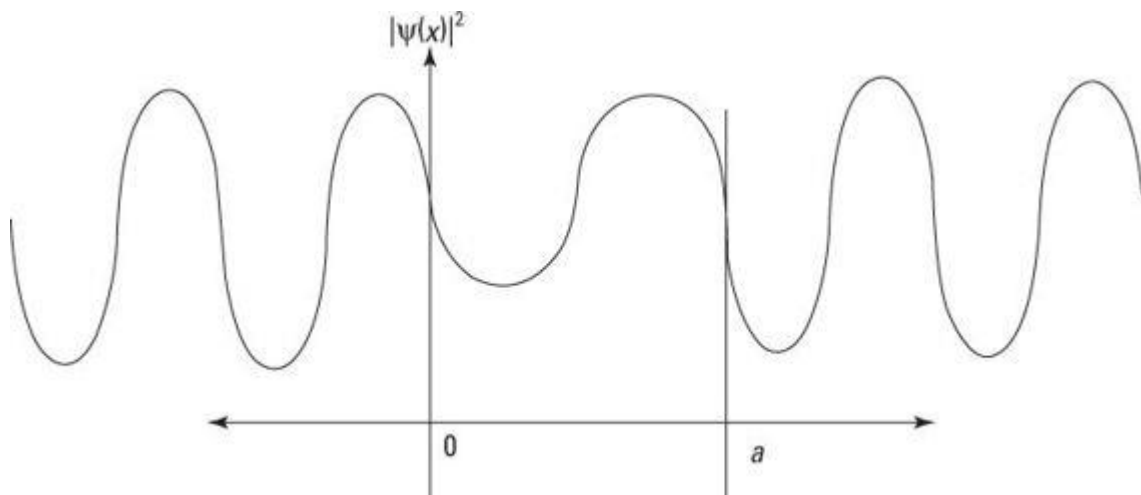


Abbildung 4.9: $|\psi(r)|^2$ für eine Potentialbarriere mit $E > V_0$

Das war die Potentialbarriere für den Fall $E > V_0$.

Überwinden der Potentialbarriere – auch mit $E < V_0$

Was passiert, wenn die Energie des Teilchens kleiner ist als das Potential der Barriere? Die Situation ist in Abbildung 4.10 dargestellt.

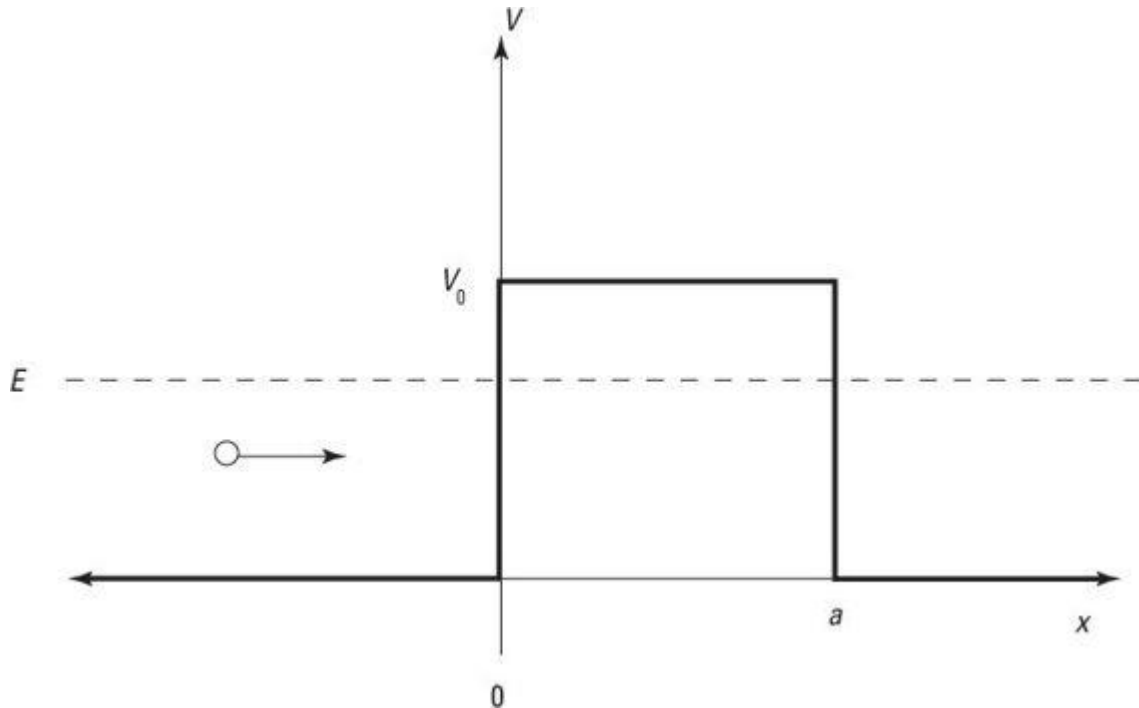


Abbildung 4.10: Eine Potentialbarriere mit $E < V_0$

Jetzt sieht die Schrödinger-Gleichung wie folgt aus:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$$

✓ In dem Bereich $x < 0$:

wobei $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ ist. In dem Bereich $0 \leq x \leq a$:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) + k^2\psi_2(x) = 0$$

wobei $k_2^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ ist.

$E - V_0$ ist hier aber kleiner als 0, das würde k imaginär machen. Da das physikalisch unmöglich ist, tauscht man das Vorzeichen in der Schrödinger-Gleichung von plus zu minus:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}(x) - k^2\psi_2(x) = 0$$

und setzt für k_2^2 : $k_2^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$.

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2}(x) + k_1^2\psi_3(x) = 0$$

✓ In dem Bereich $x > a$:
wobei $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ ist.
Das bedeutet, dass die Lösungen für $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ und $\psi_3(x)$ wie folgt lauten:

✓ Für $x < 0$: $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

✓ Für $0 \leq x \leq a$: $\psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$

✓ Für $x > a$: $\psi_3(x) = Ee^{ik_1x} + Fe^{-ik_1x}$

Da sich in dem Bereich $x > a$ keine nach links laufende Welle befindet, ist $F = 0$ und
somit $\psi_3(x) = Ee^{ik_1x}$.

Außerhalb des Bereichs $0 \leq x \leq a$ ist das Ergebnis ähnlich wie für $E > V_0$. Die Wellenfunktion oszilliert in den Bereichen, wo die Energie positiv ist, also bei $x < 0$ und $x > a$, und im Bereich $0 \leq x \leq a$ fällt sie exponentiell ab.

Abbildung 4.11 zeigt die Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$.

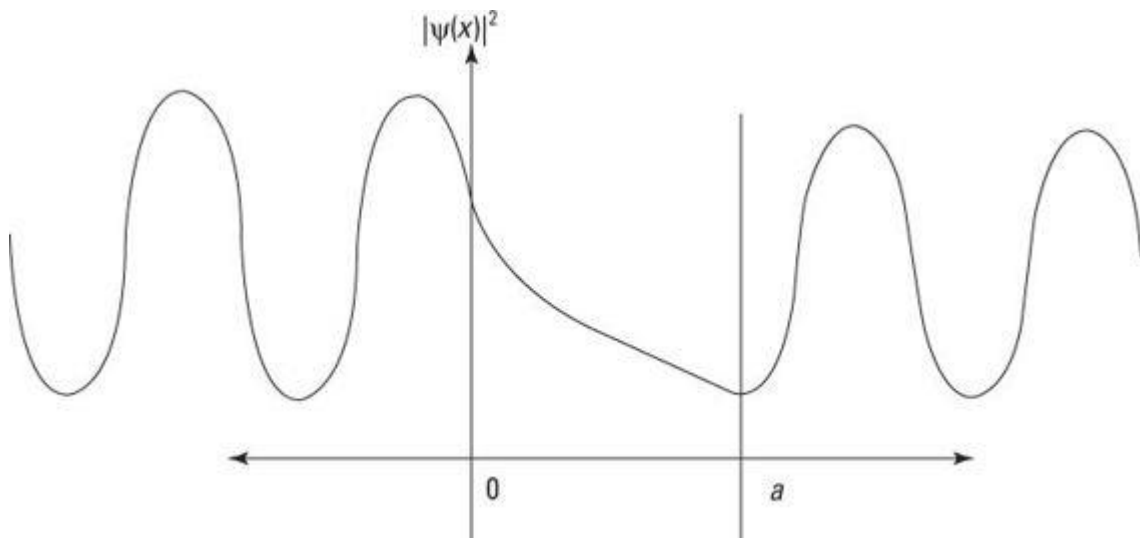


Abbildung 4.11: $|\psi(r)|^2$ für eine Potentialbarriere mit $E < V_0$

Reflexions- und Transmissionskoeffizienten bestimmen

Aber was ist mit den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten R und T? Für sie gilt:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2}$$

Wie Sie sich denken können, muss man die Stetigkeitsbedingungen benutzen, um A, B und E zu bestimmen:

$$\checkmark \quad \psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\checkmark \quad \frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$$

$$\checkmark \quad \psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\checkmark \quad \frac{d\psi_2}{dx}(a) = \frac{d\psi_3}{dx}(a)$$

Ein schönes Stückchen Algebra und Trigonometrie ist erforderlich, um damit R und T zu bestimmen; hier folgen nun die Ergebnisse für R und T:

$$R = \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \left[4 \cosh^2(k_2 a) + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1}$$

$$T = 4 \left[4 \cosh^2(k_2 a) + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 a) \right]^{-1}$$

Ende der Rechnung: Diese Ausdrücke sind in der Tat mathematisch etwas kompliziert, doch das wirklich Erstaunliche daran ist, dass sie besagen, dass es eine Wahrscheinlichkeit gibt, dass ein Teilchen, das auf die Potentialschwelle trifft, diese Schwelle durchdringen kann!

Ein klassisches Teilchen würde für $E < V_0$ immer von der Barriere reflektiert werden. Der Quantenphysik zufolge gibt es dagegen auch in diesem Fall eine endliche Durchgangswahrscheinlichkeit. Den Namen für dieses rein quantenmechanische Phänomen haben Sie sicher schon gehört: Das ist der sogenannte Tunneleffekt. Und Sie haben ihn gerade mathematisch beschrieben!

Hindurch tunneln

Das Tunneln ist eines der spannendsten Ergebnisse der Quantenphysik; es bedeutet, dass sich Teilchen aufgrund der Ausdehnung der Wellenfunktionen durch klassisch verbotene Bereiche bewegen können. Das ist selbstverständlich ein mikroskopischer Effekt – versuchen Sie niemals, durch geschlossene Türen zu gehen –, aber er ist sehr wichtig. Unter anderem ermöglicht das Tunneln das Funktionieren von Halbleitertransistoren und integrierten Schaltkreisen.

Wenn Tunneln eine Rolle spielt, kann man, ausgehend von einer bestimmten Einfallintensität, den Transmissionskoeffizienten berechnen, der die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein Teilchen den Bereich durchdringt. Im obigen Abschnitt ist das relativ einfach, da die Barriere, die das Teilchen durchtunneln muss, rechteckig ist. Aber im Allgemeinen ist es nicht so einfach den Transmissionskoeffizienten zu bestimmen. Doch lesen Sie weiter.

Die Transmission mit der WKB-Methode bestimmen

Die Methode, die man im Allgemeinen benutzt, um den Transmissionskoeffizienten zu bestimmen, beruht darauf, das Potential, mit dem man arbeitet, in eine Folge von rechteckigen Barrieren zu zerlegen, die man dann aufsummiert. Dieser Weg heißt *Wentzel-Kramers-Brillouin-Methode* (WKB-Methode): die Behandlung eines Potentials $V(x)$ als eine Summe von rechteckigen Potentialbarrieren.

Das Ergebnis der WKB-Methode ist, dass der Transmissionskoeffizient für ein Teilchen der Masse m und der Energie E in einem beliebigen Potential $V(x)$ durch folgenden Ausdruck gegeben ist (er gilt so lange, wie $V(x)$ eine glatte, sich nur langsam ändernde Funktion ist):

$$T \sim \exp \left[- \left(\frac{2}{\hbar} \right) \int_{x_1}^{x_2} \left(2m(V(x) - E) \right)^{1/2} dx \right]$$

So, jetzt können Sie Ihre Freunde damit überraschen, die Wahrscheinlichkeit zu berechnen, mit der ein Teilchen durch ein beliebiges Potential tunnelt. Das ist natürlich ein Stoff für Science-Fiction – aber auf der mikroskopischen Ebene funktioniert es.

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ungebundene Teilchen

Was ist mit Teilchen außerhalb von sämtlichen Potentialtöpfen – also mit freien Teilchen? Es gibt eine Unmenge von Teilchen, die sich frei im Universum bewegen, und die Quantenphysik kann Einiges über sie sagen.

Die Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Was ist, wenn das Teilchen ein freies Teilchen mit $V(x) = 0$ ist? In diesem Fall hat man die folgende Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - E\psi(x) = 0$$

Diese kann man wie folgt schreiben:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0$$

wobei $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ist.

Die allgemeine Lösung für diese Schrödinger-Gleichung ist:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Ergänzt man die Zeitabhängigkeit zu dieser Gleichung, so erhält man folgende zeitabhängige Wellenfunktion:

$$\psi(x, t) = A \exp\left(ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right) + B \exp\left(-\left(ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right)\right)$$

Das ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung, doch erscheint sie sehr unphysikalisch. Um das zu erkennen, beachte man, dass man für keinen der beiden Terme in der Gleichung die

Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ normalisieren kann (mehr über das Normalisieren steht in dem Abschnitt »Die Normalisierung der Wellenfunktion«):

$$|\psi(x)|^2 = |A|^2 \text{ oder } |B|^2$$

Was geht hier vor? Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort eines Teilchens ist für alle x gleich! Mit anderen Worten, Sie können den Ort des Teilchens nicht genau bestimmen.

Das Ergebnis beruht auf der Form der zeitabhängigen Wellenfunktion, die den genauen Wert der Wellenzahl k benutzt sowie $p = \hbar k$ und $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Die Gleichung besagt also, dass man E und p genau kennt. Und wenn man E und p genau kennt, dann bedeutet das eine große Unbestimmtheit von x und t ; in diesem Fall sind x und t sogar absolut unbestimmt. Das stimmt nicht mit der physikalischen Wirklichkeit überein.

Schließlich ist die Wellenfunktion $\psi(x)$, wie sie oben angegeben ist, nicht normalisierbar. Versucht man zum Beispiel, den ersten Term zu normalisieren, so erhält man folgendes Integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \psi^*(x) dx$$

Für den ersten Term von $\psi(x, t)$ ergibt das:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \psi^*(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty$$

Und dasselbe gilt für den zweiten Term von $\psi(x, t)$.

Was ist also hier zu tun, um ein physikalisches Teilchen zu erhalten? Der nächste Abschnitt erklärt es.

Ein physikalisches Teilchen mit einem Wellenpaket beschreiben



Wenn man einige Lösungen der Schrödinger-Gleichung hat, so ist jede Linearkombination aus diesen Lösungen wieder eine Lösung. Das ist der Schlüssel, um ein echtes physikalisches Teilchen zu erhalten: Man addiert verschiedene Wellenfunktionen, sodass man ein Wellenpaket erhält; also eine Überlagerung verschiedener Wellenfunktionen der Form

$e^{i(kx - Et/\hbar)}$, bei der die Wellenfunktionen an einem Ort konstruktiv und an allen anderen Orten destruktiv interferieren (gegen null gehen):

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n e^{i(k_n x - E_n t/\hbar)}$$

Dies wird gewöhnlich als Integral geschrieben:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k, t) e^{i(kx - Et/\hbar)} dk$$

Was ist $\phi(k, t)$? Das ist die Amplitude einer jeden beteiligten Wellenfunktion; man kann $\phi(k, t)$ durch die Fourier-Transformation der Gleichung bestimmen:

$$\phi(k, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-i(kx - Et/\hbar)} dx$$

Da $k = p/\hbar$, kann man die Gleichungen des Wellenpakets auch in Abhängigkeit von p darstellen:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, t) e^{i(px - Et/\hbar)} dp$$

$$\phi(k, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-i(kx - Et/\hbar)} dx$$

Gut, Sie fragen sich sicher, was hier vor sich geht? $\psi(x,t)$ wird durch $\phi(p, t)$ bestimmt und $\phi(p,t)$ ist durch $\psi(x,t)$ definiert. Das sieht nach einem Zirkelschluss aus.

Die Antwort ist, dass die beiden obigen Gleichungen keine Definitionen von $\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ sind, sondern lediglich Gleichungen, die die beiden zueinander in Beziehung setzen. Sie haben also die Freiheit, Ihre eigene Form des Wellenpaketes zu wählen – entscheiden Sie sich zum Beispiel für die Form von $\phi(p, t)$, dann können Sie $\psi(x, t)$ an Hand von

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k, t) e^{i(kx - Et/\hbar)} dk$$

bestimmen.

Ein Gauss'sches Beispiel

Hier folgt ein Beispiel für die Form eines Wellenpakets. Abbildung 4.12 zeigt ein sogenanntes Gauss'sches Wellenpaket, das an einem Ort lokalisiert und an den anderen null ist.

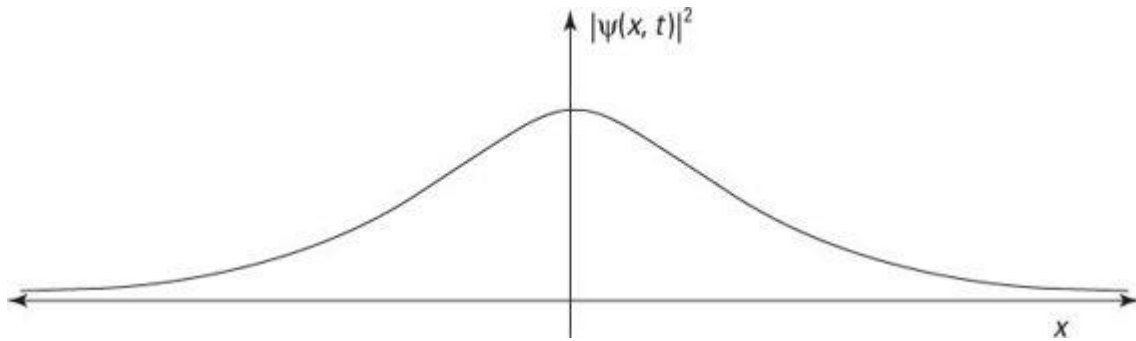


Abbildung 4.12: Ein Gauss'sches Wellenpaket

Man kann folgende Amplitude $\phi(k)$ für das Wellenpaket wählen:

$$\phi(k) = A \exp \left[-a^2 (k - k_0) / 4 \right]$$

Um A zu bestimmen, normalisiert man zunächst $\phi(k)$. Das geht wie folgt:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk$$

Einsetzen von $\phi(k)$ ergibt:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{-a^2}{2} (k - k_0) \right] dk$$

Lösen des Integrals (das meint, in einer mathematischen Formelsammlung nachschlagen) ergibt:

$$1 = |A|^2 \left[2\pi / a^2 \right]^{1/2}$$

$$A = \left[\frac{a^2}{2\pi} \right]^{1/4}$$

Deshalb ist

Die Wellenfunktion lautet somit:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \left[\frac{a^2}{2\pi} \right]^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{-a^2}{4} (k - k_0)^2 \right] e^{ikx} dk$$

Dieses kleine Prachtstück von Integral kann entwickelt werden; man erhält dann:

$$\psi(x) = \left[\frac{2}{\pi a^2} \right]^{1/4} \exp \left[-\frac{x^2}{a^2} \right] e^{ik_0 x}$$

Das ist also die Wellenfunktion für das Gauss'sche Wellenpaket – und sie ist bereits normalisiert! (**Man beachte:** Der Teil $\exp[-x^2/a^2]$ ist der Gauss'sche Anteil, der dem Wellenpaket die charakteristische Form gibt, wie sie in Abbildung 4.12 zu erkennen ist.)

Nun kann man dieses Wellenpaket benutzen, um die Wahrscheinlichkeit zu bestimmen, dass das Teilchen sich beispielsweise im Bereich $0 \leq x \leq a/2$ befindet. Die Wahrscheinlichkeit ist:

$$\int_0^{a/2} |\psi(x)|^2 dx$$

In diesem Fall lautet das Integral:

$$\left[\frac{2}{\pi a^2} \right]^{1/2} \int_0^{a/2} \exp \left(-\frac{2x^2}{a^2} \right) dx$$

Und das ergibt:

$$\left[\frac{2}{\pi a^2} \right]^{1/2} \int_0^{a/2} \exp \left(-\frac{2x^2}{a^2} \right) dx = 1/3$$

Somit ist die Wahrscheinlichkeit 1/3, dass das Teilchen sich in dem Bereich $0 \leq x \leq a/2$ befindet. Klasse!

Das Wichtigste von Kapitel 4 noch einmal in Kürze

Die erste und wichtigste Aufgabe dieses Kapitels bestand darin, Sie mit der Schrödinger-Gleichung vertraut zu machen und Ihnen die Möglichkeit zu geben, sich im Umgang mit dieser grundlegenden Gleichung der Quantenmechanik zu üben. Aus diesem Grund wurden zunächst einfache physikalische Systeme untersucht, wie sie Potentialtöpfe, -stufen und -barrieren darstellen. Der Lösungsweg, den Sie dabei gegangen sind, wiederholt sich im Prinzip bei allen quantenmechanischen Problemstellungen.

An erster Stelle steht immer das Aufstellen der Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

In diesem Kapitel bestand Ihre Aufgabe vor allem darin, diese Differentialgleichung für verschiedene Potentiale $V(r)$ zu lösen. Wenn man die Wellenfunktion $\psi(r)$ bestimmt hat, die die Schrödinger-Gleichung für das jeweilige Potential erfüllt, kann man sowohl die erlaubten Energiezustände eines physikalischen Systems angeben als auch die Wahrscheinlichkeit berechnen, dass es sich in einem bestimmten Zustand befindet.

Bei der Lösung der Gleichung müssen unbedingt die Randbedingungen beachtet werden; sie haben fast ausnahmslos einen großen Einfluss auf die Lösung. In den in diesem Kapitel betrachteten Fällen wurden die Randbedingungen durch den Verlauf des Potentials gegeben.

Die Wellenfunktion zu lösen bedeutet, eine Differentialgleichung zweiter Ordnung zu lösen. In diesem Kapitel zeigt sich, dass dies für einfache Systeme wie Potentialtöpfe, -stufen und -barrieren nicht sehr schwierig ist.

Wie bereits in Kapitel 2 erläutert wurde, muss sicher gestellt werden, dass sich ein Quantenteilchen zu jeder Zeit irgendwo im Raum aufhält. Das bedeutet, dass sich die Wahrscheinlichkeiten $|\psi(x)|^2 dx$, ein Teilchen zwischen x und dx zu finden, zu 1 summieren müssen, wenn man über den gesamten betrachteten Bereich integriert. Daher muss die Wellenfunktion des Teilchens die Normierungsbedingung erfüllen:

$$1 = \int |\psi(x)|^2 dx$$

In diesem Kapitel wurde bereits anhand der ersten Problemstellung, der Untersuchung eines Teilchens in einem Potentialtopf, gezeigt, wie man mithilfe der Normierungsbedingung unbekannte Konstanten bestimmen kann.

Die Berechnung und Interpretation der erlaubten Energiezustände eines physikalischen Systems ist einer der zentralen Punkte bei der Untersuchung quantenmechanischer Probleme.

Darüber hinaus lassen sich die wichtigsten Ergebnisse dieses Kapitels folgendermaßen

zusammen fassen.

✓ In einem Potentialtopf sind die Energieniveaus quantisiert.

✓ Betrachtet man eine Potentialstufe oder eine Potentialbarriere, so muss man zwischen zwei Fällen unterscheiden:

- Teilchenenergie oberhalb der Potentialstufe ($E > V_0$)

- Teilchenenergie unterhalb der Potentialstufe ($E < V_0$)

✓ Man gibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen an einer Potentialstufe reflektiert oder transmittiert wird, in folgender Form an:

- Der Reflexionskoeffizient R beschreibt das Verhältnis von reflektierter Stromdichte zu einfallender Stromdichte:

$$R = \frac{J_r}{J_e}$$

- Der Transmissionskoeffizient T beschreibt das Verhältnis von transmittierter Stromdichte zu einfallender Stromdichte:

$$T = \frac{J_t}{J_e}$$

✓ Der Tunneleffekt besagt, dass ein atomares Teilchen eine endliche Potentialbarriere auch dann überwinden kann, wenn seine Energie kleiner als die Höhe der Barriere ist. Eins der wichtigsten Anwendungsbeispiele des Tunneleffekts ist der Alpha-Zerfall von Atomkernen. Er spielt aber auch im sogenannten Rastertunnelmikroskop eine große Rolle (STM = Scanning Tunneling Microscope)

Hin und her mit harmonischen Oszillatoren

In diesem Kapitel ...

- ▶ Hamilton-Operatoren und die Gesamtenergie
- ▶ Energiezustände mithilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bestimmen
- ▶ Die Matrix-Form des Operators für harmonische Oszillatoren
- ▶ Vergleich von klassischem und quantenmechanischem harmonischen Oszillator

Harmonische Oszillatoren sind physikalische Anordnungen mit periodischen Bewegungen, wie zum Beispiel Körper, die an Federn schwingen oder sich an Pendeln hin und her bewegen. Sie sind wahrscheinlich mit Physikaufgaben zum harmonischen Oszillator im makroskopischen Bereich vertraut, doch nun geht es in die mikroskopische Welt. Es gibt zahlreiche physikalische Problemstellungen, die sich näherungsweise durch harmonische Oszillatoren beschreiben lassen, wie etwa Atome in einer Kristallstruktur.

Die Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator

Bei der Untersuchung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators beginnt man genau wie bei der Untersuchung anderer eindimensionaler Probleme mit dem Erstellen der Schrödinger-Gleichung. In der Kurzform geschrieben lautet Sie:

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

Wie Sie wissen, beschreibt der Hamilton-Operator die Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems. Die Aufgabe besteht also zunächst darin, den Hamilton-Operator für harmonische Oszillatoren zu bestimmen. Um diese Aufgabe zu vereinfachen folgt eine kurze Beschreibung des klassischen harmonischen Oszillators.

Der klassische harmonische Oszillator

Klassisch betrachtet kann man die Kraft, die auf einen Körper wirkt, der eine harmonische Schwingung vollzieht, wie folgt darstellen (das ist das Hook'sche Gesetz):

$$F = -kx$$

In dieser Gleichung ist k die Federkonstante, gemessen in Newton/Meter, und x die Auslenkung. Das Entscheidende ist hier, dass die rücktreibende Kraft auf den schwingenden Körper proportional zu seiner Auslenkung ist. Mit anderen Worten, je weiter Sie eine Feder dehnen, desto kräftiger springt sie zurück.

Da $F = ma$, wobei m die Masse eines Teilchens in harmonischer Bewegung und a seine momentane Beschleunigung ist, kann man F ersetzen und folgende Gleichung schreiben:

$$ma + kx = 0$$

Die Gleichung für die momentane Beschleunigung lautet wie folgt, wobei x die Auslenkung und t die Zeit ist:

$$a = \frac{d^2 x}{dt^2}$$

Setzt man dies für a ein, so kann man die Gleichung für die Kraft in der folgenden Form schreiben:

$$ma + kx = \frac{md^2 x}{dt^2} + kx = 0$$

Teilt man durch die Masse des Teilchens, so erhält man:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{kx}{m} = 0$$

Berücksichtigt man $\frac{k}{m} = \omega^2$ (wobei ω die Kreisfrequenz ist), so folgt:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

Man kann diese Gleichung für x lösen, wobei A und B Konstanten sind:

$$x = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

Da die Lösung Sinus- und Kosinusterme enthält, die ja periodische Wellen beschreiben, stellt sie eine Schwingung dar.

Die Gesamtenergie in der Quanten-Schwingung

Nun wird der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik betrachtet. Der Hamilton-Operator ist die Summe aus kinetischer und potentieller Energie – die Gesamtenergie des Systems:

$$H = E_{kin} + E_{pot}$$

Beim harmonischen Oszillator gilt für diese Energien Folgendes:

✓ Die kinetische Energie zu jedem Zeitpunkt ist:

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$$

wobei p der Impuls des Teilchens und m seine Masse ist.

✓ Die potentielle Energie des Teilchens ist:

$$E_{pot} = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

wobei k die Federkonstante und x die Auslenkung ist (**Man beachte:** k fällt heraus, da $k/m = \omega^2$).

Deshalb schreibt man in der Quantenphysik den Hamilton-Operator in der Form:

$$H = E_{kin} + E_{pot}$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

Dabei ist P der Impuls- und X der Ortsoperator.

Setzt man diesen Ausdruck für den Hamilton-Operator in die Schrödinger-Gleichung ein, so lautet diese in der Ortsdarstellung folgendermaßen:

$$H\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

Wie Sie bereits wissen, kann man die Schrödinger-Gleichung aber auch in Form einer Zustandsgleichung ausdrücken:

$$H |\psi\rangle = \frac{p^2}{2m} |\psi\rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

Die Aufgabe besteht also darin, die Eigenwerte und Eigenzustände des Operators H zu bestimmen. Man kann die Differentialgleichung mithilfe der Funktionentheorie lösen, was auf die sogenannten Hermite-Polynome führt, die Sie im Verlauf dieses Kapitels auch noch kennen lernen werden. Hier soll jedoch zunächst eine algebraische Methode benutzt werden, bei der durch die Anwendung geeigneter Operatoren auf einen Eigenzustand von H die anderen *konstruiert* werden.

Setzt man dies in die Gleichung für den Hamilton-Operator ein, so ergibt sich die folgende Beziehung:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (p^2 + q^2)$$

Dabei genügen die hermiteschen Operatoren p und q der Vertauschungsrelation $[q, p] = i$.

Im Anschluss daran werden die Operatoren a , $a^\dagger$ und N eingeführt, die im eindimensionalen Fall keine unmittelbare physikalische Bedeutung haben. Dabei dienen die neuen Operatoren p und q als Basis für die *Leiteroperatoren* a und $a^\dagger$, die folgendermaßen definiert sind:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (q + ip)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (q - ip)$$

Die Operatoren a und $a^\dagger$ sind zueinander hermitesch konjugiert; für ihren Kommutator gilt:

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2} [q + ip, q - ip] = -\frac{i}{2} [q, p] + \frac{i}{2} [p, q]$$

Da der Kommutator von q und p nach der oben angegebenen Vertauschungsrelation i ergibt, folgt

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(p^2 + q^2)$$

Ersetzt man in der Gleichung die Größen q und p durch a und $a^\dagger$, so ergibt sich:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a)$$

Mithilfe des Kommutators von a und $a^\dagger$ kann man diese Gleichung wie folgt umformen:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(1 + a^\dagger a + a^\dagger a)$$

Führt man an dieser Stelle den *Besetzungszahloperator* $N = a^\dagger a$ ein, so folgt:

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$$

Der Operator N liefert die *Besetzungszahl* eines Energiezustands des harmonischen Oszillators. Bezeichnet man die Eigenzustände von N mit $|n\rangle$, so erhält man folgenden Ausdruck, wobei n die Besetzung des n -ten Zustands angibt:

$$N |n\rangle = n |n\rangle$$

Da $H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$ und $H |n\rangle = E_n |n\rangle$, ergibt sich aus den beiden obigen Gleichungen:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Erstaunlicherweise erhält man so die Energieeigenwerte des n -ten Zustands des quantenmechanischen Oszillators. Die Energiezustände lauten wie folgt:

✓ Der Grundzustand entspricht $n = 0$:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

✓ Der erste angeregte Zustand ist:

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

✓ Der zweite angeregte Zustand hat eine Energie von:

$$E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

Und so weiter. Das bedeutet, dass die Energieniveaus diskret und nicht-entartet sind (nicht von zwei Zuständen geteilt werden). Und das bedeutet wiederum, dass das Energiespektrum aus gleichweit voneinander entfernten Bändern besteht.

Algebraische Hilfsmittel

Sie haben im vorangegangenen Abschnitt einige neue Operatoren und wichtige Kommutatoren dieser Operatoren kennen gelernt, die im Folgenden noch einmal zusammengefasst werden.

✓ **Leiteroperatoren a und $a^\dagger$:** Diese beiden Operatoren machen es einfacher, das Energiespektrum zu berechnen, ohne dass man viel Arbeit für die Auflösung nach den aktuellen Eigenzuständen aufwenden muss. Mit anderen Worten, man kann durch das Betrachten der Energiedifferenz zwischen verschiedenen Eigenzuständen das gesamte Energiespektrum verstehen.

In der Literatur gibt es eine Vielzahl weiterer Begriffe für die Leiteroperatoren. In der deutschen Literatur verwendet man gewöhnlich folgende Bezeichnungen:

- **Erzeugungsoperator $a^\dagger$:** Wie in dem Abschnitt „Einfluss der Leiteroperatoren auf die Eigenzustände des harmonischen Oszillators“ gezeigt wird, erhöht der Erzeugungsoperator das Energieniveau um ein Niveau. Wenn der harmonische Oszillator also im vierten Energieniveau ist, so hebt ihn der Erzeugungsoperator auf das fünfte Niveau an.

- **Vernichtungsoperator a :** Im selben Abschnitt wird auch gezeigt, dass der Vernichtungsoperator das Gegenteil bewirkt, er erniedrigt den Eigenzustand um ein Niveau.

✓ In diesem Buch werden die Begriffe Leiteroperatoren und Erzeugungs-/Vernichtungs-operator gleichberechtigt nebeneinander verwendet.

✓ **Besetzungszahloperator N :** Der Besetzungszahloperator N ist ein hermitescher Operator und hat daher reelle Eigenwerte, die Besetzungszahlen n . Wie im vorangegangenen

Abschnitt gezeigt wurde, lässt sich das Eigenwertproblem $H|\psi_n\rangle = E|\psi_n\rangle$ auf die Eigenwertgleichung des Besetzungszahloperators zurückführen:

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

✓ **Kommutator der Operatoren a und $a^\dagger$:**

$$[a, a^\dagger] = 1$$

✓ **Hamilton-Operator für den harmonischen Oszillator:**

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Aus den beiden vorangegangenen Gleichungen ergeben sich zwei weitere wichtige Vertauschungsrelationen:

$$✓ [a, H] = \hbar \omega a$$

$$✓ [a^\dagger, H] = -\hbar \omega a^\dagger$$

Einfluss der Leiteroperatoren auf die Eigenzustände des harmonischen Oszillators

Nachdem Sie die Energieeigenwerte des quantenmechanischen Oszillators auf sehr elegante Art und Weise bestimmt haben, besteht das Ziel jetzt darin, die Eigenzustände zu berechnen. Bei der Verwendung der algebraischen Methode wird im nächsten Schritt der Einfluss der Leiteroperatoren auf die Eigenzustände des harmonischen Oszillators untersucht.

Die Energie von $a | n \rangle$ berechnen

Zuerst stellt sich die Frage, wie die Energie des Zustands $a|n\rangle$ lautet, wenn die Energie des Zustands $|n\rangle$ gleich E_n ist? Man kann die Energie von $a|n\rangle$ folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} H(a | n \rangle) \\ &= (aH - \hbar\omega a) | n \rangle \\ &= (E_n - \hbar\omega)(a | n \rangle) \end{aligned}$$

Somit ist $a|n\rangle$ also ein Eigenzustand des harmonischen Oszillators mit der Energie $E_n - \hbar\omega$ und nicht mit E_n . Deshalb wird der Operator a Vernichtungs- oder Erniedrigungsoperator genannt: er erniedrigt das Energieniveau eines Eigenzustands eines harmonischen Oszillators um ein Niveau.

Die Energie von $a^\dagger | n \rangle$ berechnen

Wie lautet dann das Energieniveau von $a^\dagger | n \rangle$? Man kann das folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} H(a^\dagger | n \rangle) \\ &= (a^\dagger H + \hbar\omega a^\dagger) | n \rangle \\ &= (E_n + \hbar\omega)(a^\dagger | n \rangle) \end{aligned}$$

Das bedeutet, dass $a^\dagger | n \rangle$ ein Eigenzustand des harmonischen Oszillators mit der Energie $E_n + \hbar\omega$ und nicht mit E_n ist. Das heißt, der Operator $a^\dagger$ erhöht das Energieniveau eines Eigenzustands eines harmonischen Oszillators um ein Niveau. Er wird auch Erhöhungsoperator genannt.

Direkte Verwendung von a und $a^\dagger$

Wenn Sie die letzten Abschnitte vollständig gelesen haben, wissen Sie, dass Folgendes gilt:
 $H(a|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|n\rangle)$ und
 $H(a^\dagger|n\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(a^\dagger|n\rangle)$. Aus diesen beiden Gleichungen kann man Folgendes herleiten:

$$\checkmark a|n\rangle = C|n-1\rangle$$

$$\checkmark a^\dagger|n\rangle = D|n+1\rangle$$

C und D sind positive Konstanten, aber wie lauten sie? Die Zustände $|n-1\rangle$ und $|n+1\rangle$ müssen normiert sein, was bedeutet, dass $\langle n-1|n-1\rangle = \langle n+1|n+1\rangle = 1$. Verwendet man den Operator C, so folgt:

$$(\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) = C^2 \langle n-1|n-1\rangle$$

Da $|n-1\rangle$ normiert ist, ist $\langle n-1|n-1\rangle = 1$:

$$(\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) = C^2$$

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = C^2$$

Aber Sie wissen auch, dass $a^\dagger a = N$ ist, deshalb erhalten Sie die folgende Gleichung:

$$\langle n|N|n\rangle = C^2$$

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \text{ wobei } n \text{ das Energieniveau ist; damit folgt:}$$

$$n\langle n|n\rangle = C^2$$

Da $\langle n|n\rangle = 1$, folgt:

$$n = C^2$$

$$n^{1/2} = C$$

Mit $a |n\rangle = C |n-1\rangle$ folgt daraus:

$$a |n\rangle = n^{1/2} |n-1\rangle$$

Das ist super – nun wissen Sie, wie der Vernichtungsoperator a auf die Eigenzustände des harmonischen Oszillators angewendet wird.

Was ist nun mit dem Erzeugungsoperator $a^\dagger$? Wenn man die selbe Argumentation benutzt wie bei dem Operator a erhält man das folgende Ergebnis:

$$a^\dagger |n\rangle = (n+1)^{1/2} |n+1\rangle$$

Jetzt kennen Sie also die Energieeigenwerte und wissen, wie die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Eigenzustände des harmonischen Oszillators beeinflussen. Sie haben große Fortschritte gemacht, indem Sie die Operatoren a und $a^\dagger$ anwenden, statt zu versuchen, die Schrödinger-Gleichung direkt zu lösen.

Die Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators bestimmen

Bei der Verwendung der Operatoren a und $a^\dagger$ liegt der besondere Reiz darin, dass man bei gegebenem Grundzustand $|0\rangle$ die anderen Energiezustände sukzessiv bestimmen kann. Wenn man die angeregten Zustände eines harmonischen Oszillators berechnen will, kann man vom Grundzustand $|0\rangle$ ausgehen und den Erzeugungsoperator $a^\dagger$ anlegen. Man kann zum Beispiel Folgendes machen:

$$✓ \quad |1\rangle = a^\dagger |0\rangle = |1\rangle$$

$$✓ \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (a^\dagger)^2 |0\rangle$$

$$✓ \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} a^\dagger |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} (a^\dagger)^3 |0\rangle$$

$$✓ \quad |4\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} a^\dagger |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{4!}} (a^\dagger)^4 |0\rangle$$

Und so weiter. Im Allgemeinen haben Sie folgende Beziehung:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

Berechnung der Eigenfunktionen

Okay,
Können Sie einen

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

ist soweit schon ganz gut – aber was ist $|0\rangle$?

räumlichen Eigenzustand zu diesem Eigenvektor angeben? So etwas wie $\psi_0(x)$ und nicht nur $|0\rangle$? Ja, Sie können. Mit anderen Worten, Sie wollen $\langle x|0\rangle = \psi_0(x)$ bestimmen. oder ganz allgemein ausgedrückt, Sie wollen die zu den Eigenzuständen $|n\rangle$ gehörigen Eigenfunktionen $\psi_n(x)$ bestimmen. In diesem Fall müssen Sie die Darstellungsweise ändern und in den Ortsraum zurückkehren. Dazu müssen Sie zunächst die Darstellung der Leiteroperatoren a und $a^\dagger$ im Ortsraum bestimmen.

Arbeiten im Ortsraum

Der Operator p ist folgendermaßen definiert:

$$p = \frac{P}{(\hbar m \omega)^{1/2}}$$

Da $P = -i\hbar \frac{d}{dx}$, kann man auch Folgendes schreiben:

$$p = \frac{-i\hbar}{(\hbar m \omega)^{1/2}} \frac{d}{dx}$$

Wenn man jetzt $x_0 = \left[\hbar / (m \omega \hbar) \right]^{1/2}$ einsetzt, erhält man:

$$p = \frac{-i\hbar}{(\hbar m \omega)^{1/2}} \frac{d}{dx} = -ix_0 \frac{d}{dx}$$

Was ist aber nun mit dem Operator a ? Sie wissen, dass

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (q + ip)$$

und

$$q = X \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} = X/x_0$$

Darum gilt:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{X}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right)$$

Diese Gleichung kann man auch in der folgenden Form schreiben:

$$a = \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \left(X + x_0^2 \frac{d}{dx} \right)$$

So sieht also a in der Ortsdarstellung aus. Und was ist mit $a^\dagger$? Dieser Operator lautet jetzt:

$$a^\dagger = \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \left(X - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)$$

Jetzt ist es mal wieder an der Zeit, clever zu sein. Sie möchten das Problem für $|0\rangle$ im Ortsraum lösen, also $\langle x|0\rangle$. Nun folgt der Trick: Wenn Sie den Vernichtungsoperator a auf $|0\rangle$ anwenden, dann erhalten Sie 0, da es keinen niedrigeren Zustand als den Grundzustand gibt, also ist $a|0\rangle = 0$. Wendet man den Bra-Vektor $\langle x|$ an, so erhält man $\langle x|a|0\rangle = 0$.

Das ist so richtig clever, weil Sie nun eine homogene Differentialgleichung haben (das ist eine, die gleich 0 ist). Zuerst ersetzen Sie a :

$$\langle x|a|0\rangle = 0$$

$$\frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \langle x| \left(X + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) |0\rangle = 0$$

Dann benutzen Sie $\langle x|0\rangle = \psi_0(x)$:

$$\frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \left(X + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

$$\frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \left(x \psi_0(x) + x_0^2 \frac{d\psi_0(x)}{dx} \right) = 0$$

Multipliziert man beide Seiten mit $x_0 \sqrt{2}$, so erhält man:

$$x \psi_0(x) + x_0^2 \frac{d\psi_0(x)}{dx} = 0$$

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} = \frac{-x \psi_0(x)}{x_0^2}$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung lautet:

$$\psi_0(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Das ist eine Gauss-Funktion; der Grundzustand eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators entspricht also einer Gauss-Kurve, wie sie in Abbildung 5.1 dargestellt ist.

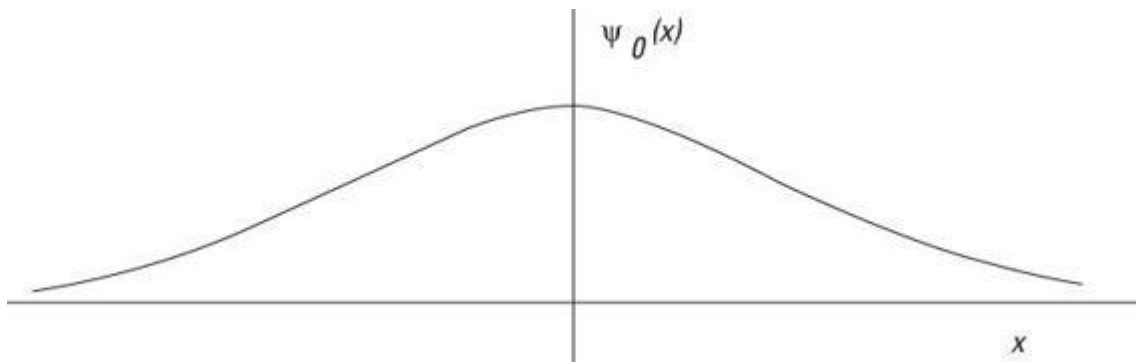


Abbildung 5.1: Der Grundzustand eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Die Wellenfunktion des Grundzustands bestimmen

Der Grundzustand des quantenmechanischen Oszillators ist $\psi_0(x) = A \exp(-x^2/2x_0^2)$ und beschreibt eine Gauss-Kurve. Aber wie kann man A bestimmen? Wellenfunktionen müssen normalisiert sein, daher muss die folgende Gleichung gelten:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx$$

Man setzt $\psi_0(x)$ ein und erhält folgende Gleichung:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| A \exp\left(-x^2/2x_0^2\right) \right|^2 dx_0$$

$$1 = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-x^2/2x_0^2\right)^2 dx_0$$

Berechnung oder Nachschlagen des Integrals ergibt:

$$1 = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-x^2/2x_0^2\right)^2 dx_0 = A^2 \pi^{1/2} x_0$$

Somit ergibt sich folgendes:

$$1 = A^2 \pi^{1/2} x_0$$

$$A = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}}$$

Also lautet die Wellenfunktion für den Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} \exp\left(-x^2/2x_0^2\right)$$

Puuh, jetzt haben Sie also eine exakte Wellenfunktion.

Eine kleine Aufregung: Den ersten angeregten Zustand bestimmen

Okay, der vorangegangene Abschnitt hat Ihnen gezeigt, wie $\psi_0(x)$ aussieht, aber was ist mit dem ersten angeregten Zustand $\psi_1(x)$? Wie Sie wissen, ist $\psi_1(x) = \langle x|1\rangle$ und $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$, also gilt:

$$\psi_1(x) = \langle x|a^\dagger|0\rangle$$

Und Sie wissen, dass für $a^\dagger$ folgendes gilt:

$$a^\dagger = \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)$$

Daher folgt für $\psi_1(x) = \langle x|a^\dagger|0\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle x|a^\dagger|0\rangle &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\langle x\left|X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right|0\rangle \\ &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle \\ &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle\end{aligned}$$

Da $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$, erhält man folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(X - x_0^2 \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) \\ &= \frac{1}{x_0\sqrt{2}}\left(x - x_0^2 \frac{(-x)}{x_0^2}\right)\psi_0(x) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{x_0}x\psi_0(x)\end{aligned}$$

Man weiß außerdem Folgendes:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{x_0} x \psi_0(x)$$

Somit folgt für die Gleichung

:

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} x \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Wie sieht $\psi_1(x)$ nun aus? Abbildung 5.2 zeigt eine Darstellung der Funktion. Man beachte, dass sie einen *Knoten* hat (Durchgang durch die x-Achse).

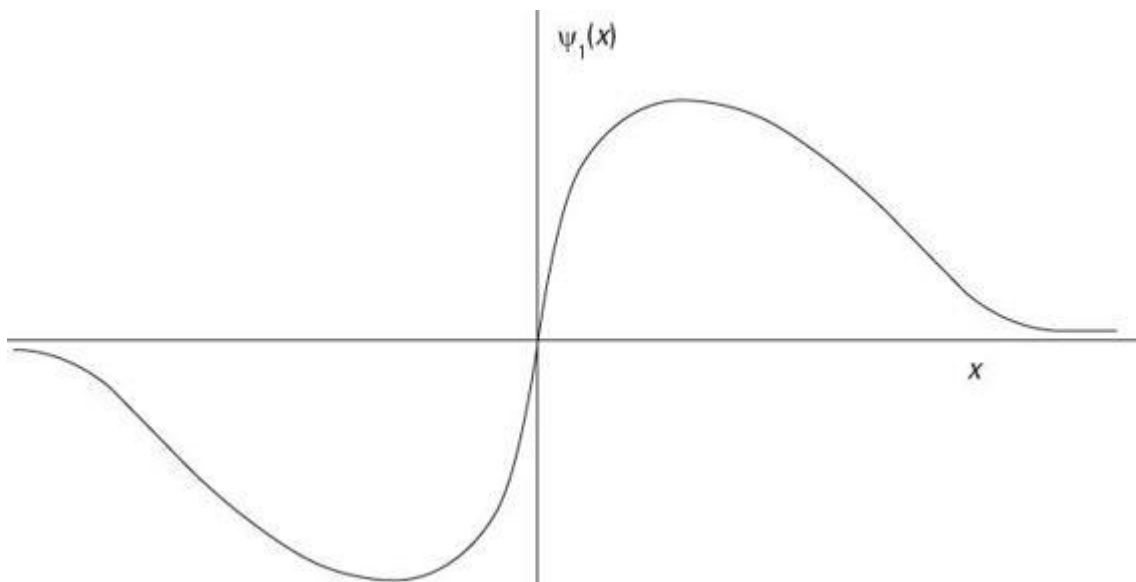


Abbildung 5.2: Der erste angeregte Zustand eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Den zweiten angeregten Zustand bestimmen

So weit, so gut. Aber wie findet man die anderen angeregten Zustände, wie $\psi_2(x)$? Man kann $\psi_2(x)$ anhand folgender Gleichung bestimmen:

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle x | (a^\dagger)^2 | 0 \rangle$$

Setzt man $a^\dagger$ ein, so erhält man:

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \frac{1}{2!x_0^2} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^2 \psi_0(x)$$

Demzufolge lässt sich die Wellenfunktion $\psi_n(x)$, die den n-ten angeregten Zustand beschreibt, ganz allgemein durch folgende Gleichung berechnen:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^\dagger)^n | 0 \rangle$$

Diesem Ergebnis entspricht die Darstellung im Rahmen der Wellenmechanik:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0(x)$$

Darstellung der Wellenfunktion anhand der Hermite'schen Polynome

Man kann aber auch die Differentialgleichung für $\psi_n(x)$ in der folgenden allgemeingültigen Form schreiben:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} (2^n n!)^{1/2}} \frac{1}{x_0^{n+1/2}} \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n \exp\left(-x^2 / 2x_0^2 \right)$$

Keine Bange, Sie müssen diese Differentialgleichung jetzt nicht selber lösen! Das haben schon einige Leute vor Ihnen erledigt, die sich mit der Theorie der Differentialgleichungen so richtig gut auskennen. Sie müssen an dieser Stelle nur wissen, dass folgende Gleichung gültig ist:

$$\left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n \exp\left(-x^2 / 2x_0^2 \right) = \exp\left(-x^2 / 2x_0^2 \right) H_n\left(x / x_0 \right)$$

Die in dieser Gleichung auftretenden Polynome H_n werden *Hermite'sche Polynome* genannt. Sie sind aus der Mathematik als Lösung linearer Differentialgleichungen zweiter Ordnung bekannt und werden im folgenden definiert. Sie spielen bei der Beschreibung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators eine wichtige Rolle, da sie eine deutlich einfachere und übersichtliche Darstellung der Wellenfunktion erlauben.

Die Definition der Hermite'schen Polynome lautet wie folgt:

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2)$$

Die Definition sieht zwar etwas unübersichtlich aus, doch wenn Sie Zahlen für n einsetzen, werden Sie sehr schnell bemerken, dass die Polynome eigentlich »harmlos« sind. Die ersten sechs Hermite'schen Polynome lauten folgendermaßen:

✓ $H_0(x) = 1$

✓ $H_1(x) = 2x$

✓ $H_2(x) = 4x^2 - 2$

✓ $H_3(x) = 8x^3 - 12x$

✓ $H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$

✓ $H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$

Die hier eingeführten Hermite'schen Polynome ermöglichen jetzt folgende übersichtliche Darstellung der Wellenfunktionen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} (2^n n! x_0)^{1/2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

wobei $x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$ gilt.

So sehen also die Wellenfunktionen für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator aus.

Abbildung 5.3 zeigt den Verlauf von $\psi_2(x)$; man beachte, dass hier zwei Knoten auftreten. Ganz allgemein hat die Wellenfunktion $\psi_n(x)$ für den harmonischen Oszillator n Knoten.

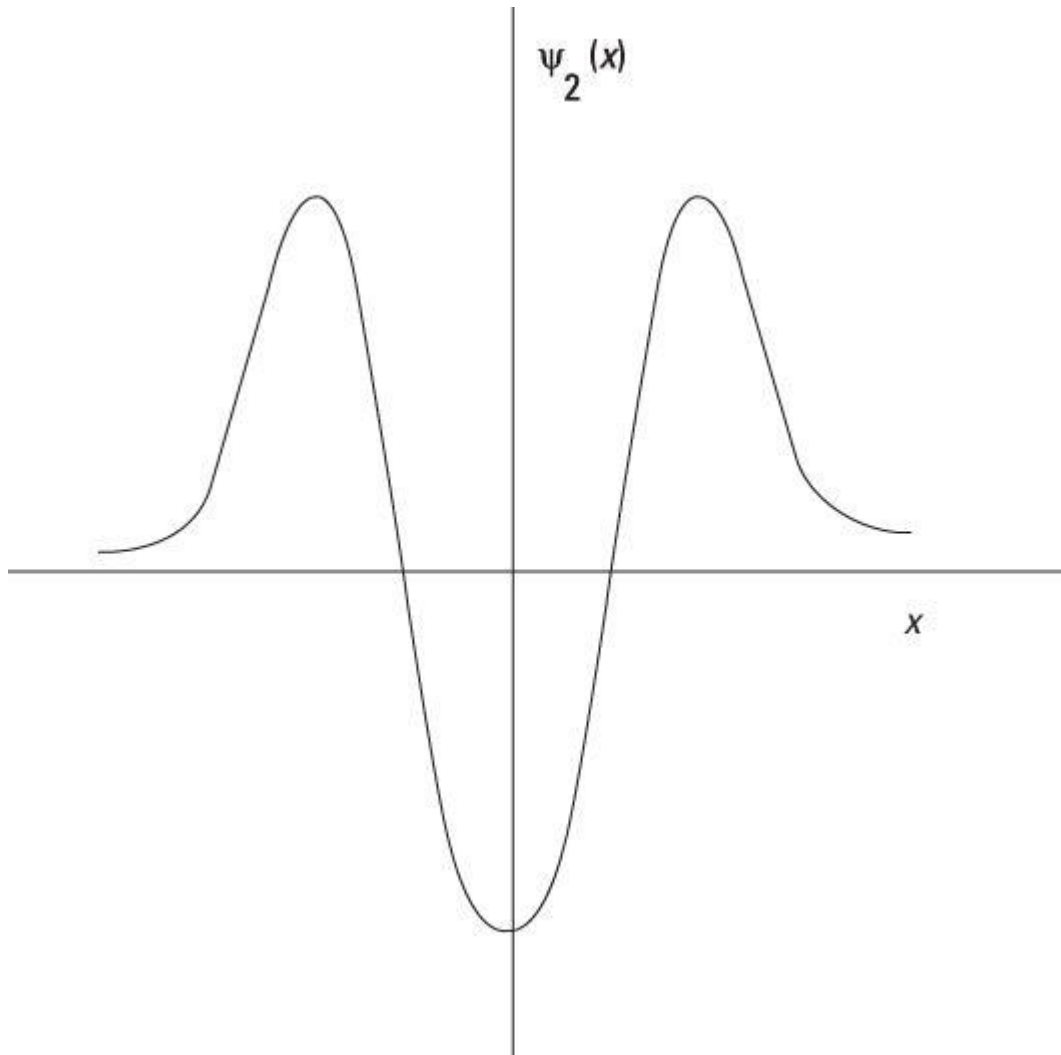


Abbildung 5.3: Der zweite angeregte Zustand eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Ein paar Zahlen einsetzen

Im vorangegangenen Abschnitt wurde $\psi_n(x)$ hergeleitet, und Sie haben bereits E_n berechnet – Sie sind also bestens mit dem harmonischen Oszillator vertraut. Dann betrachten Sie einmal das folgende Beispiel.

Stellen Sie sich vor, Sie haben ein Proton, das mit $\omega = 4,58 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$ eine harmonische Schwingung ausführt, wie in Abbildung 5.4 dargestellt.

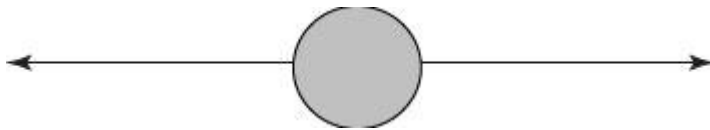


Abbildung 5.4: Ein Proton in harmonischer Oszillation

Wie groß sind die Energien der Energieniveaus des Protons? Sie kennen die allgemeine Lösung:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Das Proton hat folgende Energien, angegeben in Megaelektronenvolt (MeV):

$$\checkmark E_0 = \frac{\hbar \omega}{2} = 1,50 \text{ MeV}$$

$$\checkmark E_1 = \frac{3\hbar \omega}{2} = 4,50 \text{ MeV}$$

$$\checkmark E_2 = \frac{5\hbar \omega}{2} = 7,50 \text{ MeV}$$

$$\checkmark E_3 = \frac{7\hbar \omega}{2} = 10,50 \text{ MeV}$$

Und so weiter.

Aber was ist mit den Wellenfunktionen?. Die allgemeine Form von $\psi_n(x)$ ist:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} (2^n n! x_0)^{1/2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

wobei $x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$. Also ist $x_0 = 3,71 \times 10^{-15}$ m.

Wenn man alle Längenangaben in Femtometer umrechnet ($1 \text{ fm} = 1 \times 10^{-15} \text{ m}$), erhält man $x_0 = 3,71 \text{ fm}$. Wenn x in Femtometern angegeben wird, so erhält man für die Wellenfunktion $\psi_0(x)$:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{1,92\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{27,5}\right)$$

Die nächsten beiden Wellenfunktionen lauten:

$$\checkmark \quad \psi_1(x) = \frac{1}{2,72\pi^{1/4}} 2\left(\frac{x}{3,71}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{27,5}\right)$$

$$\checkmark \quad \psi_2(x) = \frac{1}{5,45\pi^{1/4}} \left[4\left(\frac{x}{3,71}\right)^2 - 2 \right] \exp\left(-\frac{x^2}{27,5}\right)$$

Die Operatoren des harmonischen Oszillators als Matrizen

Da die Energiezustände des harmonischen Oszillators regelmäßige Abstände aufweisen, wird in diesem Fall auch gelegentlich die Matrix-Darstellung verwendet, die alles manchmal einfacher macht. Der Eigenvektor des Grundzustands kann dann zum Beispiel das folgende Aussehen haben (man beachte, dass es sich um einen unendlichen Vektor handelt):

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Und der erste angeregte Zustand mag wie folgt aussehen:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Und so weiter. Der Besetzungszahloperator, der die Energieniveaus liefert, würde dann wie folgt aussehen:

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Somit liefert $N|2\rangle$:

$$N|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Das ist gleich:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Mit anderen Worten: $N|2\rangle = 2|2\rangle$.

Was ist mit dem (Vernichtungs-)Operator a ? Dieser hat folgende Gestalt:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Wie lautet $a|1\rangle$ in dieser Darstellung? Allgemein gilt $a|n\rangle = n^{1/2} |n-1\rangle$, also sollte $a|1\rangle$ gleich $|0\rangle$ sein. Also überprüfen Sie es:

$$a|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Die Ausführung der Matrizenmultiplikation ergibt:

$$a|1\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{1} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Mit anderen Worten: $a|1\rangle = |0\rangle$, genau wie erwartet.

Und was ist mit dem (Erzeugungs-)Operator $a^\dagger$? Im Allgemeinen wirkt er folgendermaßen: $a^\dagger|n\rangle = (n+1)^{1/2}|n+1\rangle$. In der Matrix-Darstellung hat $a^\dagger$ das folgende Aussehen:

$$a^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Man erwartet zum Beispiel, dass $a^{\dagger} |1\rangle = \sqrt{2} |1\rangle$ ergibt. Ist das so?

$$a^{\dagger} |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Die Durchführung der Multiplikation ergibt:

$$a^+|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Folglich ist $a^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle$, „genau wie erwartet.“

Und was ist mit dem Hamilton-Operator $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, der die Energie eines Eigenzustands liefert? In der Matrix-Darstellung hat er die folgende Form:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Wenn Sie also die Matrix-Darstellung bevorzugen, so haben Sie hier gesehen, auf welche Weise sie beim harmonischen Oszillator angewendet wird.

Der klassische und der quantenmechanische harmonische Oszillator

Nachdem Sie die Eigenwerte, die Eigenzustände und die Eigenfunktionen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators berechnet haben, lohnt es sich an dieser Stelle, einen Vergleich zum klassischen harmonischen Oszillator zu ziehen.

In dem Abschnitt »Berechnung des Energiespektrums« haben Sie zunächst die Energieeigenwerte des quantenmechanischen harmonischen Oszillators bestimmt. Sie lauten:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Dieses Ergebnis ist von grundlegender Bedeutung, da es besagt, dass der quantenmechanische harmonische Oszillator nicht beliebige Energiewerte annehmen kann, sondern nur bestimmte. Alle Anregungsenergien liegen äquidistant zum Grundzustand mit dem Abstand $\hbar \omega$. Wenn Sie nun den Grundzustand $n = 0$ betrachten, erkennen Sie, dass die niedrigste Energie, die der quantenmechanische harmonische Oszillator annehmen kann, $\hbar \omega / 2$ beträgt. Das heißt, er besitzt auch noch am Nullpunkt eine endliche, von null verschiedene Energie E_0 . Diese wird im Allgemeinen als *Nullpunktsenergie* oder Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators bezeichnet. Dieses Ergebnis unterscheidet sich somit deutlich von der klassischen Physik, in der die niedrigste Energie $E = 0$ ist.

Eine Folge der endlichen Nullpunktsenergie besteht darin, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $n = 0$ eine nichtverschwindende Breite besitzt. Das heißt, ein Teilchen lässt sich nicht exakt bei $x = 0$ lokalisieren, dem Minimum des Potentials, wie man es von der klassischen Physik kennt; vielmehr besitzt sein Aufenthaltsort eine endliche zugehörige Ortsunschärfe. Diesen für die Quantentheorie charakteristischen Sachverhalt, der in Abbildung 5.5 dargestellt ist, bezeichnet man auch als *Nullpunktsschwankung*.

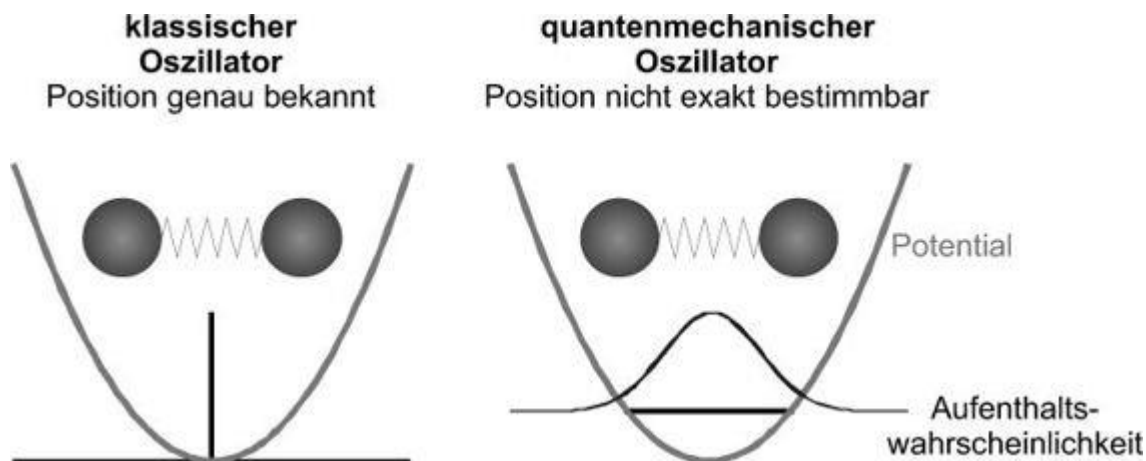


Abbildung 5.5: Vergleich von klassischem und quantenmechanischem harmonischen

Oszillator

Betrachtet man nun die Wellenfunktion für hohe angeregte Zustände n , so erkennt man, dass die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$ in die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit übergeht. Abbildung 5.6 zeigt eine Darstellung der klassischen und der quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei der Koordinate x . Je größer n wird, desto ähnlicher werden sich die Kurven.

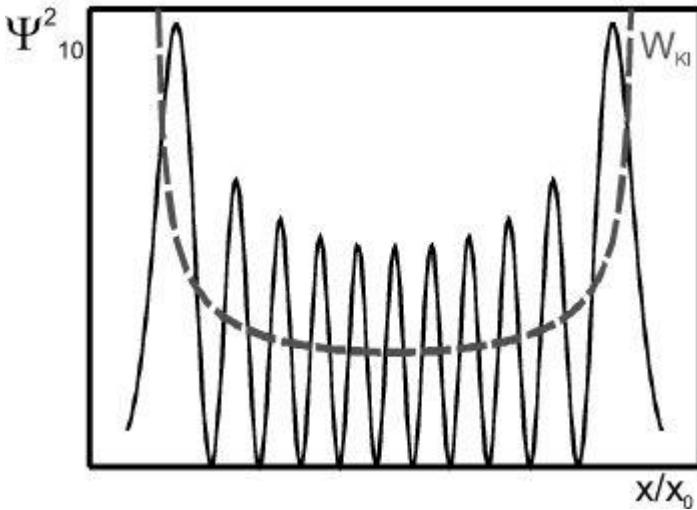


Abbildung 5.6: Vergleich der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten von klassischem und quantenmechanischem harmonischen Oszillator

Das Wichtigste von Kapitel 5 noch einmal in Kürze

Der quantenmechanische harmonische Oszillator stellt für die gesamte Quantenphysik ein außerordentlich wichtiges Modellsystem dar. Wie Sie in diesem Kapitel gesehen haben, lässt er sich ohne Näherungen und numerische Methoden mit einer rein algebraischen Methode vollständig lösen. Demzufolge ermöglicht er die Beschreibung einer Vielzahl physikalischer Systeme und Sachverhalte und ist für viele Teilgebiete der modernen Physik als Modell unverzichtbar.

Wie bei jedem anderen quantenmechanischen Problem muss man auch beim harmonischen Oszillator zunächst die Schrödinger-Gleichung aufstellen und dann zu lösen versuchen. Bevor man allerdings anfängt zu rechnen, sollte man sich – und das gilt natürlich für alle anderen Aufgaben auch – das Problem und seine Besonderheiten bewusst machen. Beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator besteht folgendes Problem: das Potential ist parabolisch. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung allein mithilfe der Funktionentheorie könnte daher kompliziert werden. In solchen Fällen ist es sinnvoll nach anderen Lösungswegen zu suchen.



An dieser Stelle eine kleine Erinnerung: Sie sollen die Quantenmechanik nicht neu erfinden, sondern Sie sollen nachvollziehen können, *warum* man welches Problem *auf eine bestimmte Art und Weise* löst und dann mit dem Lösungsweg sicher umgehen können. Darüber hinaus sollen Sie verstehen, was das Ergebnis physikalisch bedeutet – Sie betreiben Quantenphysik, nicht Quantenmathematik, auch wenn erstere sehr von der Mathematik geprägt ist.

Im Fall des harmonischen Oszillators liefert eine algebraische Methode einen sehr eleganten Lösungsweg: Nach Umformung des Hamilton-Operators anhand von Leiteroperatoren können Sie die Energieeigenwerte sofort bestimmen.

Das nächste Ziel ist die Bestimmung der Eigenzustände. Diese bestimmt man jedoch nicht direkt, sondern man untersucht zunächst den Einfluss der Leiteroperatoren auf die Eigenzustände. Dabei erkennen Sie, dass die Operatoren a bzw. $a^\dagger$ den Energieeigenwert um $\hbar \omega$ erhöhen bzw. erniedrigen und daher Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator oder auch Leiteroperatoren genannt werden.

Um die Wellenfunktion der verschiedenen Zustände zu bestimmen, betrachtet man anschließend wieder den Ortsraum. Mithilfe der Darstellung der Leiteroperatoren im Ortsraum erhält man jetzt eine Differentialgleichung, die sich einfach lösen lässt. Die Normierung dieser Funktion führt zur exakten Wellenfunktion für den Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators.

Die Bestimmung der Wellenfunktionen der ersten angeregten Zustände führt auf die Hermite-Polynome und so auf die allgemeine Lösung der Wellenfunktionen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators.

Teil III

Alles dreht sich um Drehimpulse und Spin

In diesem Teil ...

Thema dieses Teils ist alles, was sich dreht und rotiert. Die Quantenphysik hat dazu eine ganze Menge zu sagen, unter anderem, wie Drehimpuls und Spin quantisiert sind. Alles Wichtige dazu finden Sie in diesem Teil.

Arbeiten mit dem Drehimpuls auf Quantenniveau

In diesem Kapitel ...

- ▶ Drehimpuls
- ▶ Drehimpuls und Hamilton-Operator
- ▶ Matrix-Darstellung des Drehimpulses
- ▶ Eigenfunktionen des Drehimpulses

Sie kennen den Drehimpuls aus der klassischen Physik, wo er eine ähnlich wichtige Rolle wie die Energie oder der Impuls spielt. Darüber hinaus ist er wie diese eine Erhaltungsgröße.

Natürlich haben Sie Recht, wenn Sie jetzt vermuten, dass der Drehimpuls auch in der Quantenphysik eine zentrale Stellung einnimmt. Der *Drehimpulsoperator* ist sowohl in der Atom- und Molekülphysik als auch bei der Behandlung anderer quantenmechanischer Probleme mit Rotationssymmetrie eine grundlegende Größe. Wie sich in diesem Kapitel zeigen wird, ist der Drehimpuls eine quantisierte Größe, die nur ganz- oder halbzahlige Vielfache des Planckschen Wirkungsquantums annehmen kann. Neben dem Bahndrehimpulsoperator L , der das quantenmechanische Analogon zum klassischen Drehimpuls ist, gibt es noch den Spinoperator S , der ebenfalls ein Drehimpulsoperator ist, aber kein klassisches Gegenstück besitzt. Der Spinoperator wird in Kapitel 7 behandelt.

Dieses Kapitel besteht aus zwei Teilen. Die Ergebnisse, die im ersten Teil hergeleitet werden, beruhen nur auf den algebraischen Eigenschaften des Drehimpulses (wie den Vertauschungsrelationen, die in den folgenden Abschnitten hergeleitet werden). Das hat den großen Vorteil, dass sie somit nicht nur für den Bahndrehimpuls, sondern für jeden Drehimpuls (wie den Spin oder den Gesamtdrehimpuls) gelten. Nachdem Sie im vorangegangenen Kapitel die Erfahrung gemacht haben, dass sich das Energiespektrum des harmonischen Oszillators einfach und elegant mithilfe von Leiteroperatoren herleiten lässt, wird dieser Ansatz in diesem Kapitel weiter verfolgt. Das bedeutet, dass man in diesem Fall den *Erzeugungsoperator* L_+ und den *Vernichtungsoperator* L_- definiert und mit ihrer Hilfe die Eigenzustände des Drehimpulses berechnet.

Der zweite Teil dieses Kapitels geht dann über die allgemeinen Überlegungen hinaus; dort werden die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses direkt berechnet. Da der Drehimpuls eng mit Rotationen verknüpft ist, ist es an dieser Stelle von großem Vorteil, zu Kugelkoordinaten überzugehen. Im Anschluss daran zeigt sich, dass die weitere Behandlung erneut große Ähnlichkeit mit der des harmonischen Oszillators aufweist. Sie erhalten eine

Differentialgleichung, deren Lösungen dementsprechend ebenfalls bekannte Funktionen der mathematischen Physik sind.

Mit dem Drehimpuls im Kreis herum

Werfen Sie einen Blick auf Abbildung 6.1, die eine sich im dreidimensionalen Raum drehende Scheibe zeigt. Da Sie im 3D-Raum rechnen, müssen Sie mit Vektoren arbeiten, die sowohl Betrag als auch Richtung angeben.

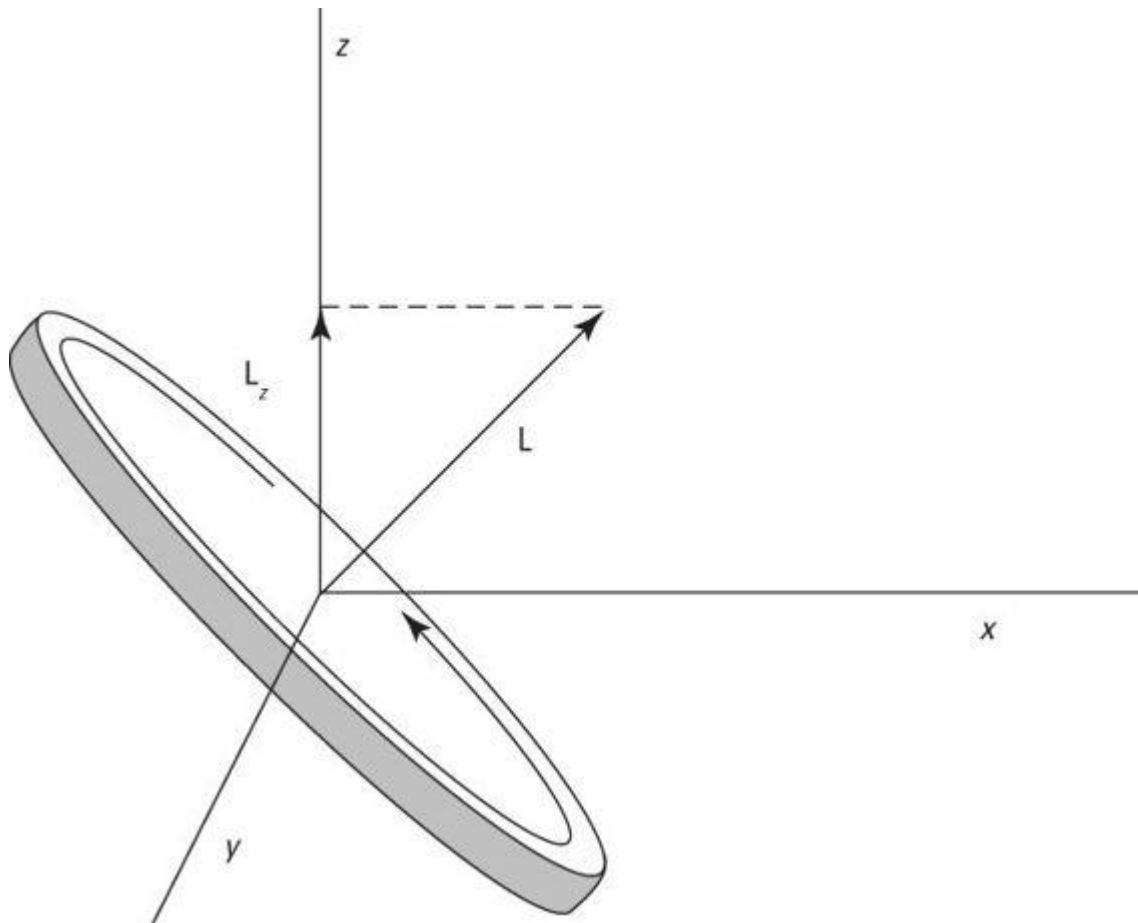


Abbildung 6.1: Eine sich drehende Scheibe mit dem Drehimpulsvektor L

Wie man erkennt, steht der Drehimpulsvektor L der Scheibe senkrecht zur Ebene der Drehung. Man kann hier die Rechte-Hand-Regel anwenden: Wenn Sie mit den Fingern Ihrer rechten Hand die Drehung nachahmen, dann zeigt der Daumen Ihrer rechten Hand in die Richtung des Drehimpulsvektors L .

Wenn der Vektor L aus der Ebene der Drehung herauszeigt, so hat das einige Vorteile. Wenn beispielsweise etwas mit konstanter Winkelgeschwindigkeit rotiert, so bleibt der Drehimpulsvektor L in Betrag und Richtung konstant. Das ist sinnvoller, als wenn der Vektor in der Ebene der Drehbewegung der Scheibe rotiert und dabei ständig seine Richtung ändert.

Da L ein dreidimensionaler Vektor ist, kann er in jede Richtung zeigen, was bedeutet,

dass er x-, y- und z-Komponenten hat: L_x , L_y und L_z (die keine Vektoren, sondern nur Beträge sind). Abbildung 6.1 zeigt L_z .

$\mathbf{L}$ ist das Vektorprodukt aus $\mathbf{R}$ (Ort) und $\mathbf{P}$ (**Impuls**): ($\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$). Man kann zu jedem gegebenen Zeitpunkt L_x , L_y und L_z mithilfe von Operatoren auch wie folgt angeben:

$$✓ \quad L_x = YP_z - ZP_y$$

$$✓ \quad L_y = ZP_x - XP_z$$

$$✓ \quad L_z = XP_y - YP_x$$

Dabei sind P_x , P_y und P_z die Impulsoperatoren (die den Impuls in x-, y- und z-Richtung angeben) und X , Y und Z die Ortsoperatoren (die den Ort in x-, y- und z-Richtung angeben).

Man kann die Impulsoperatoren P_x , P_y und P_z auch wie folgt ausdrücken:

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$$

$$P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

Setzt man diese Operatoren in die Gleichungen für L_x , L_y und L_z ein, so kann man sie wie folgt schreiben:

$$✓ \quad L_x = -i\hbar \left(Y \frac{\partial}{\partial z} - Z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$✓ \quad L_y = -i\hbar \left(Z \frac{\partial}{\partial x} - X \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$✓ \quad L_z = -i\hbar \left(X \frac{\partial}{\partial y} - Y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Die Kommutatoren von L_x , L_y und L_z bestimmen

Als Erstes soll überprüft werden, ob diese Operatoren kommutieren. Wenn sie kommutieren (beispielsweise wenn $[L_x, L_y] = 0$), dann kann man zwei beliebige von ihnen (zum Beispiel L_x und L_y) genau messen. Wenn nicht, dann unterliegen sie der *Unschärferelation*, und man kann sie nicht gleichzeitig genau messen.

Okay, wie lautet also der Kommutator von L_x und L_y ? Verwendet man $L_x = YP_z - ZP_y$ und $L_y = ZP_x - XP_z$, so kann man Folgendes schreiben:

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z]$$

Diese Gleichung kann man folgendermaßen umformen:

$$[L_x, L_y] = [YP_z, ZP_x] - [YP_z, XP_z] - [ZP_y, ZP_x] + [ZP_y, XP_z]$$

$$[L_x, L_y] = Y[P_z, ZP_x]P_x + X[ZP_y, P_z]P_y$$

$$[L_x, L_y] = i \hbar (XP_y - YP_x)$$

Aber $XP_y - YP_x = L_z$, somit folgt $[L_x, L_y] = i \hbar L_z$. L_x und L_y kommutieren also nicht, was bedeutet, dass man sie nicht gleichzeitig präzise messen kann. Man kann auf die gleiche Weise zeigen, dass $[L_y, L_z] = i \hbar L_x$ und $[L_z, L_x] = i \hbar L_y$.



Da die Komponenten des Drehimpulses nicht miteinander kommutieren, kann man niemals auch nur zwei von ihnen mit absoluter Genauigkeit gleichzeitig messen. Mist!

Das bedeutet also, dass die Operatoren L_x , L_y und L_z keine gemeinsamen Eigenzustände haben. Was kann man also machen? Wie kann man einen Operator finden, der die gleichen Eigenzustände wie die verschiedenen Komponenten des Drehimpulsoperators hat, sodass man die Eigenzustände als $|l, m\rangle$ schreiben kann?

Hier benutzt man gewöhnlich den Trick, dass das Quadrat des Drehimpulses L^2 ein Skalar und kein Vektor ist, sodass er mit den Operatoren L_x , L_y und L_z kommutiert:

✓ $[L^2, L_x] = 0$

✓ $[L^2, L_y] = 0$

✓ $[L^2, L_z] = 0$

Okay, Sie machen also Fortschritte. Weil L_x , L_y und L_z nicht miteinander kommutieren, können sie auch keine gemeinsamen Eigenzustände haben. Weil aber L^2 mit ihnen kommutiert, können L^2 und jeweils eine der drei Komponenten gemeinsame Eigenwerte besitzen. Gewöhnlich

wählt man L_z , um die Eigenwerte der gemeinsamen Eigenfunktionen mit L^2 zu bestimmen.

Die Eigenzustände des Drehimpulses bestimmen

Jetzt ist es an der Zeit, die Eigenzustände $|l, m\rangle$ des Drehimpulses zu bestimmen. Wenn Sie die Eigenzustände haben, kennen Sie auch die Eigenwerte, und wenn Sie die Eigenwerte kennen, können Sie die Hamilton-Funktion lösen und erhalten die erlaubten Energieniveaus eines Körpers mit Drehimpuls.



Machen Sie nicht die Annahme, dass $|l, m\rangle$ die Eigenzustände sind, nehmen Sie stattdessen $|\alpha, \beta\rangle$, wobei der Eigenwert von L^2 dann $L^2 |\alpha, \beta\rangle = \hbar^2 \alpha |\alpha, \beta\rangle$ lautet. Der Eigenwert von L^2 ist somit $\hbar^2 \alpha$, was Sie nun für α lösen müssen. Analog ergibt sich der Eigenwert von L_z : $L_z |\alpha, \beta\rangle = \hbar \beta |\alpha, \beta\rangle$.

Um weiter voranzukommen, müssen Sie nun Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einführen (genau wie in Kapitel 4 beim harmonischen Oszillator). Auf diese Weise können Sie beispielsweise das Problem für den Grundzustand lösen, indem Sie den Vernichtungsoperator an den Grundzustand anlegen und das Ergebnis gleich null setzen – und dann lösen Sie es für den Grundzustand selbst.

In diesem Fall ist der Erzeugungsoperator L_+ und der Vernichtungsoperator L_- . Diese Operatoren erhöhen und erniedrigen die Quantenzahl von L_z . Analog zu Kapitel 4 kann man die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wie folgt definieren:

✓ **Erzeugen:** $L_+ = L_x + iL_y$

✓ **Vernichten:** $L_- = L_x - iL_y$

Diese beiden Gleichungen bedeuten:

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

$$L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

Ebenfalls gilt:

$$L_+ L_- = L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$$

Das bedeutet, dass folgende Ausdrücke L^2 entsprechen:

$$✓ L^2 = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z$$

$$✓ L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$$

$$✓ L^2 = \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+) + L_z^2$$

Darüber hinaus gelten folgende Gleichungen:

$$✓ [L^2, L_{\pm}] = 0$$

$$✓ [L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$

$$✓ [L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

Okay, mit all diesen Gleichungen können Sie nun arbeiten; jetzt folgt der interessante Teil. Betrachten Sie zunächst die Wirkung von L_+ auf $|\alpha, \beta\rangle$:

$$L_+ |\alpha, \beta\rangle = ?$$

Um zu sehen, was $L_+ |\alpha, \beta\rangle$ ergibt, wendet man den Operator L_z auf diese Gleichung an:

$$L_z L_+ |\alpha, \beta\rangle = ?$$

Aus $[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$ folgt, dass $L_z L_+ - L_+ L_z = \hbar L_+$; somit ergibt sich:

$$L_z L_+ |\alpha, \beta\rangle = L_+ L_z |\alpha, \beta\rangle + \hbar L_+ |\alpha, \beta\rangle$$

Und weil $L_z |\alpha, \beta\rangle = \hbar \beta |\alpha, \beta\rangle$ ist, erhält man folgende Gleichung:

$$L_z L_+ |\alpha, \beta\rangle = \hbar(\beta + 1) L_+ |\alpha, \beta\rangle$$

Diese Gleichung besagt, dass der Eigenzustand $L_+ |\alpha, \beta\rangle$ auch ein Eigenzustand

des Operators L_z mit dem Eigenwert $(\beta + 1)$ ist. Oder verständlicher ausgedrückt:

$$L_+ |\alpha, \beta\rangle = c |\alpha, \beta + 1\rangle$$

Dabei ist c eine Konstante, die später in dem Abschnitt »Die Eigenwerte der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bestimmen« berechnet wird.

Der Operator L_+ erhöht die Quantenzahl β um 1. Der Vernichtungsoperator bewirkt dementsprechend das folgende:

$$L_- |\alpha, \beta\rangle = c |\alpha, \beta - 1\rangle$$

Nun betrachten Sie, was $L^2 L_+ |\alpha, \beta\rangle$ ergibt:

$$L^2 L_+ |\alpha, \beta\rangle = ?$$

Da L^2 ein Skalar ist, kommutiert er mit allen Operatoren. Da $L^2 L_+ - L_+ L^2 = 0$ ist, gilt folgendes:

$$L^2 L_+ |\alpha, \beta\rangle = L_+ L^2 |\alpha, \beta\rangle$$

Und weil $L^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha \hbar^2 |\alpha, \beta\rangle$ ist, gilt die folgende Gleichung:

$$L^2 L_+ |\alpha, \beta\rangle = \alpha \hbar^2 L_+ |\alpha, \beta\rangle$$

Der Vernichtungsoperator bewirkt dementsprechend das folgende:

$$L^2 L_- |\alpha, \beta\rangle = \alpha \hbar^2 L_- |\alpha, \beta\rangle$$

Diese Gleichungen besagen also, dass die Operatoren $L_{\pm}$ den Eigenwert von $|\alpha, \beta\rangle$ nicht verändern.

Okay, aber was sind α und β ? Lesen Sie weiter!

Die Eigenwerte des Drehimpulses bestimmen

Die Eigenzustände des Drehimpulses sind die möglichen Werte, die der Drehimpuls annehmen kann; diese müssen also bestimmt werden. Verfolgen Sie nun weiter, wie das gemacht wird.

Zustandsgleichungen mit $\beta_{\max}$ und $\beta_{\min}$ herleiten

Man beachte, dass $L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2$ ist, was eine positive Zahl ist, sodass $L^2 - L_z^2 \geq 0$. Daraus folgt:

$$\langle \alpha, \beta | L^2 - L_z^2 | \alpha, \beta \rangle \geq 0$$

Verwendet man $L^2 | \alpha, \beta \rangle = \alpha \hbar^2$ und $L_z^2 | \alpha, \beta \rangle = \beta^2 \hbar^2$, so erhält man:

$$\langle \alpha, \beta | L^2 - L_z^2 | \alpha, \beta \rangle = \hbar^2 (\alpha - \beta^2) \geq 0$$

Deshalb ist $\alpha \geq \beta^2$. Es gibt also einen größten möglichen Wert von β , den man $\beta_{\max}$ nennen kann.

An dieser Stelle kann man schlau sein, da es einen Zustand $|\alpha, \beta$ nicht weiter erhöhen kann. Man erhält deshalb null, wenn man den Erzeugungsoperator anwendet:

$$L_+ | \alpha, \beta_{\max} \rangle = 0$$

Wendet man darauf den Vernichtungsoperator an, so erhält man ebenfalls null:

$$L_- L_+ | \alpha, \beta_{\max} \rangle = 0$$

Und weil $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$ gilt, kann man die Gleichung auch wie folgt schreiben:

$$(L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) | \alpha, \beta_{\max} \rangle = 0$$

Setzt man $L^2 | \alpha, \beta_{\max} \rangle = \alpha \hbar^2$ und $L_z^2 | \alpha, \beta_{\max} \rangle = \beta_{\max}^2 \hbar^2$ ein, so erhält man:

$$(\alpha - \beta_{\max}^2 - \beta_{\max}) \hbar^2 = 0$$

$$\alpha = \beta_{\max} (\beta_{\max} + 1) = 0$$

Super, jetzt wissen Sie, was α ist. An diesem Punkt ist es üblich $\beta_{\max}$ in l und β in m umzubenennen, sodass $|\alpha, \beta\rangle$ in $|l, m\rangle$ übergeht und:

$$\checkmark \quad L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle$$

$$\checkmark \quad L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$$

Aber Sie können noch mehr sagen. Neben $\beta_{\max}$ muss es auch ein $\beta_{\min}$ geben, sodass man null erhält, wenn man den Vernichtungsoperator L_- anwendet, da man nicht unter den Wert $\beta_{\min}$ gehen kann:

$$L_- |\alpha, \beta_{\min}\rangle = 0$$

Und man kann darauf den Erzeugungsoperator L_+ anwenden:

$$L_+ L_- |\alpha, \beta_{\min}\rangle = 0$$

Da $L_+ L_- = \dots L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$ gilt, folgt:

$$(L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) |\alpha, \beta_{\min}\rangle = 0$$

Somit ergibt sich Folgendes:

$$(\alpha - \beta_{\min}^2 - \beta_{\min})\hbar^2 = 0$$

$$\alpha - \beta_{\min}^2 - \beta_{\min} = 0$$

$$\alpha = \beta_{\min}^2 + \beta_{\min}$$

$$\alpha = \beta_{\min}(\beta_{\min} + 1)$$

Vergleicht man diese Gleichung mit $\alpha = \beta_{\max}(\beta_{\max} + 1) = 0$, ergibt sich:

$$\beta_{\max} = -\beta_{\min}$$

Da man $|\alpha, \beta_{\min}\rangle$ durch n sukzessive Anwendungen von L_- auf $|\alpha, \beta_{\max}\rangle$ erhalten hat,

ergibt sich Folgendes:

$$\beta_{\max} = \beta_{\min} + n$$

Verbindet man diese beiden Gleichungen, so erhält man:

$$\beta_{\max} = n/2$$

Deshalb kann $\beta_{\max}$ entweder eine ganze Zahl sein oder eine halbe (abhängig davon, ob n gerade oder ungerade ist).



Da $l = \beta_{\max}$, $m = \beta$ und n eine positive Zahl ist, ergibt sich: $-l \leq m \leq l$. So, nun haben Sie das Ergebnis:

- ✓ Die Eigenzustände sind $|l, m\rangle$
- ✓ Die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses ist l
- ✓ Die Quantenzahl des Drehimpulses entlang der z-Achse ist m
- ✓ $L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle$, wobei $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$
- ✓ $L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$, wobei $m = -l, -(l-1), \dots, l-1, l$.
- ✓ $-l \leq m \leq l$.

Zu jedem l gibt es $2l + 1$ Werte von m . Ist beispielsweise $l = 2$, dann gilt:
 $m = -2, -1, 0, 1$ oder 2 . Ist $l = \frac{5}{2}$, so gilt: $m = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ oder $\frac{5}{2}$.

Abbildung 6.2 zeigt ein repräsentatives Beispiel für L und L_z . L ist der Gesamtdrehimpuls und L_z ist die Projektion des Gesamtdrehimpulses auf die z-Achse.

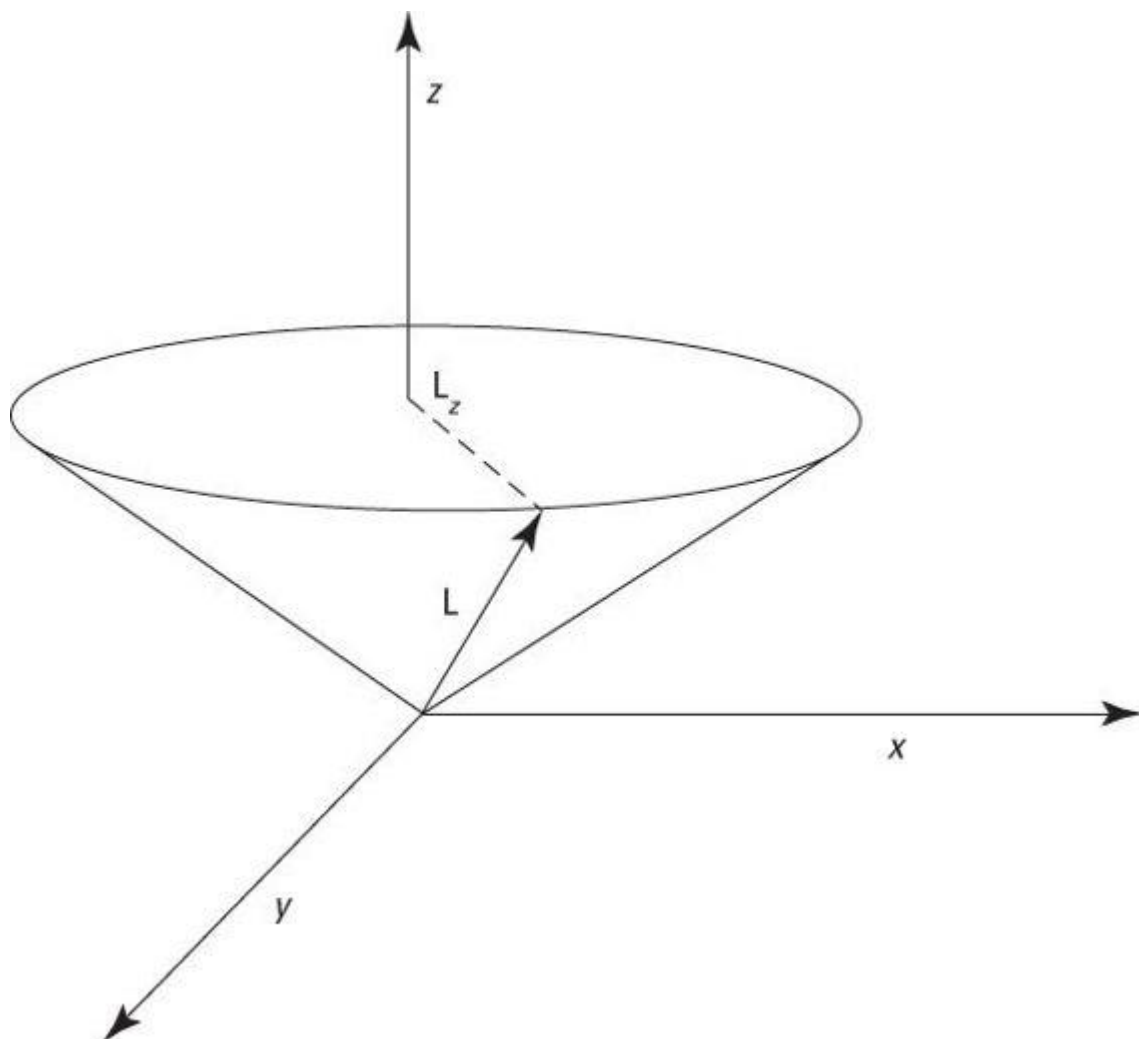


Abbildung 6.2: L und L_z

Die Rotationsenergie eines zweiatomigen Moleküls

Im folgenden Beispiel geht es darum, das Spektrum der Rotationsenergie eines zweiatomigen Moleküls zu bestimmen. Abbildung 6.3 zeigt die Anordnung: Das rotierende zweiatomige Molekül besteht aus zwei Atomen mit den Massen m_1 und m_2 . Das erste Atom rotiert mit dem Radius $r = r_1$ und das zweite mit $r = r_2$. Welche Rotationsenergie hat das Molekül?

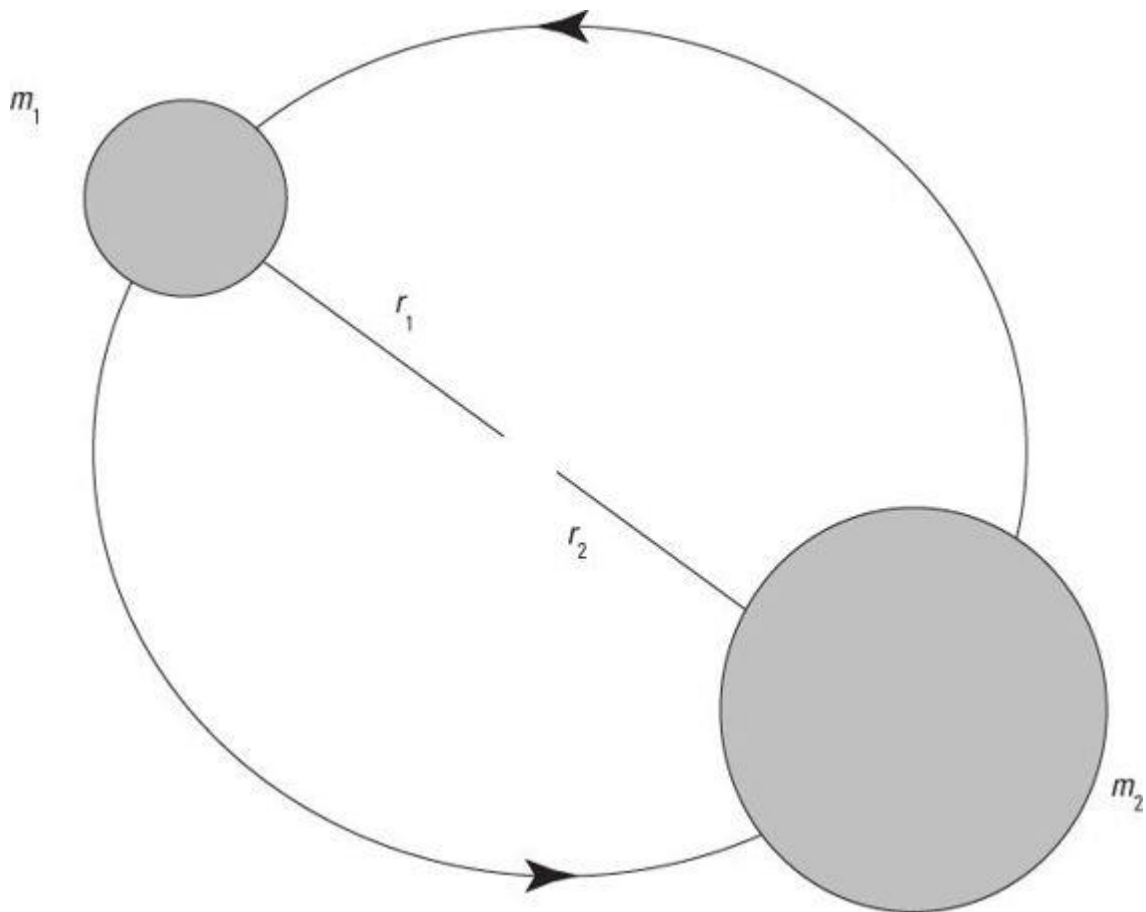


Abbildung 6.3: Ein rotierendes zweiatomiges Molekül

Der Hamilton-Operator lautet (wie man in der Einleitung dieses Kapitels lesen kann):

$$H = \frac{L^2}{2I}$$

I ist das Trägheitsmoment:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu r^2$$

Dabei sind $r = |r_1 - r_2|$ und $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Da $L = I \cdot \omega$, gilt $L = \mu \cdot r^2 \cdot \omega$. Damit folgt für den Hamilton-Operator:

$$H = \frac{L^2}{2I} = \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

Wendet man den Hamilton-Operator auf die Eigenzustände $|l, m\rangle$ an, so erhält man:

$$H |l, m\rangle = \frac{L^2}{2\mu r^2} |l, m\rangle$$

Wie Sie wissen, ist $L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle$, somit folgt:

$$H |l, m\rangle = \frac{L^2}{2\mu r^2} |l, m\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} |l, m\rangle$$

Und weil $H |l, m\rangle = E |l, m\rangle$, folgt daraus:

$$E = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

Die Energie ist also eine Funktion der Drehimpulsquantenzahl l .

Die Eigenwerte der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bestimmen

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit der Bestimmung der Eigenwerte der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des Drehimpulses, die die z-Komponente des Drehimpulses erhöhen oder erniedrigen.

Zunächst soll L_+ betrachtet werden, um c zu bestimmen:

$$L_+ |l, m\rangle = c |l, m+1\rangle$$

$L_+ |l, m\rangle$ liefert also einen neuen Zustand; multipliziert man diesen mit seinem Adjungierten, so sollte man c^2 erhalten:

$$(L_+ |l, m\rangle) L_+ |l, m\rangle = c^2$$

Man beachte, dass

$$(L_+ |l, m\rangle) L_+ |l, m\rangle = c^2 \langle l, m+1 | l, m+1\rangle = c^2$$

gilt. Auf der anderen

Seite gilt $(L_+ |l, m\rangle) L_+ |l, m\rangle = \langle l, m | L_+ L_- |l, m\rangle$. Somit erhält man:

$$\langle l, m | L_+ L_- |l, m\rangle = c^2$$

Was macht man mit $L_+ L_-$? Weiter oben in diesem Kapitel, im Abschnitt »Die Eigenzustände des Drehimpulses bestimmen«, haben Sie gesehen, dass $L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$ gilt. Damit folgt für die Gleichung:

$$\langle l, m | L^2 - L_z^2 + \hbar L_z |l, m\rangle = c^2$$

Großartig! Daraus folgt für c :

$$c = \left(\langle l, m | L^2 - L_z^2 + \hbar L_z |l, m\rangle \right)^{1/2}$$

$$\left(\langle l, m | L^2 - L_z^2 + \hbar L_z |l, m\rangle \right)^{1/2} ?$$

Aber was ist L^2 und L_z an, so bekommt man für c :

Wendet man die Operatoren

$$c = \hbar \left[l(l+1) - m(m+1) \right]^{\frac{1}{2}}$$

Das ist gerade der Eigenwert von L_+ ; das bedeutet, man hat folgende Beziehung:

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar \left[l(l+1) - m(m+1) \right]^{\frac{1}{2}} |l, m+1\rangle$$

Entsprechend kann man zeigen, dass L_- das Folgende liefert:

$$L_- |l, m\rangle = \hbar \left[l(l+1) - m(m-1) \right]^{\frac{1}{2}} |l, m-1\rangle$$

Drehimpuls und Matrix-Darstellung

Kapitel 4 enthält auch die Matrix-Darstellung der Zustände und Operatoren des harmonischen Oszillators. Man kann den Drehimpuls genauso behandeln (und dann versteht man manchmal leichter, was mit dem Drehimpuls passiert). Im Folgenden wird die Matrix-Darstellung des Drehimpulses auf quantenphysikalischem Niveau vorgestellt.

Im Folgenden wird ein System mit Drehimpuls betrachtet, das die Drehimpulsquantenzahl $l = 1$ hat. Das bedeutet, dass m die Werte -1 , 0 und 1 annehmen kann. Die drei möglichen Drehimpulszustände kann man folgendermaßen darstellen:

$$|1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wie aber sehen nun die Operatoren, die Sie in diesem Kapitel verwendet haben, in Matrix-Darstellung aus? Was ist beispielsweise mit L^2 ? Man kann L^2 in der Matrix-Darstellung auf folgende Weise schreiben:

$$L^2 = \begin{pmatrix} \langle 1, 1 | L^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, 1 | L^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 1 | L^2 | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, 0 | L^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, 0 | L^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, 0 | L^2 | 1, -1 \rangle \\ \langle 1, -1 | L^2 | 1, 1 \rangle & \langle 1, -1 | L^2 | 1, 0 \rangle & \langle 1, -1 | L^2 | 1, -1 \rangle \end{pmatrix}$$

Dabei gilt für die Elemente:

$$\langle 1, 1 | L^2 | 1, 1 \rangle = l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2; \langle 1, 1 | L^2 | 1, 0 \rangle = 0; \langle 1, 0 | L^2 | 1, 0 \rangle = 2\hbar^2$$

und so weiter. Die obige Matrix hat also folgendes Aussehen:

$$L^2 = \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix}$$

Das kann man auch in der folgenden Form schreiben:

$$L^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

In der Matrix-Darstellung ist $L^2 |1,1\rangle$:

$$2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das bedeutet:

$$2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Was ist mit dem Operator L_+ ? Wie Sie vielleicht (aus dem vorangegangenen Abschnitt)

wissen, ist $L_+ |l,m\rangle = \hbar [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} |l,m+1\rangle$. In diesem Beispiel ist $l = 1$ und $m = 1, 0$ oder -1 . Somit erhält man folgende Gleichungen:

$$\checkmark L_+ |1,1\rangle = 0$$

$$✓ L_+ |1,0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1,1\rangle$$

$$✓ L_+ |1,-1\rangle = \sqrt{2}\hbar |1,0\rangle$$

Der Operator L_+ sieht in Matrix-Darstellung wie folgt aus:

$$L_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Damit wird aus $L_+ |1,0\rangle$:

$$L_+ |1,0\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und das ist gleich:

$$L_+ |1,0\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Mit anderen Worten: $\sqrt{2}\hbar |1,1\rangle = L_+ |1,0\rangle$.

Okay, was ist mit L_- ? Sie wissen:

$$L_- |l,m\rangle = \hbar [l(l+1) - m(m-1)]^{1/2} |l,m-1\rangle$$

und $m = 1,0$ oder -1 . Somit erhält man folgende Gleichungen: . In diesem Beispiel ist $l = 1$

$$✓ L_- |1,1\rangle = \sqrt{2}\hbar |1,0\rangle$$

$$✓ L_- |1,0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1,-1\rangle$$

$$✓ L_- |1, -1\rangle = 0$$

Der Operator L_- sieht in Matrix-Darstellung wie folgt aus:

$$L_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Damit gilt für $L_- |1, 1\rangle$:

$$L_- |1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und das bedeutet:

$$L_- |1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das heißt:

$$\sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle = L_- |1, 1\rangle$$

Genau, wie Sie es erwartet haben.

Okay, Sie haben also L^2 , L_+ und L_- bestimmt. Nun können Sie noch L_z bestimmen, was mithilfe folgender Gleichungen einfach ist:

$$✓ \hbar |1, 1\rangle = L_z |1, 1\rangle$$

$$✓ 0 = L_z |1, 0\rangle$$

$$✓ -\hbar |1, -1\rangle = L_z |1, -1\rangle$$

Der Operator L_z lautet:

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Somit gilt für $L_z |1, -1\rangle$:

$$L_z |1, -1\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Das bedeutet:

$$L_z |1, -1\rangle = -\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Damit folgt $L_z |1, -1\rangle = -\hbar |1, -1\rangle$.

Jetzt fehlen noch L_x und L_y . Diese zu bestimmen, wird nicht so schwierig, wie Sie vielleicht denken, denn

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

und

$$L_y = \frac{i}{2}(L_- - L_+)$$

Zunächst soll L_x betrachtet werden. L_+ ist gegeben durch:

$$L_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und L_- ist:

$$L_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Damit erhält man für L_x :

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Mit $L_y = \frac{i}{2}(L_- - L_+)$ erhält man für L_y :

$$L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Super, das geht ja ausgezeichnet. Wie berechnet man nun $[L_x, L_y]$? Um das zu bestimmen, muss man nur $[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x$ berechnen. Man beginnt mit $L_x L_y$:

$$L_x L_y = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Das ergibt:

$$L_x L_y = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & -i \end{pmatrix}$$

Auf die gleiche Weise berechnet man $L_y L_x$:

$$L_y L_x = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Das ergibt:

$$L_y L_x = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} -i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & i \end{pmatrix}$$

Somit gilt für $[L_x, L_y]$:

$$[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 2i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2i \end{pmatrix}$$

Und das ist gleich:

$$[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x = \hbar^2 \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix}$$

Es gilt auch:

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Somit kann man folgendes umschreiben:

$$\left[L_x, L_y \right] = L_x L_y - L_y L_x = \hbar^2 \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix}$$

In:

$$\left[L_x, L_y \right] = L_x L_y - L_y L_x = i\hbar L_z$$

Das ist ein feines Ergebnis: $\left[L_x, L_y \right] = i\hbar L_z.$

Das Ganze abrunden: Übergang zu Kugelkoordinaten

Im ersten Teil dieses Kapitels wurde die Dirac-Schreibweise verwendet, die den Vorteil hat, dass sie kurz und übersichtlich ist und man darüber hinaus an kein spezielles Basissystem gebunden ist. In dem Abschnitt »Die Eigenwerte des Drehimpulses bestimmen« haben Sie allein aufgrund der algebraischen Struktur der Vertauschungsrelationen für den Drehimpuls folgendes Ergebnis für das Eigenwertspektrum erhalten:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad \text{oder} \quad l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

Dabei gilt für die zugehörigen Werte von m :

$$m = l, l-1, \dots, -l+1, -l$$

Die Drehimpulseigenwerte l sind demzufolge entweder ganzzahlig oder halbzahlig; die Eigenwerte von m liegen in ganzzahligen Schritten zwischen l und $-l$.

Im zweiten Teil dieses Kapitels werden speziell die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses bestimmt. Diese Rechnung wird Sie auf die *Kugelfunktionen* führen, die im Abschnitt „Die Eigenfunktionen von L^2 in Kugelkoordinaten“ ausführlich untersucht werden. Aufgrund des engen Zusammenhangs mit der Rotation ist es an dieser Stelle vorteilhaft, von den kartesischen Koordinaten x , y und z zu *Kugelkoordinaten* (sphärischen Polarkoordinaten) überzugehen, da sie die Mathematik deutlich vereinfachen.

Im rechtwinkligen (kartesischen) Koordinatensystem benutzt man x , y und z zur Orientierung. Im Kugelkoordinatensystem verwendet man auch drei Größen, wie Abbildung 6.4 zeigt: r , θ und φ . Die Strecke der Länge r geht vom Nullpunkt zu dem Teilchen, das einen Drehimpuls besitzt; θ ist der Winkel, den r mit der z -Achse bildet, und φ ist der Winkel zwischen der Projektion von r auf die x - y -Ebene und der x -Achse. Man kann zwischen den Kugel- und den rechtwinkligen Koordinaten wie folgt umrechnen:

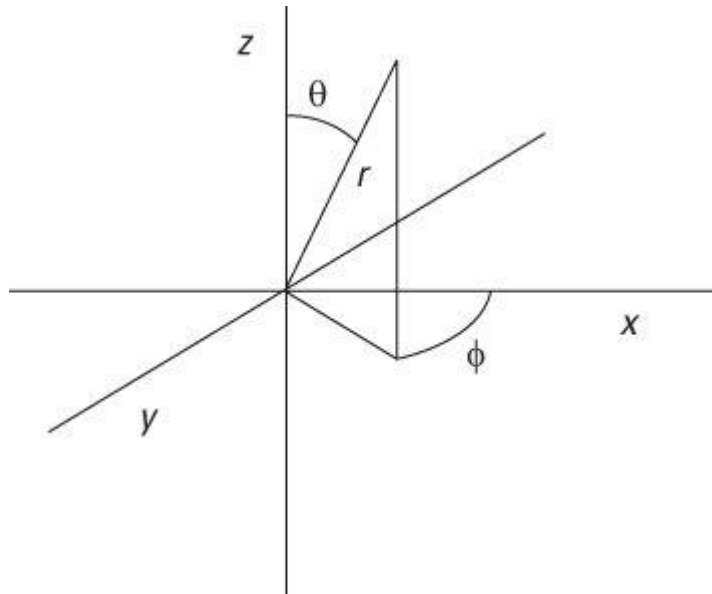


Abbildung 6.4: Das Kugelkoordinatensystem

✓ $x = r \sin \theta \cos \phi$

✓ $y = r \sin \theta \sin \phi$

✓ $z = r \cos \theta$

Die Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses in kartesischen Koordinaten lautet folgendermaßen:

$$L_x = YP_z - ZP_y = -i\hbar \left(\frac{Y\partial}{\partial z} - \frac{Z\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = ZP_x - XP_z = -i\hbar \left(\frac{Z\partial}{\partial x} - \frac{X\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = XP_y - YP_x = -i\hbar \left(\frac{X\partial}{\partial y} - \frac{Y\partial}{\partial x} \right)$$

Wenn man zu Kugelkoordinaten übergeht, so erhält man folgende Gleichungen für den Drehimpuls:

$$✓ \quad L_z = \frac{-i\hbar\partial}{\partial\phi}$$

$$✓ \quad L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right)$$

$$✓ \quad L_+ = L_x + iL_y = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{i\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

$$✓ \quad L_- = L_x - iL_y = -\hbar e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{i\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

Diese Gleichungen sehen zunächst sehr umfangreich aus. Aber eines sieht man dennoch sofort: Sie hängen nur von θ und ϕ ab, nicht von r . Die Eigenfunktionen der Operatoren in der obigen Liste können somit in folgender Weise geschrieben werden:

$$<\theta, \phi | l, m >$$

Die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses sind aus der Mathematik bekannte Funktionen, die man als *Kugelfunktionen* oder *Kugelflächenfunktionen* $Y_{lm}(\theta, \phi)$ bezeichnet. Demzufolge gilt:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = <\theta, \phi | l, m >$$

Jetzt sind Sie in der Lage, die Eigenfunktionen der gemeinsam diagonalisierbaren Operatoren L^2 und L_z des Bahndrehimpulses zu bestimmen. Sie wissen, dass Sie, wenn Sie die Operatoren L^2 und L_z auf die Eigenzustände des Drehimpulses anwenden, folgendes erhalten:

$$L^2 |l, m > = l(l+1)\hbar^2 |l, m >$$

$$L_z |l, m > = m\hbar |l, m >$$

Also muss folgendes gelten:

$$✓ \quad L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$✓ \quad L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Damit können Sie fortfahren. Beachten Sie, dass L_z nur von θ abhängt. Das heißt, man kann $Y_{lm}(\theta, \phi)$ so aufspalten, dass ein Teil nur von θ abhängt und der andere nur von ϕ . Die Separation von $Y_{lm}(\theta, \phi)$ in zwei Teile sieht folgendermaßen aus:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

Aus diesem Grund ist das Arbeiten mit Kugelkoordinaten beim Drehimpuls so hilfreich: Man kann die Eigenfunktionen in zwei Teile aufspalten, wobei einer nur von θ abhängt und der andere nur von ϕ .

Die Eigenfunktionen von L_z in Kugelkoordinaten

Zunächst sollen die Eigenfunktionen von L_z in sphärischen Koordinaten berechnet werden. Der Operator L_z hat in sphärischen Koordinaten folgendes Aussehen:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Somit folgt für $L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = L_z \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$:

$$L_z \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

Das ist dasselbe wie:

$$L_z \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) = -i\hbar \Theta_{lm}(\theta) \frac{\partial \Phi_m}{\partial \phi}(\phi)$$

Und weil $L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi)$, kann die Gleichung wie folgt geschrieben werden:

$$-i\hbar \Theta_{lm}(\theta) \frac{\partial \Phi_m}{\partial \phi}(\phi) = m\hbar \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

Wenn man auf beiden Seiten kürzt, erhält man folgende Differentialgleichung:

$$-i \frac{\partial \Phi_m}{\partial \phi}(\phi) = m \Phi_m(\phi)$$

Das sieht einfach aus, und die Lösung ist gerade:

$$\Phi_m(\phi) = C e^{im\phi}$$

wobei C eine Integrationskonstante ist.

Man kann C bestimmen, wenn man darauf besteht, dass $\Phi_m(\phi)$ normalisiert ist. Das bedeutet, dass das Folgende gilt:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_m(\phi) d\phi = 1$$

Daraus erhält man:

$$C = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}$$

Somit gilt für $\Phi_m(\phi)$:

$$\Phi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{(2\pi)^{1/2}}$$

Sie machen Fortschritte – Sie sind nun in der Lage, einen Ausdruck für $\Phi_m(\phi)$ zu finden, sodass für $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$ Folgendes gilt:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) = \Theta_{lm}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{(2\pi)^{1/2}}$$

Das ist großartig – Sie haben die Hälfte geschafft. Sie müssen jetzt nur noch den Ausdruck für $\Theta_{lm}(\theta)$ bestimmen, der Eigenfunktion von L^2 . Das folgt im nächsten Abschnitt.

Die Eigenfunktionen von L^2 in Kugelkoordinaten

Jetzt werden Sie es auch noch schaffen, die Eigenfunktion von L^2 , $\Theta_{lm}(\theta)$, zu berechnen. Der Operator L^2 lautet in Kugelkoordinaten:

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Das ist tatsächlich ein Operator. Und sie wissen:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{(2\pi)^{1/2}}$$

Wenn Sie den Operator L^2 auf $Y_{lm}(\theta, \phi)$ anwenden, erhalten Sie folgende Gleichung:

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{-\hbar^2}{(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi}$$

Da $L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$ gilt, folgt:

$$\begin{aligned} & \frac{-\hbar^2}{(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} \\ &= l(l+1)\hbar^2 \Theta_{lm}(\theta) \frac{e^{im\phi}}{(2\pi)^{1/2}} \end{aligned}$$

Puuh, worauf haben Sie sich da eingelassen? Wenn Sie kürzen und beide Terme auf eine Seite bringen, erhalten Sie folgende Differentialgleichung:

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} + l(l+1) \Theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} = 0$$

Wenn Sie diese Gleichung vereinfachen, indem Sie durch $e^{im\phi}$ teilen, dann erhalten Sie folgende Differentialgleichung:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta_{lm}(\theta) \right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta_{lm}(\theta) = 0$$

Diese Gleichung heißt Legendre-Differentialgleichung; ihre Lösungen sind bekannte Funktionen aus der mathematischen Physik. Die Lösungen lassen sich in folgender Form angeben.

$$\Theta_{lm}(\theta) = C_{lm} P_{lm}(\cos \theta)$$

wobei $P_{lm}(\cos \theta)$ die *Legendre-Funktion* ist.

An dieser Stelle sind nur noch zwei Fragen offen:

1. Was ist die in dieser Gleichung auftretende Legendre-Funktion?

Die Antwort finden Sie in dem folgenden kleinen mathematischen Einschub.

2. Wie lautet die vollständige Darstellung der Eigenfunktionen der Bahndrehimpulses

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi) \quad ?$$

Um diese Antwort zu erhalten, bestimmt man die Konstanten C_{lm} , indem man die Eigenfunktion normiert.

Erläuterung der Legendre-Funktion und der Legendre-Polynome

Aber was sind die Legendre-Funktionen? Man kann die Legendre-Funktionen schreiben als Produkt aus einem Anteil, der von m abhängig ist, und dem Polynom $P_l(x)$:

$$P_{lm}(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$$

Dabei sind $P_l(x)$ die *Legendre-Polynome*, das heißt Polynome l -ten Grades in x und $x = \cos \theta$. Die Legendre-Polynome sind durch folgende Formel gegeben:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

Mithilfe dieser Gleichung kann man die niedrigsten Legendre-Polynome wie folgt bestimmen:

$$✓ P_0(x) = 1$$

$$✓ P_1(x) = x$$

$$✓ P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$✓ P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

$$✓ P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$$

$$✓ P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$

Und so weiter. So sehen die ersten Legendre-Polynome $P_l(x)$ aus. Doch wie lauten die assoziierten Legendre-Funktionen $P_{lm}(x)$? Man kann sie ebenfalls berechnen. Man beginnt mit $P_{10}(x)$, für das $m = 0$ ist. Das ist einfach, denn $P_{10}(x) = P_1(x)$; damit ergeben sich folgende Gleichungen:

$$✓ P_{10}(x) = x$$

$$✓ P_{20}(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$✓ P_{30}(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

Außerdem kann man folgende Funktionen berechnen:

$$✓ P_{11}(x) = (1 - x^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$✓ P_{21}(x) = 3x(1 - x^2)^{\frac{1}{2}}$$

$$✓ P_{22}(x) = 3(1-x^2)^{1/2}$$

$$✓ P_{31}(x) = \frac{3}{2}(5x^2-1)(1-x^2)^{1/2}$$

$$✓ P_{32}(x) = 15x(1-x^2)$$

$$✓ P_{33}(x) = 15x(1-x^2)^{3/2}$$

Diese Gleichungen geben Ihnen einen Überblick darüber, wie die Funktionen $P_{lm}(x)$ aussehen; das meiste ist also getan. Wie Sie sich erinnern werden, stehen $\Theta_{lm}(\theta)$, also der von θ abhängige Teil von $Y_{lm}(\theta, \phi)$, und die Funktionen P_{lm} in folgendem Zusammenhang:

$$\Theta_{lm}(\theta) = C_{lm} P_{lm}(\cos \theta)$$

Bestimmung der normierten Eigenfunktionen

Nun wissen Sie, wie die Legendre-Funktionen P_{lm} lauten, aber wie sehen die Konstanten C_{lm} aus? Wenn Sie die kennen, dann kennen Sie auch die vollständigen Eigenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ des Drehimpulses, da

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi).$$

Um die Konstanten C_{lm} zu berechnen, können Sie den Weg gehen, den Sie immer in der Quantenphysik gehen, wenn Integrationskonstanten bestimmt werden müssen: Sie normalisieren

die Eigenfunktionen. Das sieht für $Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$ folgendermaßen aus:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta = 1$$

In dieser Gleichung ersetzt man die folgenden Größen:

$$✓ Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

$$✓ \Phi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{(2\pi)^{1/2}}$$

$$\checkmark \Theta_{lm}(\theta) = C_{lm} P_{lm}(\cos \theta)$$

Man erhält folgende Gleichung:

$$\frac{|C_{lm}|^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi |P_{lm}^*(\cos \theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1$$

Das Integral über ϕ ergibt 2π , somit folgt:

$$|C_{lm}|^2 \int_0^\pi |P_{lm}^*(\cos \theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1$$

Das Integral kann man wie folgt berechnen:

$$|C_{lm}|^2 \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} = 1$$

Mit anderen Worten:

$$C_{lm} = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right]^{1/2} \text{ mit } m \geq 0$$

Das bedeutet:

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right]^{1/2} P_{lm}(\cos \theta) \text{ mit } m \geq 0$$

Somit folgt für die Eigenfunktion des Drehimpulses in Kugelkoordinaten $Y_{lm}(\theta, \phi)$
 $= \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi} \text{ mit } m \geq 0$$

Diese Gleichung ist die *Definition der normierten Kugelfunktionen*, der gemeinsamen Eigenfunktionen der Operatoren L^2 und L_z des Bahndrehimpulses.

Die ersten Kugelfunktionen lauten:

$$✓ Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$✓ Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$✓ Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$✓ Y_{20}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$✓ Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$✓ Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

Man kann diese Gleichungen auch benutzen, um die Kugelfunktionen in kartesischen Koordinaten anzugeben:

$$✓ \sin \theta \cos \phi = \frac{x}{r}$$

$$✓ \sin \theta \sin \phi = \frac{y}{r}$$

$$✓ \quad \cos \theta = \frac{z}{r}$$

Man setzt diese Gleichungen in die folgende ein:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi} \text{ mit } m \geq 0$$

Damit erhält man die Kugelfunktionen in kartesischen Koordinaten:

$$✓ \quad Y_{00}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$✓ \quad Y_{10}(x, y, z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$

$$✓ \quad Y_{1\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)}{r}$$

$$✓ \quad Y_{20}(x, y, z) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{(3z^2 - r^2)}{r^2}$$

$$✓ \quad Y_{2\pm 1}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{z(x \pm iy)}{r^2}$$

$$✓ \quad Y_{2\pm 2}(x, y, z) = \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x^2 - y^2 \pm 2ixy)}{r^2}$$

Das wichtigste von Kapitel 6 noch einmal in Kürze

In diesem Kapitel werden zunächst Drehimpulse im Allgemeinen behandelt. Dabei muss man berücksichtigen, dass die verschiedenen Drehimpulskomponenten nicht kommutieren und daher nicht gleichzeitig bestimmt werden können. Da jedoch L^2 skalar ist, gilt folgende Gleichung:

$$[L^2, L_i] = 0 \quad \text{für} \quad i = x, y, z$$

Demzufolge kann man L^2 und eine Komponente von L gleichzeitig bestimmen. Im Allgemeinen wählt man L_z , so dass man die Eigenwerte der gemeinsamen Eigenfunktionen von L^2 und L_z ermitteln kann.

Im folgenden definiert man zwei neue Operatoren:

1. Erzeugungsoperator: $L_+ = L_x + iL_y$

2. Vernichtungsoperator: $L_- = L_x - iL_y$

Anhand dieser Operatoren und ihrer algebraischen Eigenschaften werden dann die Eigenwerte von Drehimpulsoperatoren im Allgemeinen bestimmt.

Im Anschluss an diese allgemeingültige Betrachtung werden die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses bestimmt. Man geht zunächst von der Ortsdarstellung von L_x , L_y und L_z aus:

$$L_x = -i\hbar \left(Y \frac{\partial}{\partial z} - Z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = -i\hbar \left(Z \frac{\partial}{\partial x} - X \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \left(X \frac{\partial}{\partial y} - Y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Anschließend geht man aufgrund des engen Zusammenhangs mit Drehbewegungen zur Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses in Kugelkoordinaten über. Um die sogenannten Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses zu bestimmen, betrachtet man die Wirkung der Operatoren L^2 und L_z auf die Eigenzustände des Drehimpulses:

$$L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle$$

$$L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$$

Somit müssen für die Kugelfunktionen folgende Gleichungen gelten:

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Da L_z nur von θ abhängt, kann man an dieser Stelle einen Separationsansatz wählen und $Y_{lm}(\theta, \phi)$ in zwei Teile aufspalten, so dass ein Teil nur von θ abhängt, der andere nur von ϕ :

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

Auf Grund der Separation von $Y_{lm}(\theta, \phi)$ in zwei Teile ist es möglich, zunächst die Eigenfunktionen von L_z und anschließend auf Grundlage dieses Ergebnisses die Eigenfunktionen von L^2 zu bestimmen. Am Ende erhält man die vollständige *Definition der normierten Kugelfunktionen*, der gemeinsamen Eigenfunktionen der Operatoren L^2 und L_z des Bahndrehimpulses. Dabei sind die Quantenzahlen l und m auf ganzzahlige Werte beschränkt:

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -l, \dots, l$$

Die Quantenzahl l charakterisiert also den Bahndrehimpuls eines Teilchens und wird demzufolge *Bahndrehimpulsquantenzahl* oder auch *Nebenquantenzahl* genannt. Die *Magnetquantenzahl* m beschreibt dagegen die räumliche Orientierung des Bahndrehimpulses oder, genauer ausgedrückt, die Größe der z-Komponente in der Einheit $\hbar$. (Die Quantenzahlen werden in Kapitel 10, das sich mit dem Wasserstoffatom beschäftigt, in dem Abschnitt »Linien führen zu Orbitalen« ausführlich behandelt.)

Das Thema »Drehimpuls« wird im folgenden Kapitel mit der Untersuchung des intrinsischen Drehimpulses fortgesetzt, des Spins.

Mit Spin schwindlig werden

In diesem Kapitel ...

- ▶ Stern-Gerlach-Experiment und der Spin
- ▶ Eigenzustände und Schreibweise des Spins
- ▶ Fermionen und Bosonen
- ▶ Vergleich von Spin- und Drehimpulsoperatoren
- ▶ Halbzahliger Spin und Pauli-Matrizen

Wie Sie sicher aus Ihrer Beschäftigung mit der Physik wissen, besitzt ein Elektron (frei oder gebunden) einen intrinsischen Drehimpuls, den man als *Spin* oder *Eigendrehimpuls* bezeichnet. Intrinsisch bedeutet in diesem Zusammenhang, dass es sich bei dem Spin um eine fundamentale Eigenschaft des Elektrons handelt, vergleichbar mit seiner Masse oder seiner elektrischen Ladung.

Vielleicht stellen Sie sich den Spin als die Eigendrehung eines winzigen Teilchens um eine Achse vor, doch diese Vorstellung ist nicht wirklich zutreffend. In der Quantenmechanik betrachtet man den Spin am besten als eine messbare, intrinsische Eigenschaft des Elektrons, zu der es kein klassisches Analogon gibt.

Im Verlauf dieses Kapitels wird sich zeigen, dass der Betrag des Spins quantisiert ist und durch eine weitere Quantenzahl, die sogenannte *Spinquantenzahl* s beschrieben wird, die für Elektronen immer den Wert $1/2$ hat. Darüber hinaus beschreibt die *magnetische Spinquantenzahl* m (oder auch m_s) des Elektrons die Orientierung seines Spins zur z -Achse. Da der Spin des Elektrons die Quantenzahl $s = 1/2$ hat, kann m_s nur die Werte $+1/2$ und $-1/2$ annehmen.

Wie Sie an dieser Stelle richtig vermuten, gibt es auch entsprechende Spinoperatoren, die große Ähnlichkeit mit den Bahndrehimpulsoperatoren L haben. Doch bevor diese erläutert werden, wird im folgenden Abschnitt zunächst der Stern-Gerlach-Versuch vorgestellt, der die Existenz des Spins bestätigt.

Der Stern-Gerlach-Versuch und der fehlende Strahl

Das Stern-Gerlach-Experiment offenbarte im Jahr 1922 unerwartet die Existenz des Spins. Die Physiker Otto Stern und Walther Gerlach schickten einen Strahl von Silberatomen zwischen den Polen eines Magneten hindurch, dessen Magnetfeld in z-Richtung lag. Abbildung 7.1 zeigt die Versuchsanordnung.

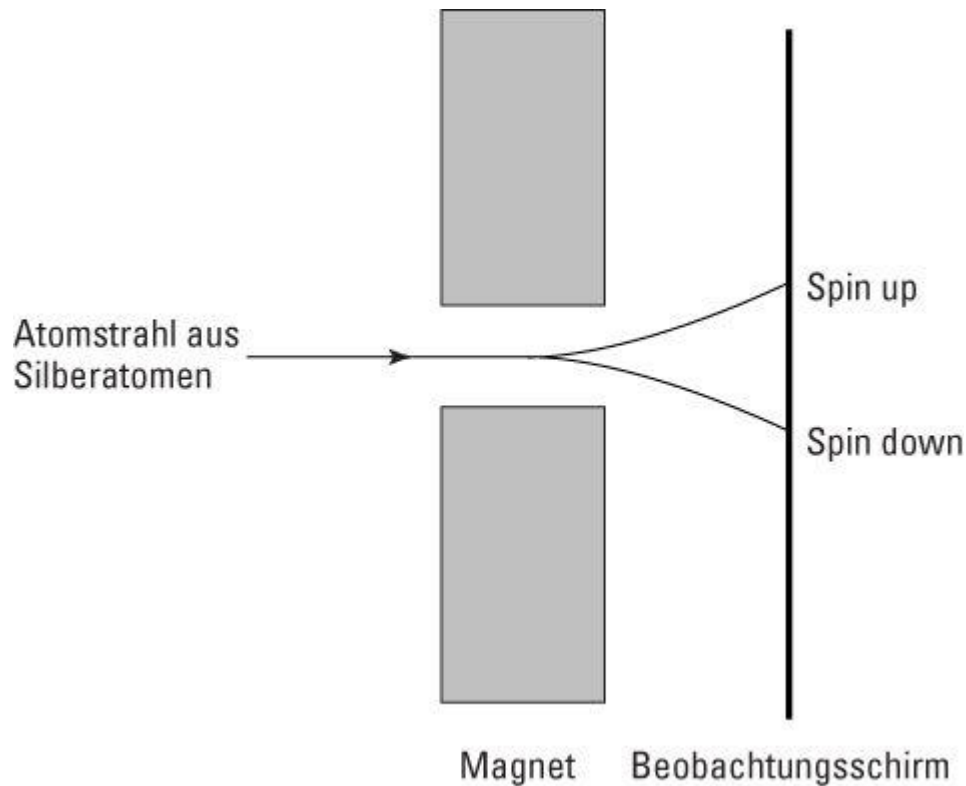


Abbildung 7.1:
Der Stern-Gerlach-Versuch

Da 46 der 47 Elektronen des Silbers in einer kugelsymmetrischen Wolke angeordnet sind, tragen sie nichts zum Bahndrehimpuls des Atoms bei. Das 47. Elektron kann folgende Zustände einnehmen:

- ✓ Befindet sich das Elektron im 5s-Zustand, so ist der Drehimpuls $l = 0$ und die z-Komponente des Drehimpulses ist 0.
- ✓ Befindet sich das Elektron im 5p-Zustand, so ist der Drehimpuls $l = 1$ und die z-Komponente des Drehimpulses kann die Werte -1 , 0 und 1 annehmen.

Das heißt, dass Stern und Gerlach auf dem Schirm, der in Abbildung 7.1 rechts dargestellt ist, entweder keine Aufspaltung oder aber eine in drei Strahlen erwarten konnten, entsprechend den drei Zuständen der z-Komponente des Drehimpulses.

Sie beobachteten aber eine Aufspaltung in zwei Strahlen. Das bereitete den Physikern über drei Jahre Kopfzerbrechen. Im Jahr 1925 schlugen dann die Physiker Samuel A. Goudsmit und George E. Uhlenbeck vor, dass Elektronen einen inneren Drehimpuls besitzen, der ihnen ein magnetisches Moment verleiht, das mit dem magnetischen Feld wechselwirkt. Es war nun wirklich offensichtlich, dass hier ein anderer Drehimpuls als der Bahndrehimpuls am Werk war. Und dieser eingebaute, innere Drehimpuls bekam den Namen *Spin*.

Die Aufteilung des Stroms von Silberatomen in zwei Strahlen hängt somit vom Spin des 47. Elektrons ab. Demzufolge gibt es zwei mögliche Zustände für den Spin, die man mit *up* und *down* bezeichnet.

Der Spin ist ein rein quantenmechanischer Effekt, und es gibt keinen entsprechenden klassischen Effekt. Wenn man einen Vergleich ziehen will, so vielleicht mit der Drehung der Erde um die Sonne, denn die Erde hat sowohl einen Spin (da sie um die eigene Achse rotiert) als auch einen Bahndrehimpuls (da sie um die Sonne kreist). Aber selbst dieses Bild erklärt den Spin der Elektronen nicht in klassischer Hinsicht, denn man kann sich vorstellen, dass sich die Erde aufhört zu drehen. Aber Elektronen werden immer Spin besitzen, und das gilt auch für andere subatomare Teilchen, die Spin besitzen, wie etwa Protonen.



Der Spin hängt nicht von räumlichen Freiheitsgraden ab. Selbst ein ruhendes Elektron (was der Unschärfe-Relation widersprechen würde), besitzt einen Spin.

Der Spin und die Eigenzustände

Da der Spin alle Eigenschaften eines mechanischen Drehimpulses hat, allerdings mit der Ausnahme, dass er nicht durch die Drehbewegung einer Masse hervorgerufen wird, kann er quantenmechanisch auch wie ein Drehimpuls behandelt werden. Der zum Spin gehörende Operator $S = (S_x, S_y, S_z)$ gehorcht denselben drei Vertauschungsrelationen wie der zum Bahndrehimpuls gehörende Operator $L = (L_x, L_y, L_z)$. Somit gelten für den Spin auch alle anderen allgemeinen Regeln des quantenmechanischen Bahndrehimpulses.

Ein grundlegender Unterschied zum Bahndrehimpuls besteht allerdings darin, dass sich der Spin nicht mithilfe von Differentialoperatoren ausdrücken lässt, so dass sich die Eigenfunktionen des Spins nicht auf die gleiche Weise bestimmen lassen wie die des Bahndrehimpulses. Daraus folgt, dass man die allgemeingültige Dirac-Notation verwendet, also die Darstellung durch die basisunabhängigen Ket- und Bra-Vektoren.

In Kapitel 5, das sich mit dem Drehimpuls beschäftigte, wurden die Eigenzustände des Bahndrehimpulses folgendermaßen eingeführt: $|l, m\rangle$. (Dabei ist l die Quantenzahl des Drehimpulses und m die Quantenzahl der z -Komponente des Drehimpulses.)

Man kann diese Schreibweise auch für die Eigenzustände des Spins verwenden. Genau wie beim Bahndrehimpuls kann man eine Quantenzahl für den Spin angeben und eine, die den Spin entlang der z -Achse beschreibt. (Man beachte: Beim Spin ist keine wirkliche z -Achse vorhanden; man erhält jedoch eine solche, wenn man ein Magnetfeld anlegt; üblicherweise zeigt die z -Achse in die Richtung des angelegten Magnetfelds.)



Die Buchstaben, die für die beiden Quantenzahlen verwendet werden, sind s und m (manchmal werden sie auch als s und m_s geschrieben). Mit anderen Worten, die Eigenzustände des Spins werden in folgender Weise geschrieben: $|s, m\rangle$.

Also: Welche Werte können s und m annehmen? Das kommt als Nächstes.

Halbe und Ganze: Fermionen und Bosonen

In Analogie zum Bahndrehimpuls kann man davon ausgehen, dass die Quantenzahl m (die die z-Komponente des Spins beschreibt), die Werte $-s, -s + 1, \dots, s - 1$ und s annehmen kann, wobei s die Spinquantenzahl ist. Stern und Gerlach haben bei Elektronen zwei Strahlen beobachtet, also gilt $2s + 1 = 2$ und daraus folgt $s = 1/2$. Demzufolge kann m gleich $+1/2$ oder $-1/2$ sein. Somit lauten die möglichen Eigenzustände der Elektronen bezüglich des Spins:

$$\begin{aligned} &|1/2, 1/2\rangle \\ &|1/2, -1/2\rangle \end{aligned}$$

Gilt also für alle subatomaren Teilchen $s = 1/2$? Nein, es gibt verschiedene Möglichkeiten:

✓ **Fermionen:** In der Physik heißen Teilchen mit halbzahligem Spin *Fermionen*. Dazu gehören Elektronen, Protonen, Neutronen und weitere Teilchen, auch Quarks. Elektronen, Protonen und Neutronen haben beispielsweise den Spin $s = 1/2$, während Delta-Teilchen den Spin $s = 3/2$ haben.

✓ **Bosonen:** Teilchen mit ganzzahligem Spin heißen *Bosonen*. Dazu gehören Photonen, Pi-Mesonen und andere. Auch von den im Zusammenhang mit der Gravitationskraft postulierten Teilchen, den *Gravitonen*, wird angenommen, dass sie einen ganzzahligen Spin besitzen. Pi-Mesonen haben zum Beispiel den Spin $s = 0$, Photonen den Spin $s = 1$ und so weiter.

Für Elektronen sind die Eigenzustände des Spins $|1/2, 1/2\rangle$ und $|1/2, -1/2\rangle$. Für Photonen lauten sie dagegen $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ und $|1, -1\rangle$. Demzufolge sind die möglichen Eigenzustände davon abhängig, mit welchem Teilchen man arbeitet.

Spinoperatoren: Bewegungen mit Drehimpuls

Da der Spin ein eingebauter Drehimpuls ist, haben die Spinoperatoren sehr viel mit den Operatoren des Bahndrehimpulses gemeinsam. In Kapitel 5 wurden die Bahndrehimpulsoperatoren L^2 und L_z behandelt. Wie zu erwarten, gibt es entsprechend auch die Spinoperatoren S^2 und S_z . Diese Operatoren sind allerdings nur Operatoren; anders als beim Bahndrehimpuls gibt es keine differentielle Darstellung dieser Operatoren.

Abgesehen davon gibt es zu allen Operatoren des Bahndrehimpulses, wie L_x , L_y und L_z , die entsprechenden Spin-Operatoren: S_x , S_y und S_z . Für die Kommutatoren von L_x , L_y und L_z gelten die folgenden Regeln:

$$✓ \quad [L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$✓ \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$✓ \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Für die Kommutatoren der Spinoperatoren gelten die gleichen Regeln:

$$✓ \quad [S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

$$✓ \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x$$

$$✓ \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

Der Operator L^2 liefert das folgende Ergebnis, wenn Sie ihn auf den Eigenzustand des Bahndrehimpulses anwenden:

$$L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle$$

Und wie Sie es erwartet haben, wirkt der Operator S^2 entsprechend:

$$S^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle$$

Wenn Sie den Operator L_z auf einen Eigenzustand des Bahndrehimpulses anwenden, erhalten sie folgendes Ergebnis (siehe Kapitel 5):

$$L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$$

Der Operator S_z wirkt entsprechend:

$$S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle$$

Was ist mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren L_+ und L_- ? Gibt es entsprechende Operatoren für den Spin? Beim Bahndrehimpuls gilt:

$$✓ L_+ |l, m\rangle = \hbar [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2} |l, m+1\rangle$$

$$✓ L_- |l, m\rangle = \hbar [l(l+1) - m(m-1)]^{1/2} |l, m-1\rangle$$

Es gibt auch beim Spin Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. S_+ und S_- wirken wie folgt:

$$✓ S_+ |s, m\rangle = \hbar [s(s+1) - m(m+1)]^{1/2} |s, m+1\rangle$$

$$✓ S_- |s, m\rangle = \hbar [s(s+1) - m(m-1)]^{1/2} |s, m-1\rangle$$

Im nächsten Abschnitt werden speziell Teilchen mit Spin $1/2$ betrachtet.

Spin $1/2$ -Teilchen und Pauli-Matrizen

Neben den allgemeinen Eigenschaften des quantenmechanischen Drehimpulses gibt es bei Spin $1/2$ -Teilchen (Fermionen) zusätzlich besondere Eigenschaften, die darauf beruhen, dass s_z nur zwei Eigenwerte besitzt. Daher erfordern sie eine gesonderte Untersuchung.

$$S^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |s, m\rangle$$

Und die Eigenwerte des Operators S_z lauten:

$$S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |s, m\rangle$$

Man kann diese beiden Gleichungen graphisch darstellen, wie man Abbildung 7.2 entnehmen kann. Die beiden Spinzustände weisen eine unterschiedliche Lage bezüglich der z-Achse auf.

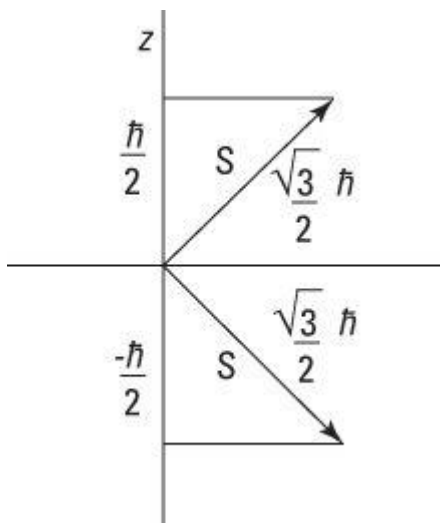


Abbildung 7.2: Betrag des Spins und seine Lage bezüglich der z-Achse

Spin $1/2$ -Matrizen

Es ist an der Zeit, die Spineigenzustände und -operatoren von Teilchen mit Spin $1/2$ in der Matrix-Darstellung zu betrachten. Zunächst schreibt man den Eigenzustand $|1/2, 1/2\rangle$ in der folgenden Form:

$$|1/2, 1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und der Eigenzustand $|1/2, -1/2\rangle$ wird folgendermaßen geschrieben:

$$|1/2, -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Was ist mit dem Spinoperator S^2 ? Dieser lautet in der Matrix-Darstellung:

$$S^2 = \begin{pmatrix} \langle 1/2, 1/2 | S^2 | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, 1/2 | S^2 | 1/2, -1/2 \rangle \\ \langle 1/2, -1/2 | S^2 | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, -1/2 | S^2 | 1/2, -1/2 \rangle \end{pmatrix}$$

Und das ergibt:

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Dementsprechend lautet der Operator S_z :

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \\ \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \end{pmatrix}$$

Das ergibt:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Verwendet man die Matrix-Darstellung von S_z , so kann man die z-Komponente des Spins beispielsweise für den Eigenzustand $|^{1/2}, -^{1/2}\rangle$ bestimmen:

$$S_z |^{1/2}, -^{1/2}\rangle$$

Schreibt man das in Matrixform um, erhält man das Produkt:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Führt man die Multiplikation durch, erhält man:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Verwandelt man dieses wieder in die Ket-Darstellung, so erhält man:

$$S_z |^{1/2}, -^{1/2}\rangle = \frac{-\hbar}{2} |^{1/2}, -^{1/2}\rangle$$

Was ist mit den Leiteroperatoren S_+ und S_- ? Der Operator S_+ sieht folgendermaßen aus:

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Und der Operator S_- lautet:

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Damit kann man beispielsweise $S_+ |^{1/2}, -^{1/2}\rangle$ berechnen. Die Matrixform lautet:

$$\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Multiplikation ergibt:

$$\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Oder in Ket-Darstellung: $S_+ \mid \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \hbar \mid \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle.$ Super.

Pauli-Spinmatritzen

Oftmals werden die Operatoren S_x , S_y und S_z mithilfe der Pauli-Spinmatritzen σ_x , σ_y und σ_z angegeben. Die Pauli-Spinmatritzen lauten:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Jetzt können Sie die Operatoren S_x , S_y und S_z mithilfe der Pauli-Spinmatritzen ausdrücken:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

Aha! Und damit endet Ihre Betrachtung des Spins.

Das wichtigste von Kapitel 7 noch einmal in Kürze

Der Spin ist eine quantenmechanische Eigenschaft aller Teilchen, die 1922 beim Stern-Gerlach-Versuch erstmals an Elektronen entdeckt wurde. Auch alle anderen Elementarteilchen haben einen Spin mit einem unveränderlichen Betrag. Für alle fundamentalen Teilchen kann der Spin nur einen von zwei verschiedenen Werten haben, die als Vielfaches des Planckschen Wirkungsquantums angegeben werden.

✓ $s = \frac{1}{2} \hbar$: Das gilt für alle Fermionen wie Elektronen, Neutrinos und Quarks.

✓ $s = 1 \hbar$: Das gilt für alle Bosonen wie Photonen, W- und Z-Bosonen.

Der Spin der Elementarteilchen ist von grundlegender Bedeutung für die gesamte Physik. Er spielt sowohl beim Aufbau der Materie als auch bei der Festlegung ihrer makroskopischen Eigenschaften eine fundamentale Rolle.

Da der zum Spin gehörende Operator $S = (S_x, S_y, S_z)$ denselben Vertauschungsrelationen wie der zum Bahndrehimpuls gehörende Operator $L = (L_x, L_y, L_z)$ gehorcht, gelten für den Spin auch alle anderen allgemeinen Regeln des quantenmechanischen Bahndrehimpulses. Somit ist auch sichergestellt, dass nur S_z und S^2 als simultane Beobachtungswerte auftreten. Der Unterschied zum Bahndrehimpulsoperator besteht nur darin, dass jetzt auch ein halbzahliger Wert der Quantenzahl möglich ist. Um die algebraischen Beziehungen übersichtlich zu formulieren, verwendet man im Allgemeinen die von Wolfgang Pauli eingeführten Spinoperatoren σ_x , σ_y und σ_z . Sie sind folgendermaßen definiert:

$$S_i = \frac{1}{2} \hbar \sigma_i \quad \text{für} \quad i = x, y, z$$

Verwendet man die Matrix-Darstellung, so tragen die Spinoperatoren den Namen Pauli-Matrizen.

Teil IV

Die Quantenphysik wird dreidimensional

In diesem Teil ...

Die bisherige Darstellung beschäftigte sich vorwiegend mit Teilchen in eindimensionalen Systemen. In diesem Teil wird die Beschreibung auf drei Dimensionen ausgeweitet, was der wirklichen Welt entspricht. Sie werden die Quantenphysik in dreidimensionalen Koordinatensystemen kennenlernen – entweder rechtwinkligen oder Kugelkoordinaten. Damit werden die Grundlagen für die Behandlung von Elektronen in einem Atom gelegt.

Rechtwinklige Koordinaten: Lösen von Problemen in drei Dimensionen

In diesem Kapitel ...

- ▶ Schrödinger-Gleichung in den Dimensionen x, y und z
- ▶ Freie Teilchen im Dreidimensionalen
- ▶ Rechtwinklige Potentiale
- ▶ Der harmonische Oszillator im Dreidimensionalen

In den Kapiteln 4 und 5 wurde die Schrödinger-Gleichung für charakteristische eindimensionale Potentiale gelöst. Auf diese Weise haben Sie sowohl einige typische Effekte der Quantenmechanik kennen gelernt als auch die Herangehensweise an ein quantenmechanisches Problem eingeübt.

In diesem sowie in den folgenden Kapiteln wird die Betrachtung auf die »reale Quantenwelt« ausgedehnt, die genau wie die klassische dreidimensional ist. Bevor Sie in Kapitel 9 Probleme bearbeiten, die sich viel einfacher lösen lassen, wenn man Kugelkoordinaten verwendet, werden in diesem Kapitel zunächst Aufgaben behandelt, die sich am besten in den herkömmlichen kartesischen Koordinaten lösen lassen. Das bedeutet, im folgenden werden die Ihnen bereits bekannten Beispiele eines freien Teilchens, eines Teilchens in einem rechtwinkligen Kastenpotential und in einem harmonischen Oszillator im dreidimensionalen Raum behandelt.

Bei der Lösung mehrdimensionaler Probleme spielt der Separationsansatz, den Sie bereits bei der Bestimmung der Eigenfunktionen des Drehimpulses in Kapitel 6 angewendet haben, eine entscheidende Rolle. Mithilfe des *Separationsansatzes* oder *Produktansatzes* kann man eine partielle Differentialgleichung mit mehreren Variablen oftmals einfach lösen. Dabei nimmt man an, dass sich die Lösung durch ein Produkt der Form $\psi(x, y) = Y(y) \cdot X(x)$ darstellen lässt. Setzt man die separierten Funktionen bzw. ihre Ableitungen in die Ausgangsfunktion ein, erhält man eine Gleichung, die sich in zwei gewöhnliche Differentialgleichungen aufspalten lässt. Diese löst man dann auf die bekannte Weise unter Verwendung der Randbedingungen.

Im folgenden Abschnitt wird erläutert, wie man die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung in kartesischen mithilfe des Separationsansatzes in drei unabhängige Schrödinger-Gleichungen aufspalten kann, je eine für jede Koordinate.

Die Schrödinger-Gleichung: Jetzt in 3D-Qualität!

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung in einer Dimension (die Sie in den Kapiteln 3 und 4 benutzt haben, um die Wellenfunktion zu bestimmen) lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

Man kann sie für den dreidimensionalen Fall wie folgt verallgemeinern:

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) \end{aligned}$$

Verwendet man den Laplace-Operator, so kann man die Gleichung etwas übersichtlicher formulieren. Der Laplace-Operator lautet:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \nabla^2$$

Wenn man den Laplace-Operator verwendet, so lautet die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t)$$

Um die Gleichung zu lösen, trennt man den zeitabhängigen Teil der Wellenfunktion ab:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar}$$

Im Folgenden ist $\psi(x, y, z)$ die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung und E die Energie:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

So weit, so gut. Aber jetzt sind Sie wohl gegen eine Wand gelaufen – da es im Allgemeinen nicht einfach ist, mit dem Ausdruck $\nabla^2 \psi(x,y,z)$ zu arbeiten, ist die aktuelle Gleichung tatsächlich nur schwer zu lösen.

Was können Sie also machen? Sie können zunächst den Fall betrachten, dass die Gleichung *separierbar* ist. Das heißt, Sie können die x-, y- und z-Abhängigkeit voneinander abspalten und die Lösungen für jede Dimension getrennt bestimmen. Im Fall der Trennung der Dimensionen ist das Potential $V(x,y,z)$ also die Summe aus den Potentialen von x, y und z:

$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$$

Jetzt kann man den Hamilton-Operator in der Gleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \cdot \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad \text{in die drei}$$

Hamilton-Operatoren H_x , H_y und H_z unterteilen:

$$(H_x + H_y + H_z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Dabei ist:

$$\checkmark \quad H_x = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x)$$

$$\checkmark \quad H_y = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y)$$

$$\checkmark \quad H_z = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z)$$

Wenn man den Hamilton-Operator wie in der Gleichung

$(H_x + H_y + H_z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$ aufteilt, so kann man auch die Wellenfunktion teilen, die diese Gleichung löst. Man kann sie in drei Teile separieren, einen für x, einen für y und einen für z:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

Das macht das Leben deutlich einfacher, da man den Hamilton-Operator in drei Operatoren unterteilen kann, die aufsummiert werden:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x) \right) \\ & + \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_y(y) \right) \\ & + \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \right) \\ & = E \end{aligned}$$

Die Gesamtenergie E ist jetzt die Summe aus der x-Komponente, der y-Komponente und der z-Komponente der Energie:

$$E = E_x + E_y + E_z$$

Man erhält somit in drei Dimensionen drei unabhängige Schrödinger-Gleichungen:

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + V_x(x) X(x) = E_x X(x)$$

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) + V_y(y) Y(y) = E_y Y(y)$$

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) + V_z(z) Z(z) = E_z Z(z)$$

Dieses System von unabhängigen Differentialgleichungen ist mit Sicherheit einfacher zu

lösen als $(H_x + H_y + H_z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$. Sie haben also im Wesentlichen die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung in drei eindimensionale Schrödinger-Gleichungen verwandelt. Das macht das Lösen von 3D-Aufgaben schließlich möglich.

Freie Teilchen im Dreidimensionalen

Betrachten Sie das freie Teilchen im Dreidimensionalen in Abbildung 8.1.

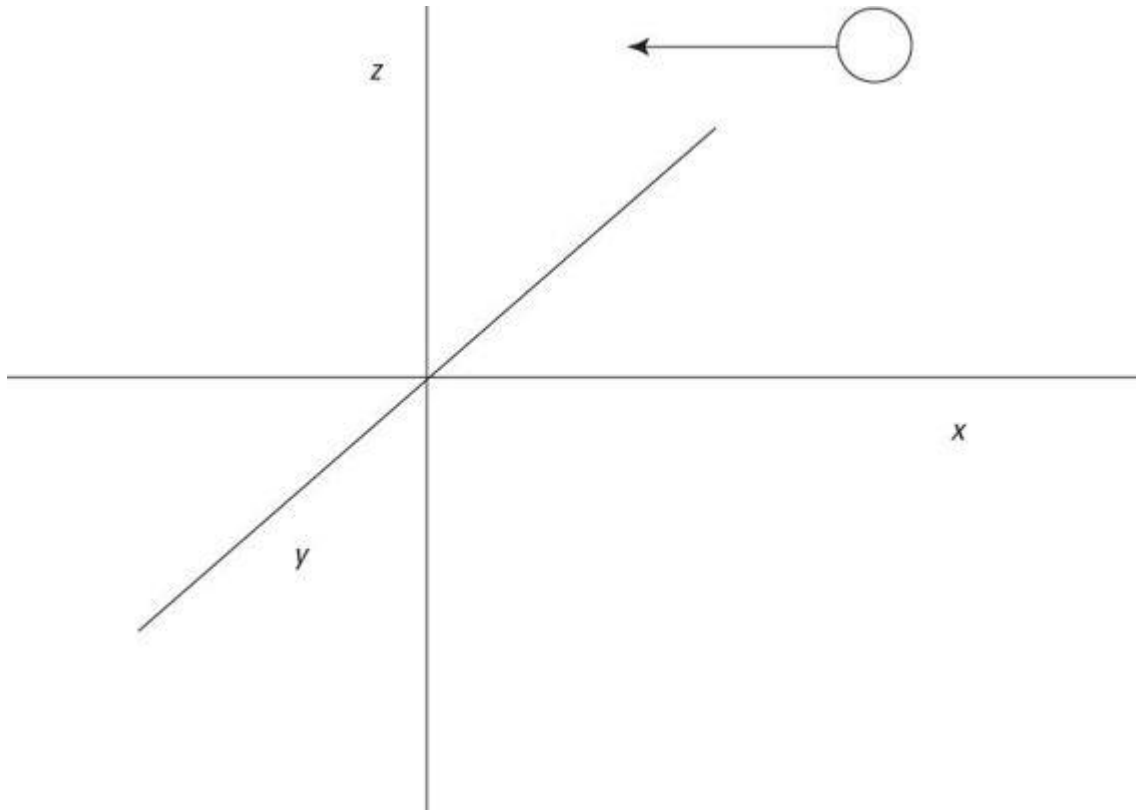


Abbildung 8.1: Ein freies Teilchen im Dreidimensionalen

Da das Teilchen sich frei bewegt, gilt $V(x) = V(y) = V(z) = 0$. Damit erhalten die drei unabhängigen Schrödinger-Gleichungen, die im letzten Abschnitt zur Lösung dreidimensionaler Probleme hergeleitet wurden, folgendes Aussehen:

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = E_x X(x)$$

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = E_y Y(y)$$

$$✓ \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = E_z Z(z)$$

Drückt man diese Gleichungen mithilfe der Wellenzahl k aus, wobei $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ gilt, so erhält man folgende Gleichungen:

$$✓ \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x)$$

$$✓ \quad \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y)$$

$$✓ \quad \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = -k_z^2 Z(z)$$

In den folgenden Abschnitten finden Sie die Lösungen dieser drei Gleichungen, bestimmen die Gesamtenergie und fügen die Zeitabhängigkeit hinzu.

Die Gleichungen für x , y und z

Zunächst wird die x -Richtung betrachtet: $\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x)$. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet:

$$X(x) = Ae^{ik_x x}$$

Dies beschreibt eine ebene Welle. Normalisieren der Gleichung (wie in Kapitel 3 diskutiert) ergibt Folgendes:

$$X(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ik_x x}$$

Die Gleichungen für die y - und z -Komponente haben die gleiche Form:

$$Y(y) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ik_y y}$$

$$Z(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ik_z z}$$

Da $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$, erhält man für $\psi(x, y, z)$:

$$\begin{aligned}\psi(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}\end{aligned}$$

In der Klammer im Exponenten steht das Skalarprodukt der Vektoren $\mathbf{k}$ und $\mathbf{r}$: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$. Wenn der Vektor $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ ist und der Vektor $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$, so ist das Skalarprodukt von $\mathbf{a}$ und $\mathbf{b}$: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = (a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z)$. Damit folgt für $\psi(x, y, z)$:

$$\psi\left(x,y,z\right)=\frac{1}{\left(2\pi\right)^{\frac{3}{2}}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Bestimmung der Gesamtenergie

Die Gesamtenergie des freien Teilchens ist die Summe der Energien in den drei Dimensionen:

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}.$$

Für ein freies Teilchen ist die x-Komponente der Wellenfunktion Diese Gleichung gilt entsprechend auch für die y- und die z-Komponente, sodass für die Gesamtenergie des Teilchens Folgendes gilt:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \end{aligned}$$

Dabei ist $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ das Quadrat des Betrages von $\mathbf{k}$; also $|\mathbf{k}|^2$. Daher lautet die Gleichung für die Gesamtenergie:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2$$



Man beachte folgendes: Da E eine Konstante ist, sind die Eigenfunktionen von

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x) \quad , \quad \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y)$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = -k_z^2 Z(z)$$

unabhängig davon, wo das Teilchen sich befindet, unendlich entartet, wenn man k_x , k_y und k_z verändert. Egal, wo sich das Teilchen befindet, es besitzt stets die gleiche Energie.

Zeitabhängigkeit führt zu einer physikalischen Lösung

Man kann die Zeitabhängigkeit zur Lösung von $\psi(x, y, z)$ hinzufügen und erhält $\psi(x, y, z, t)$, wenn man sich daran erinnert, dass $\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar}$. Damit erhält man für $\psi(x, y, z, t)$:

$$\psi(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - Et/\hbar)}$$

Da $\omega = E/\hbar$ gilt, kann man auch Folgendes schreiben:

$$\psi(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

Da nun auf der rechten Seite der Gleichung der Ortsvektor $\mathbf{r}$ steht, kann man die linke Seite entsprechend schreiben:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

Das ist die Lösung der Schrödinger-Gleichung, aber sie ist unphysikalisch (wie dies schon für die eindimensionale Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen in Kapitel 3 diskutiert wurde). Warum? Versucht man beispielsweise diese Gleichung für drei Dimensionen zu normalisieren, erhält man Folgendes:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}, t) \psi^*(\mathbf{r}, t) d^3r \\ = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \rightarrow \infty \end{aligned}$$

wobei C eine Konstante ist.

Demzufolge divergiert das Integral und man kann $\psi(\mathbf{r}, t)$, so wie es hier steht, nicht normalisieren. Was macht man also, um eine sinnvolle Lösung zu erhalten?



Der Schlüssel zur Lösung dieses Problems liegt in folgender Erkenntnis: Kennt man einige Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so ist auch jede Linearkombination dieser Lösungen wieder eine Lösung. Mit anderen Worten, man addiert verschiedene Wellenfunktionen, so dass man ein Wellenpaket erhält, das eine Sammlung von Wellenfunktionen der Form $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ ist und folgende Bedingungen erfüllt:

- ✓ Die Wellenfunktionen interferieren an einem Ort konstruktiv.
- ✓ Sie interferieren destruktiv (gehen gegen null) an allen anderen Orten.

Betrachten Sie die zeitunabhängige Form:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}}$$

Allerdings sind bei einem freien Teilchen die Energiezustände nicht in diskrete Bänder unterteilt. Die möglichen Energien sind kontinuierlich, sodass man die Summe als Integral schreibt:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 k$$

Was ist $\phi(\mathbf{k})$? Es ist das dreidimensionale Analogon von $\phi(k)$, das in Kapitel 3 erläutert wurde; es stellt die Amplitude von jeder Komponente der Wellenfunktion dar. Man kann $\phi(\mathbf{k})$ durch die Fourier-Transformation von $\psi_1(x) = Ae^{i\tilde{k}_1 x} + Be^{-i\tilde{k}_1 x}$ (mit $x < 0$) bestimmen:

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 r$$

In der Praxis können Sie $\phi(\mathbf{k})$ selber wählen. Betrachten Sie zum Beispiel die folgende Form von $\phi(\mathbf{k})$, die ein Gaußssches Wellenpaket beschreibt (Man beachte: der exponentielle Teil ist für die Gauss'sche Wellenform verantwortlich):

$$\phi(\mathbf{k}) = A \exp\left(\frac{-a^2 \mathbf{k}^2}{4}\right)$$

Dabei sind a und A Konstanten. Um A zu bestimmen, kann man zunächst $\phi(\mathbf{k})$ normalisieren. Das geht folgendermaßen:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(\mathbf{k})|^2 d^3 k$$

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-a^2}{2} \mathbf{k}^2\right) d^3 k$$

Die Lösung des Integrals ergibt:

$$1 = |A|^2 \left(\frac{2\pi}{a^2}\right)^{3/2}$$

$$A = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{3/4}$$

Somit folgt für die Wellenfunktion:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{3/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{-a^2}{4} \mathbf{k}^2\right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3 k$$

Man kann diese Gleichung entwickeln und erhält dann die Darstellung der zeitunabhängigen Wellenfunktion für ein Gauss'sches Wellenpaket im Dreidimensionalen:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{3/4} \exp\left(\frac{-\mathbf{r}^2}{a^2}\right)$$

So sieht es also aus, wenn $V(\mathbf{r}) = 0$ gilt. Aber können Sie auch solche Aufgaben lösen, wo $V(\mathbf{r})$ nicht null ist? Natürlich können Sie das. Lesen Sie einfach den nächsten Abschnitt.

Dreidimensionale rechtwinklige Potentiale

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dreidimensionalen Kastenpotentialen; Abbildung 8.2 zeigt die Darstellung eines solchen Potentials. Nun sollen die Wellenfunktionen und die Energieniveaus für diesen Fall bestimmt werden.

Innerhalb des Kastens soll $V(x, y, z) = 0$ gelten, außerhalb $V(x, y, z) = \infty$. Man hat somit folgendes Potential:

$$V(x, y, z) = 0, \text{ wenn } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z$$

$$\infty, \text{ sonst}$$

Teilt man $V(x,y,z)$ in $V_x(x)$, $V_y(y)$ und $V_z(z)$, so erhält man:

✓ $V_x(x) = 0, \text{ wenn } 0 < x < L_x$
 $\infty, \text{ sonst}$

✓ $V_y(y) = 0, \text{ wenn } 0 < y < L_y$
 $\infty, \text{ sonst}$

✓ $V_z(z) = 0, \text{ wenn } 0 < z < L_z$
 $\infty, \text{ sonst}$

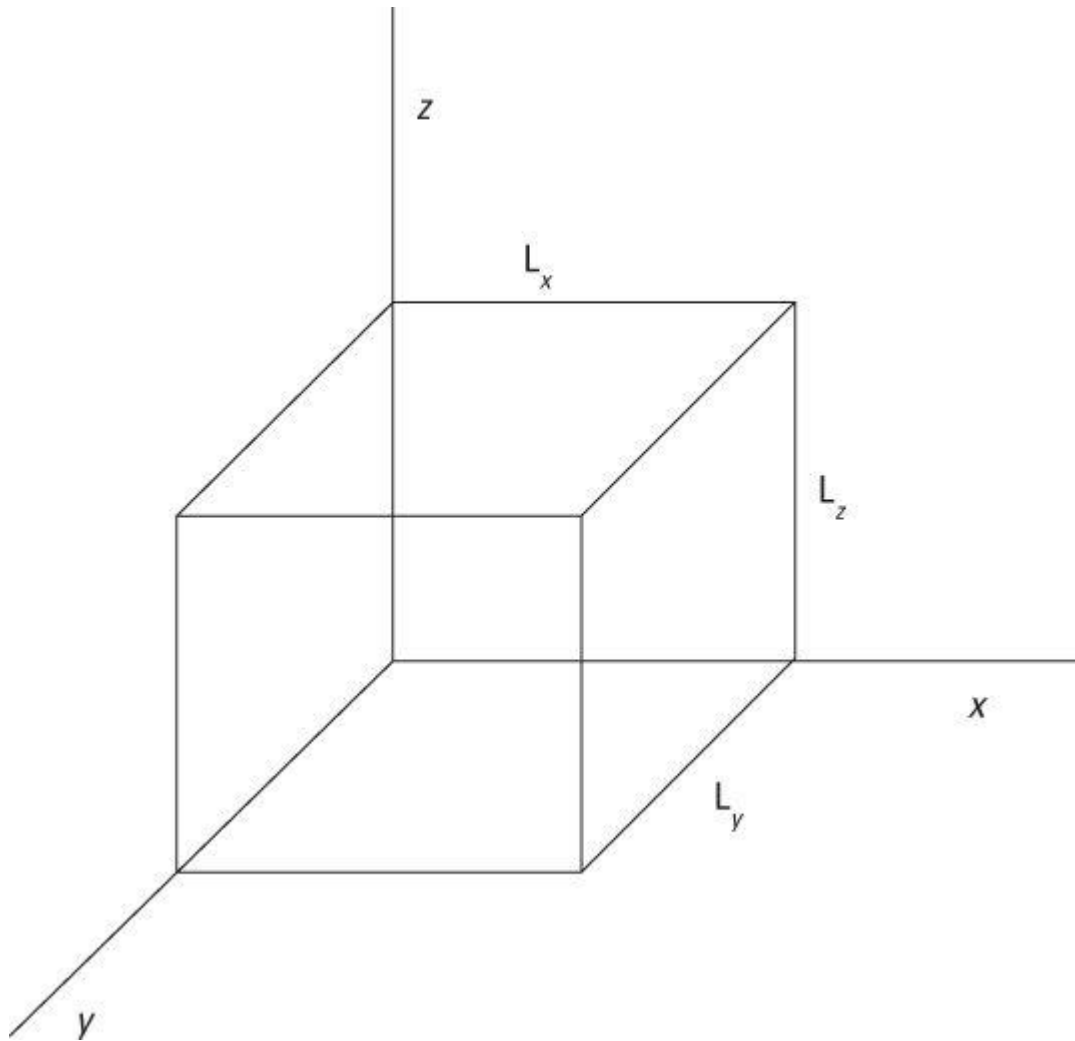


Abbildung 8.2: Ein dreidimensionales Kastenpotential

Okay, da das Potential an den Wänden des Kastens gegen unendlich geht, muss die Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$ an diesen Stellen gegen null gehen; das sind die Randbedingungen. Im Dreidimensionalen sieht die Schrödinger-Gleichung folgendermaßen aus:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Schreibt man das aus, so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Im Folgenden wird jede Dimension getrennt betrachtet. Da das Potential separierbar ist, kann man $\psi(x, y, z)$ in der Form $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ schreiben. Innerhalb des Kastens ist das Potential null, und die Schrödinger-Gleichung für x , y und z lautet somit:

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = E_x X(x)$$

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = E_y Y(y)$$

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = E_z Z(z)$$

Im nächsten Schritt drückt man diese Gleichungen mithilfe der Wellenzahl k aus. Da

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{gilt, erhält man folgende Gleichungen:}$$

$$\checkmark \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x)$$

$$\checkmark \quad \frac{\partial^2}{\partial y^2} Y(y) = -k_y^2 Y(y)$$

$$\checkmark \quad \frac{\partial^2}{\partial z^2} Z(z) = -k_z^2 Z(z)$$

Zunächst wird die Gleichung für x betrachtet. Sie haben also eine Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x).$$

zweiter Ordnung zu behandeln:

Lösungen dieser Gleichung lauten:

Die beiden unabhängigen

$$\checkmark \quad X_1(x) = A \sin(k_x x)$$

$$✓ \quad X_2(x) = B \cos(k_x)$$

wobei A und B noch zu bestimmen sind.

Die allgemeine Lösung von $\frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) = -k_x^2 X(x)$ ist somit die Summe aus den beiden Gleichungen oben:

$$X(x) = A \sin(kx) + B \cos(k_x)$$

Großartig. Jetzt können Sie die Energieniveaus bestimmen.

Die Energieniveaus bestimmen

Um die Energieniveaus eines Teilchens in einem Kastenpotential bestimmen zu können, benötigt man einen genauen Wert von $X(x)$, der nicht durch die Konstanten A und B ausgedrückt ist. Man muss die Randbedingungen benutzen, um A und B zu berechnen. Wie lauten diese Randbedingungen? Die Wellenfunktion muss an den Wänden des Kastens verschwinden, also ist:

$$\checkmark \quad X(0) = 0$$

$$\checkmark \quad X(L_x) = 0$$

Da $X(0) = 0$ ist, muss B gleich 0 sein, da $\cos(0) = 1$. Und weil $X(L_x) = 0$ ist, ist $X(L_x) = A \sin(k_x L_x) = 0$. Da der Sinus 0 ist, wenn sein Argument ein Vielfaches von π ist, bedeutet das:

$$k_x L_x = n_x \pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x}$$

$$\text{Und weil } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ gilt, folgt:}$$

$$\frac{2mE_x}{\hbar^2} = \frac{n_x^2 \pi^2}{L_x^2} \quad n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_x = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2}$$

Das ist die Energie der x-Komponente der Wellenfunktion, entsprechend den Quantenzahlen 1, 2, 3 und so weiter. Die Gesamtenergie eines Teilchens der Masse m innerhalb

$$E_x = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2}$$

eines Kastenpotentials ist $E = E_x + E_y + E_z$. Analog zu und E_z folgende Ausdrücke:

ergeben sich für E_y

$$E_y = \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2} \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_z = \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_z^2} \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Somit folgt für die Gesamtenergie $E = E_x + E_y + E_z$ des Teilchens:

$$\begin{aligned} E = & \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2} \quad n_x = 1, 2, 3, \dots \\ & + \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2} \quad n_y = 1, 2, 3, \dots \\ & + \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_z^2} \quad n_z = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Damit haben Sie also die Gesamtenergie eines Teilchens in einem Kastenpotential berechnet.

Die Wellenfunktion normalisieren

Was ist mit der Normalisierung der Wellenfunktion $\psi(x, y, z)$? In x-Richtung erhält man für die Wellenfunktion:

$$X(x) = A \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right)$$

Die Wellenfunktion ist somit eine Sinus-Welle, die bei $x = 0$ und $x = L_x$ null wird. Die Wellenfunktion sollte außerdem wie folgt normalisiert sein:

$$1 = \int_0^{L_x} |X(x)|^2 dx$$

Indem man die Wellenfunktion normalisiert, kann man die Konstante A berechnen. Setzt man $X(x)$ in dieser Gleichung ein, so erhält man:

$$1 = |A|^2 \int_0^{L_x} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) dx$$

$$\int_0^{L_x} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) dx = \frac{L_x}{2}$$

$$1 = |A|^2 \int_0^{L_x} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) dx$$

$$1 = |A|^2 \frac{L_x}{2}$$

Deshalb folgt aus
Folglich gilt für A:

die Gleichung

$$A = \left(\frac{2}{L_x}\right)^{1/2}$$

Jetzt kennt man die Konstante A und kann $X(x)$ hinschreiben:

$$X(x) = \left(\frac{2}{L_x}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \quad n_x = 1, 2, 3, \dots$$

Anschließend kann man $\psi(x, y, z)$ berechnen und dazu die Wellenfunktion in drei Teilspalten:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

Analog zu $X(x)$ lässt sich auch $Y(y)$ und $Z(z)$ bestimmen:

$$Y(y) = \left(\frac{2}{L_y} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y} \right) \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$Z(z) = \left(\frac{2}{L_z} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z} \right) \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Damit erhält man für $\psi(x, y, z)$:

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{8}{L_x L_y L_z} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x} \right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y} \right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z} \right)$$

mit $n_x = 1, 2, 3, \dots, n_y = 1, 2, 3, \dots, n_z = 1, 2, 3, \dots$

Das ist eine besonders lange Wellenfunktion. Wenn man mit einem Kastenpotential rechnet, gilt für die Energie:

$$E = \frac{n_x^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2} \quad n_x = 1, 2, 3, \dots$$

$$+ \frac{n_y^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2} \quad n_y = 1, 2, 3, \dots$$

$$+ \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL_z^2} \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Würfelförmiges Potential

Ein besonders einfaches ist ein würfelförmiges. Das bedeutet $L = L_x = L_y = L_z$. In diesem Fall erhält man folgende Gleichung für die Energie:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x + n_y + n_z)$$

mit $n_x = 1, 2, 3, \dots, n_y = 1, 2, 3, \dots, n_z = 1, 2, 3, \dots$

Für den Grundzustand gilt $n_x = n_y = n_z = 1$; die Energie des Grundzustands E_{111} ist demzufolge:

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Man beachte, dass die Energie bei dieser Form des Potentials entartet ist. Betrachten Sie beispielsweise folgende Energien:

✓ $E_{211} (n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1) = \frac{6\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

✓ $E_{121} (n_x = 1, n_y = 2, n_z = 1) = \frac{6\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

✓ $E_{112} (n_x = 1, n_y = 1, n_z = 2) = \frac{6\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Demzufolge ist $E_{211} = E_{121} = E_{112}$, was bedeutet, dass der erste angeregte Zustand dreifach entartet ist – entsprechend den drei Dimensionen.



Im Allgemeinen gilt: Weist ein physikalisches Problem eine Symmetrie auf (wie es beim Würfel der Fall ist), so liegt Entartung vor.

Die Wellenfunktion für ein würfelförmiges Potential ist somit leichter zu handhaben als die Wellenfunktion für ein beliebiges Kastenpotential (bei dem die Seiten unterschiedlich lang sind). Die Wellenfunktion für ein würfelförmiges Potential lautet:

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{8}{L^3}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

mit $n_x = 1, 2, 3, \dots, n_y = 1, 2, 3, \dots, n_z = 1, 2, 3, \dots$

Die Wellenfunktion $\psi_{111}(x, y, z)$ für den Grundzustand ($n_x = n_y = n_z = 1$) lautet beispielsweise:

$$\psi_{111}(x, y, z) = \left(\frac{8}{L^3}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

Für $\psi_{211}(x, y, z)$ gilt:

$$\psi_{211}(x, y, z) = \left(\frac{8}{L^3}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

Und für $\psi_{121}(x, y, z)$:

$$\psi_{121}(x, y, z) = \left(\frac{8}{L^3}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{L}\right)$$

Der dreidimensionale harmonische Oszillator

Abbildung 8.3 zeigt einen eindimensionalen harmonischen Oszillator (der in Kapitel 4 ausführlich besprochen wurde), wobei eine Rückstellkraft auf das Teilchen wirkt, hier dargestellt durch eine Feder.

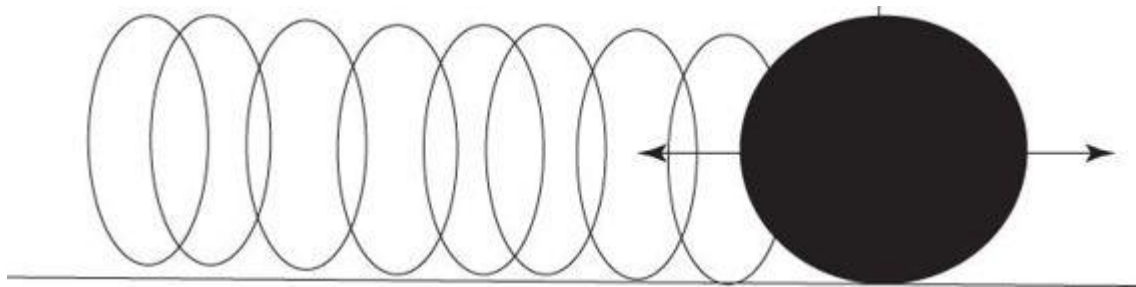


Abbildung 8.3: Ein harmonischer Oszillator

In einer Dimension wird die rücktreibende Kraft durch $F_x = -k_x x$ beschrieben, wobei k_x die Proportionalität zwischen der auf das Teilchen wirkenden Kraft und der Auslenkung beschreibt. Die potentielle Energie des Teilchens ist eine Funktion des Ortes: $V(x) = \frac{1}{2} k_x x^2$. Das kann man auch folgendermaßen ausdrücken:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2$$

wobei $\omega_x^2 = \frac{k_x}{m}$ gilt.

In diesem Abschnitt wird der harmonische Oszillator in drei Dimensionen betrachtet. Das Potential lautet in diesem Fall wie folgt:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2$$

mit $\omega_x^2 = \frac{k_x}{m}, \omega_y^2 = \frac{k_y}{m}, \omega_z^2 = \frac{k_z}{m}$.

Da man das Potential kennt, kann man die Schrödinger-Gleichung betrachten:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Setzt man das Potential $V(x, y, z)$ ein, so erhält man folgende Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + \left(\frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Das kann man Dimension für Dimension lösen. Da man das Potential aufspalten kann, kann man $\psi(x, y, z)$ als $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ schreiben. Deshalb lautet die Schrödinger-Gleichung für x :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 X(x) = E_x X(x)$$

Sie haben diese Gleichung bereits in Kapitel 4 gelöst und dabei folgende Lösung erhalten:

$$X(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} (2^{n_x} n_x! x_0)^{1/2}} H_{n_x} \left(\frac{x}{x_0} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{2x_0^2} \right)$$

$$x_0 = \left(\frac{\hbar}{m \omega_x} \right)^{1/2}$$

Dabei ist $n_x = 1, 2, 3$ und so weiter. H_n bezeichnet die Hermite'schen Polynome, die folgendermaßen lauten:

✓ $H_0(x) = 1$

✓ $H_1(x) = 2x$

✓ $H_2(x) = 4x^2 - 2$

✓ $H_3(x) = 8x^3 - 12x$

✓ $H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$

✓ $H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$

Somit lässt sich die Wellenfunktion in folgender Form schreiben:

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\pi^{3/4}} \frac{H_{n_x}\left(\frac{x}{x_0}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)}{\left(2^{n_x} n_x! x_0\right)^{1/2}} \frac{H_{n_y}\left(\frac{y}{y_0}\right) \exp\left(-\frac{y^2}{2y_0^2}\right)}{\left(2^{n_y} n_y! y_0\right)^{1/2}} \times \frac{H_{n_z}\left(\frac{z}{z_0}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{2z_0^2}\right)}{\left(2^{n_z} n_z! z_0\right)^{1/2}}$$

Das ist eine relativ einfache Darstellung einer Wellenfunktion; sie ist nur möglich, weil man das Potential für die drei Dimensionen getrennt betrachten kann.

Wie sieht nun die Energie des harmonischen Oszillators aus? Die Energie eines

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

eindimensionalen harmonischen Oszillators ist durch gegeben.
Entsprechend ergibt sich die Energie des dreidimensionalen harmonischen Oszillators:

$$E = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z$$

Betrachtet man einen isotropen harmonischen Oszillator, für den $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ gilt, so erhält man für die Energie:

$$E = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega$$

Genau wie beim quadratischen Potential ist die Energie eines dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators entartet. Beispielsweise ist $E_{112} = E_{121} = E_{211}$. Es ist sogar möglich, dass er mehr als dreifach entartet ist – zum Beispiel ist $E_{200} = E_{020} = E_{002} = E_{110} = E_{101} = E_{011}$.



Im Allgemeinen gilt für die Entartung eines dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators:

$$\text{Entartung} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

Dabei ist $n = n_x + n_y + n_z$.

Das wichtigste von Kapitel 8 noch einmal in Kürze

Zu Beginn dieses Kapitels wurde erläutert, wie man die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung in kartesischen Koordinaten in drei eindimensionale Schrödinger-Gleichungen umwandeln kann. Im Anschluss daran wurde anhand einfacher Beispiele gezeigt, dass sich das Energiespektrum und die Wellenfunktion in diesem Fall auf dieselbe Art und Weise bestimmen lassen wie bei den eindimensionalen Beispielen in den Kapiteln 4 und 5. Die Ergebnisse lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

✓ Die zeitunabhängige Wellenfunktion für ein Gaussssches Wellenpaket lautet:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{3/4} \exp\left(\frac{-\mathbf{r}^2}{a^2} \right)$$

✓ Die Wellenfunktion für ein dreidimensionales Kastenpotential mit den Abmessungen L_x , L_y und L_z lautet:

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{8}{L_x L_y L_z} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x} \right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y} \right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z} \right)$$

mit $n_x = 1, 2, 3, \dots, n_y = 1, 2, 3, \dots, n_z = 1, 2, 3, \dots$

✓ Die Wellenfunktion für ein würfelförmiges Potential vereinfacht sich zu:

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{8}{L^3} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L} \right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L} \right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L} \right)$$

mit $n_x = 1, 2, 3, \dots, n_y = 1, 2, 3, \dots, n_z = 1, 2, 3, \dots$

✓ Die Wellenfunktion für den eindimensionalen harmonischen Oszillator lässt sich dementsprechend auf drei Dimensionen ausdehnen. Die Darstellung enthält ebenso wie im eindimensionalen Raum die aus Kapitel 5 bekannten Hermiteischen Polynome.

✓ Für die Gesamtenergie E gilt jeweils $E = E_x + E_y + E_z$.

Sowohl im Fall des würfelförmigen Potentials als auch beim harmonischen Oszillator ist die Energie entartet. Das bedeutet, dass zwei oder mehr Zustände zur selben Energie gehören (beim würfelförmigen Potential gilt beispielsweise $E_{211} = E_{121} = E_{112}$) können. Man bezeichnet die Anzahl unabhängiger Lösungen zum gleichen Energieeigenwert als *Entartungsgrad* n . Eine n -fache Entartung liegt somit vor, wenn n Zustände dieselbe Energie besitzen. Die Ursache für eine Entartung ist generell eine Symmetrie des betrachteten physikalischen Systems. Wie in Kapitel 10 gezeigt wird, sind beim Wasserstoffatom alle Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl

entartet.

Probleme in drei Dimensionen: Kugelkoordinaten

In diesem Kapitel ...

- ▶ Problemstellungen in Kugelkoordinaten
- ▶ Freie Teilchen in Kugelkoordinaten
- ▶ Sphärisch-symmetrische Potentialtöpfe
- ▶ Isotrope harmonische Oszillatoren

Bei der Behandlung dreidimensionaler quantenmechanischer Probleme zeigt sich sehr schnell, dass die Verwendung kartesischer Koordinaten nicht immer der sinnvollste Weg ist, um eine Aufgabe zu lösen. Daher ist es manchmal notwendig, zu anderen Koordinatensystemen überzugehen. Auch diesen Vorgang kennen Sie bereits aus der klassischen Physik: Wenn Sie von Translationsbewegungen zur Rotation übergehen, wechseln Sie ebenfalls die Betrachtungsweise. Bei der Beschreibung linearer Bewegungen verwendet man die Größen Ort, Geschwindigkeit und Beschleunigung (also kartesische Koordinaten); betrachtet man dagegen Kreisbewegungen, so ist es sinnvoll, die Größen Winkel, Winkelgeschwindigkeit und Winkelbeschleunigung einzusetzen, also die Rotationssymmetrie auszunutzen.

Das gleiche Prinzip gilt auch in der Quantenmechanik: Betrachtet man ein Teilchen, das in einem Potential eingeschlossen ist, das Kugelsymmetrie besitzt, so sollte man zu Kugelkoordinaten übergehen.

Da bei der Behandlung des Drehimpulses in Kapitel 6 bereits Kugelkoordinaten verwendet wurden und Sie demzufolge schon Erfahrung im Umgang mit dieser Art von Koordinatensystem gesammelt haben, folgt an dieser Stelle nur eine kurze Wiederholung der wichtigsten Begriffe.

Zentralpotentiale im Dreidimensionalen

Abbildung 9.1 zeigt das Kugelkoordinatensystem mit den entsprechenden rechtwinkligen Koordinaten x , y und z . Der Ort eines Teilchens wird in Kugelkoordinaten durch den Radiusvektor $\mathbf{r}$ beschrieben, der aus drei Komponenten besteht:

- ✓ Die Komponente r gibt die Länge des Radiusvektors an.
- ✓ θ ist der Winkel, den $\mathbf{r}$ mit der z -Achse bildet.
- ✓ φ ist der Winkel zwischen der Projektion von $\mathbf{r}$ auf die x - y -Ebene und der x -Achse.

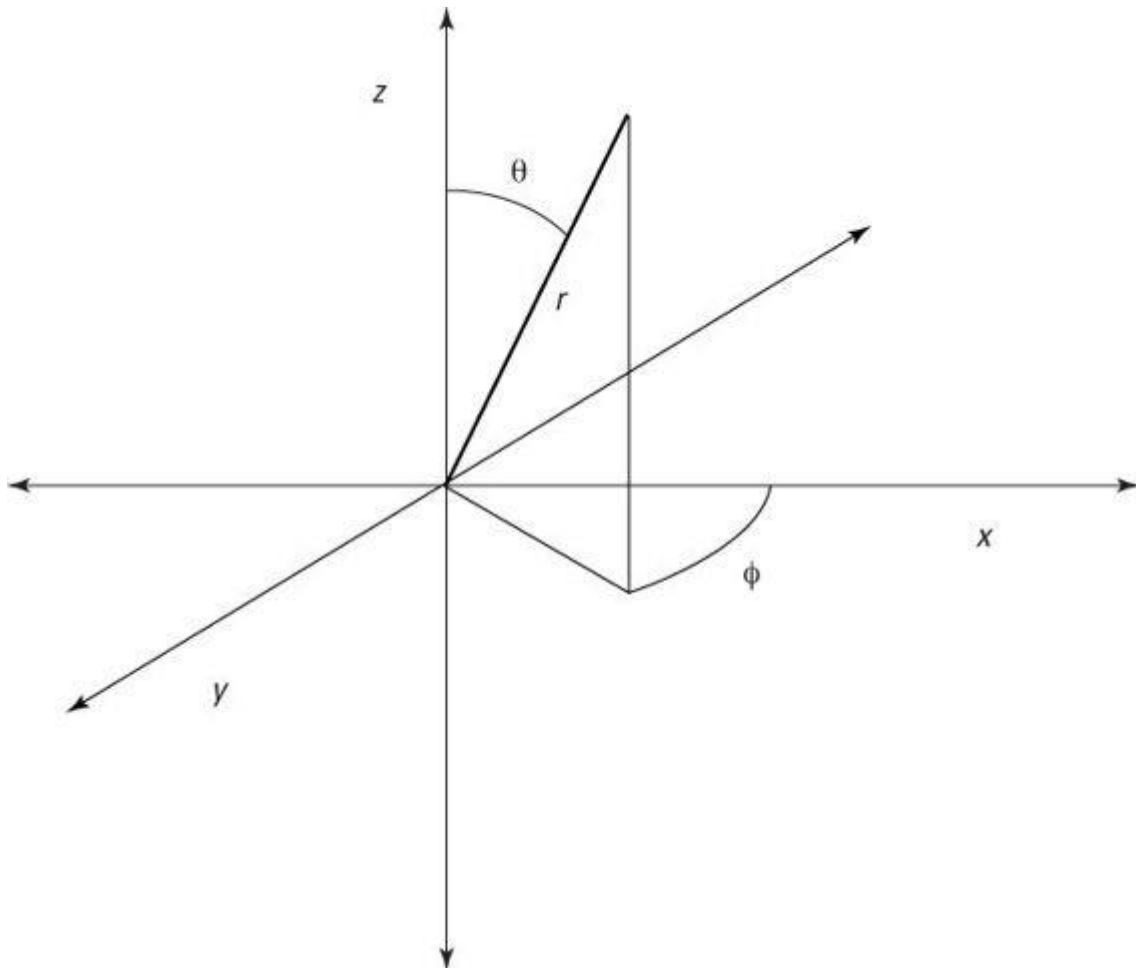


Abbildung 9.1: Das Kugelkoordinatensystem

In diesem Kapitel wird die Bewegung in *Zentralpotentialen* behandelt; das sind kugelförmige symmetrische Potentiale, bei denen $V(\mathbf{r}) = V(r)$ gilt. Das bedeutet, dass das Potential unabhängig von der Richtung des Radiusvektors ist, sondern nur vom Betrag von $\mathbf{r}$ (der

r ist), nicht aber vom Winkel von $\mathbf{r}$ abhängt.

Wenn Sie Probleme mit Zentralpotentialen lösen wollen, so können Sie die Wellenfunktion in einen radialen Teil (der von der Form des Potentials abhängt) und einen Winkelteil trennen, der sphärisch harmonisch ist.

Die Schrödinger-Gleichung zerlegen

Im Dreidimensionalen lautet die Schrödinger-Gleichung wie folgt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

wobei Δ der Laplace-Operator ist (in Kapitel 2 findet man mehr über Operatoren).

In rechtwinkligen Koordinaten lautet der Laplace-Operator:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

In Kugelkoordinaten sieht er ein bisschen anders aus, aber das kann man später vereinfachen. Der sphärische Laplace-Operator lautet:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \mathbf{L}^2$$

Dabei ist $\mathbf{L}^2$ das Quadrat des Bahndrehimpulses:

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Daher lautet die Schrödinger-Gleichung für ein Zentralpotential in Kugelkoordinaten wie folgt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2mr^2} \mathbf{L}^2 \psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$



Betrachten Sie die letzte Gleichung genau. Der erste Term entspricht der *radialen kinetischen Energie*, also der kinetischen Energie des sich in radialer Richtung bewegenden Teilchens. Der zweite Term entspricht der *kinetischen Rotationsenergie* und der dritte der *potentiellen Energie*.

Was können Sie nun über die Lösung dieser Schrödinger-Gleichung sagen? Sie können erkennen, dass der erste Term nur von r abhängt, ebenso wie der dritte. Der zweite Term enthält dagegen $\mathbf{L}^2$. Da Sie die Eigenfunktionen von $\mathbf{L}^2$ bereits in Kapitel 6 bestimmt haben, können Sie

an dieser Stelle folgenden Separationsansatz machen:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Somit kann man die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$ in zwei Teile separieren:

- ✓ Einen radialen Teil.
- ✓ Einen von den Winkeln abhängigen Teil.

Das ist eine besondere Eigenschaft von Problemen mit Zentralpotentialen.

Der winkelabhängige Teil von $\psi(r, \theta, \phi)$

Wenn Sie den winkelabhängigen Teil der Wellenfunktion betrachten, erkennen Sie, dass Sie sich nicht lange mit ihm beschäftigen müssen. Dieser Teil muss eine Eigenfunktion von $\mathbf{L}^2$ sein; diese wurden bereits in Kapitel 6 in dem Abschnitt „Die Eigenfunktionen von $\mathbf{L}^2$ in Kugelkoordinaten“ bestimmt. Bei den Eigenfunktionen handelt es sich um die Ihnen bereits bekannten Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$. (Dabei ist l die Quantenzahl des Drehimpulses und m die seiner z -Komponente.) Die Kugelfunktionen lauten:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad \text{mit } m \geq 0$$

Die ersten normalisierten Kugelfunktionen lauten:

$$✓ \quad Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$✓ \quad Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$✓ \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$✓ \quad Y_{20}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$✓ \quad Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$$

$$✓ \quad Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

So sieht also der winkelabhängige Teil der Wellenfunktion aus: eine Kugelfunktion.

Der radiale Teil von $\psi(r, \theta, \phi)$

Man kann den radialen Teil der Wellenfunktion mit $R_{nl}(r)$ bezeichnen, wobei n eine Quantenzahl ist, die dem Quantenzustand des radialen Teils entspricht, und l die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses. Der radiale Teil ist hinsichtlich der Winkel symmetrisch, somit kann er nicht von der Quantenzahl m der z -Komponente des Drehimpulses abhängen. Die Wellenfunktion für Teilchen in einem Zentralpotential hat also in Kugelkoordinaten folgendes Aussehen:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Im nächsten Schritt soll die allgemeine Lösung für $R_{nl}(r)$ bestimmt werden. Setzt man die obige Gleichung in die Schrödinger-Gleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2mr^2} \mathbf{L}^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

ein, so erhält man:

$$-\hbar^2 \frac{r}{R_{nl}(r)} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + 2mr^2 [V(r) - E] + \frac{\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi)}{Y_{lm}(\theta, \phi)} = 0$$

Wie in Kapitel 6 bereits gezeigt wurde, gilt für die Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ folgende Gleichung:

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Daraus folgt, dass man den letzten Term in der obigen Gleichung durch $l(l+1) \hbar^2$ ersetzen kann. Demzufolge nimmt die obige Gleichung folgende Form an:

$$-\hbar^2 \frac{r}{R_{nl}(r)} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + 2mr^2 [V(r) - E] + \frac{\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi)}{Y_{lm}(\theta, \phi)} =$$

$$-\hbar^2 \frac{r}{R_{nl}(r)} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + 2mr^2 [V(r) - E] + l(l+1) \hbar^2 = 0$$

Auf diese Weise erhält man die *Radialgleichung* für ein Zentralpotential. Sie lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$



Diese Gleichung benutzt man, um $R_{nl}(r)$ zu bestimmen, den radialen Teil der Wellenfunktion. Sie heißt *Radialgleichung* für ein Zentralpotential.

Damit ist das Problem des Zentralpotentials auf ein eindimensionales Problem zurückgeführt. Die Radialgleichung ist eine eindimensionale Schrödinger-Gleichung mit folgendem *effektiven Potential*:

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

Wenn Sie die Radialgleichung lösen, können Sie auch $\psi(r, \theta, \phi)$ berechnen, da Sie die Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ kennen:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Somit reduziert sich dieses Kapitel darauf, eine Lösung für die Radialgleichung zu finden.

Man beachte: Die Radialgleichung ist wirklich eine Differentialgleichung in nur einer Dimension, der r -Richtung. Wenn man also Aufgaben betrachtet, die ein Zentralpotential beinhalten, reduziert sich das allgemeine Problem, die Wellenfunktion eines in einem dreidimensionalen Kugelpotential eingeschlossenen Teilchens zu berechnen, auf eine eindimensionale Differentialgleichung.

Freie Teilchen im Dreidimensionalen in Kugelkoordinaten

Um zu zeigen, wie sich die Radialgleichung lösen lässt (im vorangegangenen Abschnitt wurde die Radialgleichung erläutert), werden in den nächsten beiden Abschnitten verschiedene Zentralpotentiale behandelt. Zuerst betrachten wir freie Teilchen, die in kein Potential eingeschlossen sind.

Die Wellenfunktion hat in Kugelkoordinaten die folgende Form:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Über $Y_{lm}(\theta, \phi)$ wissen Sie Bescheid, denn das sind die Kugelfunktionen. Das Problem besteht nun darin, die Gleichung für den Radialteil $R_{nl}(r)$ zu lösen. Die Radialgleichung lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Für ein freies Teilchen gilt $V(r) = 0$, damit folgt für die Radialgleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Um mit dieser Gleichung weiterzuarbeiten, ersetzt man gewöhnlich kr durch ρ , wobei $k = (2mE_n)^{1/2} / \hbar$ ist, sodass $R_{nl}(r)$ zu $R_l(kr) = R_l(\rho)$ wird. Das bedeutet, dass

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

folgende Form erhält:

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_l(\rho) = 0$$

Sie werden jetzt sicher nicht überrascht sein, wenn Sie erfahren, dass sich auch diese Gleichung im Rahmen der mathematischen Physik elementar lösen lässt. Das bedeutet, dass Sie im folgenden Abschnitt zwei weitere Arten von Funktionen kennen lernen werden, die

sphärischen Bessel-Funktionen und die sphärischen Neumann-Funktionen.

Die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_l(\rho) = 0$$

Die Gleichung sieht sehr kompliziert aus, doch ist ihre Lösung wohlbekannt. Diese Gleichung heißt *sphärische Bessel-Gleichung*, und ihre Lösung ist eine Kombination aus den sphärischen Bessel-Funktionen $j_l(\rho)$ und den sphärischen Neumann-Funktionen $n_l(\rho)$:

$$R_l(\rho) = A_l j_l(\rho) + B_l n_l(\rho)$$



Wie lauten nun die sphärischen Bessel-Funktionen und die sphärischen Neumann-Funktionen? Die sphärischen Bessel-Funktionen sind gegeben durch:

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}$$

Die niedrigsten sphärischen Bessel-Funktionen sind:

$$✓ \quad j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$✓ \quad j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$✓ \quad j_2(\rho) = \frac{3 \sin \rho}{\rho^3} - \frac{3 \cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$$

Und die sphärischen Neumann-Funktionen sind gegeben durch:

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\cos \rho}{\rho}$$

Somit lauten die niedrigsten sphärischen Neumann-Funktionen:

$$✓ \quad n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$✓ \quad n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$$

$$✓ \quad n_2(\rho) = -\frac{3 \cos \rho}{\rho^3} - \frac{3 \sin \rho}{\rho} + \frac{\cos \rho}{\rho}$$

Näherungen für große und kleine ρ

Mithilfe der sphärischen Bessel-Funktionen sieht der radiale Teil der Wellenfunktion für ein freies Teilchen wie folgt aus:

$$R_l(\rho) = A_l j_l(\rho) + B_l n_l(\rho)$$

Betrachtet man nun die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen für große und kleine ρ , so ergibt sich Folgendes:

$$j_l(\rho) \approx \frac{2 \cdot l!}{(2l+1)!} \rho^l.$$

✓ **Kleine ρ :** Die Bessel-Funktion verhält sich wie

$$n_l(\rho) \approx \frac{(2l-1)!}{2 \cdot (l-1)!} \rho^{-(l+1)}.$$

Die Neumann-Funktion verhält sich wie

$$j_l(\rho) \approx \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right).$$

✓ **Große ρ :** Die Bessel-Funktion verhält sich wie

$$n_l(\rho) \approx -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right).$$

Die Neumann-Funktion verhält sich wie



Man beachte, dass die Neumann-Funktionen für kleine ρ divergieren. Folglich divergiert jede Wellenfunktion, die Neumann-Funktionen enthält, was unphysikalisch ist. Deshalb sind die Neumann-Funktionen keine akzeptablen Funktionen für die Wellenfunktion.

Die Wellenfunktion $\psi(r, \theta, \phi)$, die gleich $R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ ist, lautet somit:

$$\psi(r, \theta, \phi) = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

wobei $k = (2mE_n)^{1/2} / \hbar$. Da k jeden Wert annehmen kann, sind die Energieniveaus folglich kontinuierlich.

Das sphärisch symmetrische Kastenpotential

In diesem Abschnitt wird das sphärisch symmetrische Kastenpotential behandelt. Abbildung 9.2 zeigt eine Darstellung des Potentials, das sich mathematisch folgendermaßen beschreiben lässt:

$$\begin{aligned} \checkmark V(r) &= -V_0 & \text{für} & \quad 0 < r < a \\ \checkmark V(r) &= 0 & \text{für} & \quad r > a \end{aligned}$$

Da es sich bei diesem Potential um ein Zentralpotential handelt, kann man an dieser Stelle auf die Ergebnisse zurückgreifen, die im Abschnitt »Zentralpotentiale im Dreidimensionalen« hergeleitet wurden. Das bedeutet, man kann die Wellenfunktion in einen winkelabhängigen und einen Radialteil aufspalten. Da die Ergebnisse für den winkelabhängigen Anteil bereits bekannt sind (siehe den Abschnitt »Der winkelabhängige Teil der Wellenfunktion $\psi(r, \theta, \varphi)$ «), müssen Sie im folgenden nur noch die Schrödinger-Gleichung für die Radialkomponente der Wellenfunktion untersuchen. Diese lauten folgendermaßen:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

In den beiden folgenden Abschnitten wird die Schrödinger-Gleichung für die beiden Fälle $0 < r < a$ und $r > a$ getrennt untersucht.

Innerhalb des Potentialtopfes: $0 < r < a$

In dem Bereich, der zuerst betrachtet wird, gilt $V(r) = -V_0$. Somit lautet die Schrödinger-Gleichung wie folgt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Bringt man den Term V_0 auf die rechte Seite, so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] = (E + V_0) [r R_{nl}(r)]$$

Teilt man durch r , erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} R_{nl}(r) = (E + V_0) R_{nl}(r)$$

Multipliziert man mit $-2m/\hbar^2$, so folgt:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] - \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2} R_{nl}(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) R_{nl}(r)$$

An dieser Stelle wechselt man die Variable: $\rho = kr$, wobei

$k = [2m(E + V_0)]^{1/2} / \hbar$, sodass $R_{nl}(r)$ zu $R_l(kr) = R_l(\rho)$ wird. Somit erhält man:

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_l(\rho) = 0$$

$$k = [2m(E + V_0)]^{1/2} / \hbar$$

Das ist die sphärische Bessel-Gleichung. Diesmal ist

und nicht $(2mE)^{1/2}/\hbar$. Das ist auch sinnvoll; da das Teilchen hier im Potentialtopf gefangen ist, trägt seine Energie $E + V_0$ und nicht nur E .

Die Lösung der obigen Gleichung ist eine Kombination aus den sphärischen Bessel-Funktionen $j_l(\rho)$ und den sphärischen Neumann-Funktionen $n_l(\rho)$:

$$R_l(\rho) = A_l j_l(\rho) + B_l n_l(\rho)$$

In diesem Fall unterliegt man der gleichen Beschränkung wie bei einem freien Teilchen: Die Wellenfunktion muss überall endlich sein. Geht $\rho \rightarrow 0$, so gilt für die Bessel-Funktion folgende Näherung:

$$j_l(\rho) \approx \frac{2 \cdot l!}{(2l+1)!} \rho^l$$

Für die Neumann-Funktion gilt für kleine ρ folgende Näherung:

$$n_l(\rho) \approx \frac{(2l-1)!}{2 \cdot (l-1)!} \rho^{-(l+1)}$$

Da die Neumann-Funktion divergiert, ist sie in diesem Fall für die Wellenfunktionen ungeeignet. Das bedeutet, dass der radiale Teil der Wellenfunktion nur aus den sphärischen Bessel-Funktionen besteht, wobei A_l eine Konstante ist:

$$R_l(\rho) = A_l j_l(\rho)$$

Die gesamte Wellenfunktion innerhalb des Potentialtopfes $\psi_{in}(r, \theta, \phi)$ ist ein Produkt aus dem radialen und dem winkelabhängigen Teil:

$$\psi_{in}(r, \theta, \phi) = A_l j_l(\rho_{in}) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

wobei $\rho_{in} = r [2m(E + V_0)]^{1/2} / \hbar$ und $Y_{lm}(\theta, \phi)$ die Kugelfunktionen sind.

Außerhalb des Potentialtopfes: $r > a$

Außerhalb des Potentialtopfes, also im Bereich $r > a$, verhält sich das Teilchen wie ein freies Teilchen. Somit lautet die Radialgleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Diese Gleichung wurde bereits im Abschnitt »Freie Teilchen im Dreidimensionalen in Kugelkoordinaten« gelöst: Man setzt $\rho = kr$ ein, wobei $k = (2mE)^{1/2} / \hbar$ ist, sodass $R_{nl}(r)$ zu $R_l(kr) = R_l(\rho)$ wird. Durch diese Substitution ergibt sich für die Radialgleichung die folgende Form:

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_l(\rho) = 0$$

Die Lösung der Gleichung ist eine Kombination aus den sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen, wobei B_l eine Konstante ist:

$$R_l(\rho) = B_l [j_l(\rho) + n_l(\rho)]$$

Die Lösung der Radialgleichung außerhalb des Potentialtopfes lautet somit wie folgt:

$$\psi_{aus}(r, \theta, \phi) = B_l [j_l(\rho_{aus}) + n_l(\rho_{aus})] Y_{lm}(\theta, \phi)$$

wobei $\rho_{aus} = r(2mE)^{1/2} / \hbar$ ist.

Aus dem vorangegangenen Abschnitt kennen Sie die Lösung der Wellenfunktion innerhalb des Potentialtopfes:

$$\psi_{in}(r, \theta, \phi) = A_l j_l(\rho_{in}) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Wie bestimmt man nun die Konstanten A_l und B_l ? Man bestimmt sie mithilfe der Stetigkeitsbedingungen: An der Grenze zwischen innen und außen, also bei $r = a$, müssen sowohl die Wellenfunktion als auch ihre erste Ableitung stetig sein. Um A_l und B_l zu bestimmen, muss

man die beiden folgenden Gleichungen lösen:

$$✓ \psi_{in}(a, \theta, \phi) = \psi_{aus}(a, \theta, \phi)$$

$$✓ \frac{d}{dr} \psi_{in}(r, \theta, \phi) \big|_{r=a} = \frac{d}{dr} \psi_{aus}(r, \theta, \phi) \big|_{r=a}$$

Der isotrope harmonische Oszillator

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dem kugelsymmetrischen harmonischen Oszillator in drei Dimensionen. Im Eindimensionalen lautet das Potential des harmonischen Oszillators:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

wobei $\omega^2 = k/m$ (k ist hier die Federkonstante; die Rückstellkraft des harmonischen Oszillators ist $F = -kx$). Man kann diese beiden Gleichungen ins Dreidimensionale übertragen, indem man x durch r ersetzt:

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

wobei $\omega^2 = k/m$ ist. Da dieses Potential kugelsymmetrisch ist, hat die Wellenfunktion die folgende Form:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Jetzt muss noch die Radialfunktion $R_{nl}(r)$ bestimmt werden; $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sind die Kugelfunktionen.

Die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2,$$

Ersetzt man $V(r)$ durch

so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} [r R_{nl}(r)] + \left[\frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Die Lösung dieser Gleichung ist wirklich nicht einfach, und Sie haben nichts davon, wenn

Sie sich durch die notwendige Mathematik quälen (Seiten über Seiten). Deshalb folgt hier die Lösung:

$$R_{nl}(r) = C_{nl} r^l \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) L_{\frac{n-l}{2}}^{(l+\frac{1}{2})}\left(m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right)$$

wobei gilt:

$$C_{nl} = \frac{\left[\frac{2^{n+l+2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{l+\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{n-l}{2} \right]! \left[\frac{n+l}{2} \right]!}{\left[(n+l+1)! \right]^{\frac{1}{2}}}$$

Die Funktionen $L_a^b(r)$ sind die zugeordneten Laguerre-Polynome:

$$L_a^b(r) = \frac{r^{-b} e^r}{a!} \frac{d^a}{dr^a} (e^{-r} r^{a+b})$$

Sind Sie jetzt froh, dass Sie sich nicht durch diese Mathematik arbeiten mussten? Die ersten zugeordneten Laguerre-Polynome lauten:

✓ $L_0^b(r) = 1$

✓ $L_1^b(r) = -r + b + 1$

✓ $L_2^b(r) = \frac{-r^2}{2} - (b+2)r + \frac{(b+2)(b+1)}{2}$

✓

$$L_3^b(r) = \frac{-r^3}{6} - \frac{(b+3)r^2}{2} - \frac{(b+2)(b+3)r}{2} + \frac{(b+1)(b+2)(b+3)}{6}$$

Okay, damit kennen Sie $R_{nl}(r)$. Um die Wellenfunktion $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ zu erhalten, muss man mit den Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ multiplizieren:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Die ersten Wellenfunktionen für den isotropen harmonischen Oszillator in Kugelkoordinaten lauten:

$$\checkmark \quad \psi_{000}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{\pi^{\frac{1}{4}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{00}(\theta, \phi)$$

$$\checkmark \quad \psi_{11m}(r, \theta, \phi) = \frac{\left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{5}{4}} r \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{1m}(\theta, \phi)$$

✓

$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{\left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{3}{2} - \frac{m\omega r^2}{\hbar}\right) \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{00}(\theta, \phi)$$

$$\checkmark \quad \psi_{31m}(r, \theta, \phi) = \frac{\left(\frac{16}{15}\right)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{4}}} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{7}{4}} r^2 \exp\left(-m\omega \frac{r^2}{2\hbar}\right) Y_{1m}(\theta, \phi)$$

Wie Sie hier gesehen haben, wird die Wellenfunktion sehr schnell sehr kompliziert, wenn man ein Potential betrachtet, das von r^2 abhängt, wie hier beim harmonischen Oszillator.

Die Energie eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators ist quantisiert, und man kann für die Energieniveaus die folgende Formel ableiten:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Die Energieniveaus beginnen also bei $3\hbar\omega/2$ und gehen dann weiter mit

$5\hbar\omega/2, 7\hbar\omega/2$ und so weiter.

Das wichtigste von Kapitel 9 noch einmal in Kürze

In diesem Kapitel wurde die Bewegung von Teilchen in dreidimensionalen Zentralpotentialen ausführlich untersucht. Die charakteristische Eigenschaft eines Zentralpotentials besteht darin, dass das Potential $V(r)$ nur vom Abstand $|r|$ des Teilchens vom Kraftzentrum, nicht aber von der Richtung des Vektors $\mathbf{r}$ abhängt, der vom Zentrum zum Teilchen weist. In diesem Fall besitzt der Hamilton-Operator Kugelsymmetrie. Verwendet man Kugelkoordinaten, so lässt sich die Schrödinger-Gleichung in zwei unabhängige Gleichungen aufspalten.

Das bedeutet, dass man die Wellenfunktion als Produkt aus einer radiusabhängigen Funktion $R_{nl}(r)$ und den Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ darstellen kann:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Dabei ist n die Hauptquantenzahl, l die Drehimpulsquantenzahl und m die magnetische Quantenzahl.

Somit hat man die Lösung der Schrödinger-Gleichung auf die Lösung einer nur vom Abstand $|r|$ abhängigen Differentialgleichung reduziert.

In den folgenden Abschnitten wurde die Wellenfunktion bzw. die Radialgleichung für verschiedene Beispiele untersucht. Dabei zeigte sich erneut der enge Zusammenhang zwischen der Quantenmechanik und der Mathematik. Auch in diesen Beispielen liefern aus der Funktionentheorie wohlbekannte Funktionen die Lösungen, die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen.

Wasserstoffatome verstehen

In diesem Kapitel ...

- ▶ Die Schrödinger-Gleichung für Wasserstoff
- ▶ Die radialen Wellenfunktionen
- ▶ Entartung der Energie
- ▶ Der Aufenthaltsort des Elektrons

Eine der herausragenden Leistungen der Physik besteht in dem vollkommenen Verständnis des Aufbaus des Periodensystems der Elemente, das wiederum auf der Kenntnis des Atomaufbaus aller Atome beruht. Die Prinzipien, die dem Atomaufbau zugrunde liegen, wurden größtenteils im ersten Drittel des 20. Jahrhunderts am Wasserstoffatom abgeleitet. Wichtige Meilensteine waren 1913 das von Niels Bohr entworfene Bohrsche Atommodell, das von der Annahmen eines kleinen, schweren, positiven Atomkerns ausging, und die Erweiterung von Arnold Sommerfeld zum Bohr-Sommerfeldschen Atommodell. Sommerfeld entdeckte dabei die drei räumlichen Quantenzahlen und die Richtungsquantelung des Drehimpulses (siehe Kapitel 6).

Der Durchbruch bei der Beschreibung des Wasserstoffatoms und die Grundlage der heutigen Modellvorstellung gelang 1925/26 mit der Entwicklung der Quantenmechanik durch Werner Heisenberg (Matrizenmechanik) und Erwin Schrödinger (Wellenmechanik). Diese neue Theorie ermöglichte erstmals die exakte Beschreibung des Wasserstoffatoms. Dabei gelang es Schrödinger mithilfe der Wellenmechanik, nicht nur die Energien zu berechnen, sondern auch die geometrische Form der Elektronenorbitale zu bestimmen.

Allerdings ist das Wasserstoffatom auch das einzige Atom, für das man die Schrödinger-Gleichung vollständig lösen kann. Systeme mit mehr als einem Elektron können auch heute mathematisch nicht exakt gelöst werden. Da es jedoch einige gute Näherungsverfahren gibt, kann inzwischen auch das Verhalten von Atomen mit vielen Elektronen mit großer Genauigkeit berechnet werden.

Nach diesem kurzen historischen Abriss wundern Sie sich sicher nicht, dass das Wasserstoffatom auch in diesem Buch eine zentrale Rolle spielt. Man kann sogar sagen, dass die ersten neun Kapitel dieses Buches so aufgebaut sind, dass sie Sie auf die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom vorbereiten.

Ihre Erfahrung mit Zentralpotentialen und die Kenntnis der Möglichkeit, die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung aufgrund der Kugelsymmetrie des Problems in drei

unabhängige Gleichungen zu separieren, werden Ihnen im folgenden bei der Berechnung des Wasserstoffatoms eine große Hilfe sein. Auch in diesem Fall wird die Lösung des radialen Teils der Schrödinger-Gleichung wieder einen Großteil der Lösung des Gesamtproblems ausmachen. Darüber hinaus werden Sie mit dem Wechsel zu Schwerpunkt-Koordinaten ein weiteres Verfahren zur Vereinfachung der Schrödinger-Gleichung kennen lernen. Doch zunächst wird im folgenden Abschnitt erst einmal das Wasserstoffatom betrachtet und die dazugehörige Schrödinger-Gleichung aufgestellt.

Die Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom

Wasserstoffatome bestehen aus einem einzelnen Proton, um das ein einzelnes Elektron kreist. Abbildung 10.1 zeigt, wie man sich das vorstellen kann.



Beachten Sie, dass sich das Proton nicht genau im Mittelpunkt des Atoms befindet – direkt im Mittelpunkt befindet sich der Schwerpunkt der Massen. Vielmehr ist das Proton auf einer Bahn mit dem Radius r_p zu finden, während sich das Elektron auf einer Bahn mit dem Radius r_e um den Mittelpunkt bewegt.

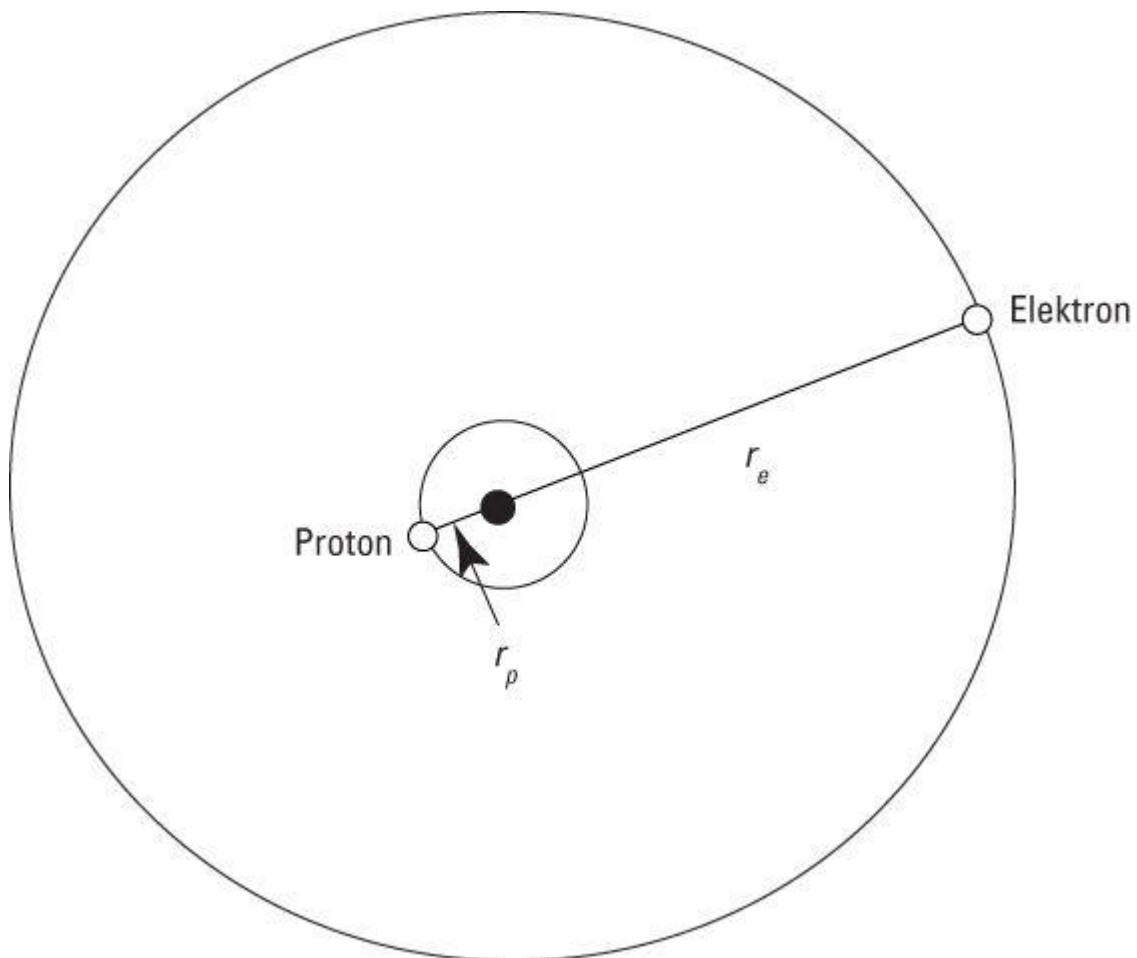


Abbildung 10.1: Das Wasserstoffatom

Wie lautet also die Schrödinger-Gleichung, die die benötigte Wellenfunktionen liefert? Klar, sie enthält Ausdrücke für die kinetische und die potentielle Energie von Proton und Elektron. Für die kinetische Energie des Protons gilt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2$$

$$\nabla_p^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2}$$

wobei ∇_p^2 gilt. Dabei ist x_p die Position des Protons in x-Richtung, y_p die in y-Richtung und z_p die in z-Richtung.

Die Schrödinger-Gleichung enthält auch einen Ausdruck für die kinetische Energie des Elektrons:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2$$

$$\nabla_e^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2}$$

wobei ∇_e^2 gilt. Dabei ist x_e die Position des Elektrons in x-Richtung, y_e die in y-Richtung und z_e die in z-Richtung.

Neben der kinetischen muss man in der Schrödinger-Gleichung auch die potentielle Energie $V(\mathbf{r})$ berücksichtigen. Somit lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$$

Dabei ist $\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$ die Wellenfunktion von Elektron und Proton.

Die elektrostatische potentielle Energie $V(\mathbf{r})$ für ein Zentralpotential ist durch folgende Formel gegeben, wobei $\mathbf{r}$ der Radiusvektor ist, der die beiden Ladungen trennt:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}|}$$



In der Quantenmechanik ist es üblich, das CGS-System

$$1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}.$$

(Zentimeter-Gramm-Sekunde) der Einheiten zu benutzen; hier gilt

Das von den Ladungen des Elektrons und des Protons verursachte Potential im Wasserstoffatom lautet somit:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}|}$$

Da $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$ ist, folgt für die obige Gleichung:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|}$$

Damit lautet die Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$$

Bevor die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom erläutert wird, wird die Gleichung im folgenden Abschnitt zunächst durch die Einführung von Relativ- und Schwerpunkt-Koordinaten vereinfacht.

Vereinfachung und Aufspaltung der Schrödinger-Gleichung für Wasserstoff

Die quantenmechanische Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) + \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p) = E \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p)$$

Dabei muss man die Entfernung des Protons vom exakten Mittelpunkt, dem Schwerpunkt der Massen des Atoms, berücksichtigen. Das macht die Mathematik sehr kompliziert. Wenn man dagegen annimmt, dass sich das Proton in Ruhe befindet und $\mathbf{r}_p = 0$ ist, so vereinfacht sich die Gleichung, sodass sie sich leichter lösen lässt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 \psi(\mathbf{r}_e) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e|} \psi(\mathbf{r}_e) = E \psi(\mathbf{r}_e)$$

Unglücklicherweise ist diese Gleichung nicht exakt, da sie die Bewegung des Protons vernachlässigt. Wenn Sie mit der vollständigen Version arbeiten wollen, so finden Sie diese in Quantenmechanik-Büchern.

Um die übliche Schrödinger-Gleichung zu vereinfachen, wechselt man zu Schwerpunkt-Koordinaten. Der Schwerpunkt des Systems Proton-Elektron befindet sich an folgendem Ort:

$$\mathbf{R} = \frac{m_e \mathbf{r}_e + m_p \mathbf{r}_p}{m_e + m_p}$$

Der Vektor zwischen Elektron und Proton lautet:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$$

Verwendet man die Vektoren $\mathbf{R}$ und $\mathbf{r}$ statt $\mathbf{r}_e$ und $\mathbf{r}_p$, so ist die Schrödinger-Gleichung einfacher zu lösen.

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

Der Laplace-Operator für $\mathbf{R}$ ist nun:

Und der Laplace-Operator für $\mathbf{r}$ sieht folgendermaßen aus:

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Wie hängen $\nabla_{\mathbf{R}}^2$ und $\nabla_{\mathbf{r}}^2$ mit $\nabla_{\mathbf{p}}^2$ und $\nabla_{\mathbf{e}}^2$ zusammen? Mithilfe der Algebra erhält man den Zusammenhang:

$$\frac{1}{m_e} \nabla_{\mathbf{e}}^2 + \frac{1}{m_p} \nabla_{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2$$

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

Dabei ist $M = m_e + m_p$ die Gesamtmasse und m ist die *reduzierte Masse*. Fasst man die Gleichungen für den Schwerpunkt, den Vektor zwischen dem Proton und dem Elektron, die Gesamtmasse und die reduzierte Masse zusammen, so lautet die Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{r}) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}|}$$

Da $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$ gilt, folgt

Demzufolge geht

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

in folgende Gleichung über:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

Nachdem man Schwerpunkt-Koordinaten eingeführt hat, enthält die Schrödinger-Gleichung nur noch Ausdrücke, die entweder von $\mathbf{R}$ oder von $\mathbf{r}$ abhängen. Das heißt, dass man an dieser Stelle wieder auf die bereits bewährte Methode der Separation zurückgreifen kann. Für die Wellenfunktion gilt:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$$

Setzt man diese Gleichung in die obige ein, so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$$

Teilt man diese Gleichung durch $\psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$, so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2M \psi(\mathbf{R})} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2m \psi(\mathbf{r})} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} = E$$

Sehr gut. Diese Gleichung besteht aus Ausdrücken, die entweder von $\psi(\mathbf{R})$ oder von $\psi(\mathbf{r})$ abhängen, aber nicht von beiden. Das bedeutet, man kann diese Gleichung folgendermaßen in zwei Gleichungen separieren (dabei ist die Gesamtenergie $E = E_{\mathbf{R}} + E_{\mathbf{r}}$):

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2M \psi(\mathbf{R})} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) = E_{\mathbf{R}}$$

$$\checkmark \quad \frac{-\hbar^2}{2m \psi(\mathbf{r})} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} = E_{\mathbf{r}}$$

Multipliziert man $\frac{-\hbar^2}{2M \psi(\mathbf{R})} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) = E_{\mathbf{R}}$ mit $\psi(\mathbf{R})$, so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) = E_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R})$$

Multipliziert man $\frac{-\hbar^2}{2m \psi(\mathbf{r})} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} = E_{\mathbf{r}}$ mit $\psi(\mathbf{r})$, so erhält man:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})$$

Jetzt hat man zwei Schrödinger-Gleichungen. Die nächsten beiden Abschnitte zeigen, wie man sie unabhängig voneinander löst.

Die Lösung für $\psi(\mathbf{R})$

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{R}) = E_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R})$$

Wie bestimmt man in die Funktion $\psi(\mathbf{R})$, die Wellenfunktion des Schwerpunkts des Systems Elektron-Proton? Das ist eine einfache Differentialgleichung und die Lösung lautet:

$$\psi(\mathbf{R}) = C e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}$$

$$|\mathbf{k}| = \frac{(2ME_{\mathbf{R}})^{1/2}}{\hbar^2}$$

Dabei ist C eine Konstante und $\mathbf{k}$ der Wellenvektor, wobei gilt. Man kann C bestimmen, wenn $\psi(\mathbf{R})$ normalisiert ist, was Folgendes bedeutet:

$$1 = \int_0^{\infty} \psi(\mathbf{R}) \psi^*(\mathbf{R}) d^3\mathbf{R}$$

$$C = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}$$

Aus dieser Gleichung folgt . Damit ergibt sich:

$$\psi(\mathbf{R}) = \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{1/2}}$$



In der Praxis ist $E_{\mathbf{R}}$ so klein, dass man $\psi(\mathbf{R})$ gewöhnlich ignoriert bzw. gleich 1 setzt. Mit anderen Worten, die tatsächliche Wirkung beruht auf $\psi(\mathbf{r})$, nicht auf $\psi(\mathbf{R})$. $\psi(\mathbf{R})$ ist die Wellenfunktion für den Massenschwerpunkt des Wasserstoffatoms und $\psi(\mathbf{r})$ ist die Wellenfunktion für ein (fiktives) Teilchen der Masse m.

Die Lösung für $\psi(r)$

Die Schrödinger-Gleichung für $\psi(\mathbf{r})$ liefert die Wellenfunktion für ein gedachtes Teilchen der Masse m (in der Praxis ist $m \gg m_e$ und $\psi(\mathbf{r})$ hat sehr große Ähnlichkeit mit $\psi(\mathbf{r}_e)$, sodass die Energie E_r ungefähr die Energie des Elektrons ist). Die Schrödinger-Gleichung für $\psi(\mathbf{r})$ lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{r}) = E_r \psi(\mathbf{r})$$

Man kann die Lösung in einen radialen und einen winkelabhängigen Teil aufspalten (siehe Kapitel 8):

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Der winkelabhängige Teil besteht aus den Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$, er ist also bekannt. Jetzt muss man noch die Lösung für den radialen Teil $R_{nl}(r)$ bestimmen. Die Schrödinger-Gleichung für den radialen Teil lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] - \frac{e^2}{r} [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Dabei ist $r = |\mathbf{r}|$. Um diese Gleichung zu lösen, muss man zwei Fälle betrachten: In einem Fall ist r sehr klein und im anderen sehr groß. Fügt man beide Fälle zusammen, so erhält man eine erste Fassung der Lösung.

Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für kleine r

Für kleine r muss die radiale Wellenfunktion verschwinden; man erhält:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] = 0$$

Multipliziert man mit $2m/\hbar^2$, so erhält man:

$$-\frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + \frac{l(l+1)}{r^2} [r R_{nl}(r)] = 0$$

Die Lösung für diese Gleichung ist proportional zu:

$$R_{nl}(r) \sim Ar^l + Br^{-l-1}$$

Man beachte, dass $R_{nl}(r)$ verschwinden muss, wenn r gegen null geht – aber der Ausdruck r^{-l-1} geht gegen unendlich. Das bedeutet, dass B null sein muss, und es ergibt sich somit folgende Lösung:

$$R_{nl}(r) \sim r^l$$

Das gilt für kleine r. Der nächste Abschnitt betrachtet sehr große r.

Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung für große r

Für sehr große r geht
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{r}) = E_r \psi(\mathbf{r})$$
 über in:

$$\frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + \frac{2mE}{\hbar^2} [r R_{nl}(r)] = 0$$

Da sich das Elektron im Wasserstoffatom in einem gebundenen Zustand befindet, gilt $E < 0$. Deshalb ist die Lösung der obigen Gleichung proportional zu:

$$R_{nl}(r) \sim Ae^{-\lambda r} + Be^{\lambda r}$$

mit
$$\lambda = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar}.$$

Man beachte, dass $R_{nl}(r) \sim Ae^{-\lambda r} + Be^{\lambda r}$ aufgrund des Ausdrucks $Be^{\lambda r}$ divergiert, wenn r gegen unendlich geht, folglich muss B gleich null sein. Das bedeutet, dass $R_{nl}(r) \sim e^{-\lambda r}$ ist. Im nächsten Abschnitt werden die Lösungen für kleine und große r zusammen gebracht.

Zusammenfügen der Lösungen für die Radialgleichung

Bringt man die Lösungen für sehr kleine und sehr große r zusammen, so erhält die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung die Form $R_{nl}(r) \sim r^l f(r) e^{-\lambda r}$, wobei $f(r)$ eine bisher noch unbestimmte Funktion von r ist. Der nächste Punkt ist nun, die Funktion $f(r)$ zu bestimmen. Das macht man, indem man diese Funktion in die radiale Schrödinger-Gleichung einsetzt:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] - \frac{e^2}{r} [r R_{nl}(r)] = E_r [r R_{nl}(r)]$$

Führt man die Substitution durch, so erhält man die folgende Differentialgleichung:

$$\frac{d^2}{dr^2} f(r) + 2 \left[\frac{l(l+1)}{r} - \lambda \right] \frac{d}{dr} f(r) + 2 \left[\frac{\frac{me^2}{\hbar^2} - \lambda(l+1)}{r} \right] f(r) = 0$$

Aufgrund der Erfahrung, die Sie in den vorangegangenen Kapiteln gesammelt haben, werden Sie sich auch von dieser komplexen Differentialgleichung nicht erschrecken lassen. Wie Sie richtig vermuten, können Sie sich auch in diesem Fall auf die Mathematik verlassen, die Ihnen einen Weg zur Lösung bietet. Diesmal ist es ein sogenannter *Potenzreihenansatz* oder eine *Reihen-Entwicklung*, die Ihnen die Lösung erleichtert.

Für $f(r)$ lautet die Reihen-Entwicklung:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k$$

Setzt man diese Gleichung in die obere ein, so erhält man:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[k(k+2l+1) a_k r^{k-2} + 2 \left(\frac{me^2}{\hbar^2} - \lambda(k+l+1) \right) a_k r^{k-1} \right] = 0$$

Wechselt man im zweiten Term den Index von k zu $k-1$, so erhält man:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[k(k+2l+1) a_k r^{k-2} + 2 \left(\frac{me^2}{\hbar^2} - \lambda(k+l) \right) a_{k-1} r^{k-2} \right] = 0$$

Da jeder Term in dieser Summe null sein muss, erhält man:

$$k(k+2l+1) a_k r^{k-2} = 2 \left(\lambda(k+l) - \frac{me^2}{\hbar^2} \right) a_{k-1} r^{k-2}$$

Teilt man durch r^{k-2} , ergibt sich:

$$k(k+2l+1) a_k = 2 \left(\lambda(k+l) - \frac{me^2}{\hbar^2} \right) a_{k-1}$$

Die Gleichung ist die Rekursionsformel der unendlichen Reihe

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[k(k+2l+1) a_k r^{k-2} + 2 \left(\frac{me^2}{\hbar^2} - \lambda(k+l+1) \right) a_k r^{k-1} \right] = 0.$$

Wenn man einen Koeffizienten kennt, kann man den nächsten mithilfe dieser Gleichung bestimmen. Aber was bringt Ihnen das? Betrachten Sie zum Beispiel das Verhältnis a_k/a^{k-1} :

$$\frac{a_k}{a_{k-1}} = \frac{2 \left(\lambda(k+l) - \frac{me^2}{\hbar^2} \right)}{k(k+2l+1)}$$

Wenn $k \rightarrow \infty$ geht, gilt für dieses Verhältnis:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_k}{a_{k-1}} \rightarrow \frac{2\lambda}{k}$$

Das ähnelt der Entwicklung von e^x , die folgendermaßen aussieht:

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Das Verhältnis zweier aufeinanderfolgender Glieder lautet hier:

$$\frac{x^k}{k!} \frac{(k-1)!}{x^{k-1}}$$

Wenn $k \rightarrow \infty$ geht, geht dieses Verhältnis gegen $\frac{1}{k}$:

$$\frac{x^k}{k!} \frac{(k-1)!}{x^{k-1}} \rightarrow \frac{1}{k} \quad \text{für } k \rightarrow \infty$$

Das ist der Fall für e^x . Für $f(r)$ gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_k}{a_{k-1}} \rightarrow \frac{2\lambda}{k}$$

Vergleicht man diese beiden Gleichungen, so gilt offensichtlich:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k = e^{2\lambda r}$$

Die radiale Wellenfunktion $R_{nl}(r)$ lautet:

$$R_{nl}(r) = r^l f(r) e^{-\lambda r}$$

$$\lambda = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar}$$

Dabei ist

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k = e^{2\lambda r}$$

Setzt man nun
erhält man folgende Gleichung:

in $R_{nl}(r) = r^l f(r) e^{-\lambda r}$ ein, so

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= r^l e^{2\lambda r} e^{-\lambda r} \\ &= r^l e^{\lambda r} \end{aligned}$$

Sind Sie nun übergücklich vor Freude? Nicht wirklich. Die Wellenfunktion lautet folgendermaßen: $\psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(\mathbf{r})Y_{lm}(\theta, \phi)$. Setzt man die obige Gleichung hier ein, erhält man:

$$\psi(\mathbf{r}) = r^l e^{\lambda r} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Das sieht gut aus – abgesehen davon, dass es gegen unendlich geht, wenn r gegen unendlich geht. Sie erwarten eigentlich, dass $\psi(r)$ null wird, wenn r gegen unendlich geht – demzufolge ist die Lösung $R_{nl}(r) = r^l e^{\lambda r}$ absolut unphysikalisch. Mit anderen Worten, irgendwo ist irgendetwas schiefgelaufen.

Die Funktion $f(r)$ endlich machen

Die Lösung der radialen Gleichung muss null ergeben, wenn r gegen unendlich geht. Das Problem, dass $\psi(r)$ unendlich wird, wenn r gegen unendlich geht, beruht auf der Form von $f(r)$, die im vorangegangenen Abschnitt angenommenen wurde, nämlich:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k$$

Die Lösung des Problems ist, die Reihe bei einem bestimmten Index abubrechen, der N genannt wird. N heißt die *radiale Quantenzahl*. Damit erhält die Gleichung die folgende Form (beachten Sie, dass die Summation jetzt bis N geht, nicht bis unendlich):

$$f(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

Da diese Reihe bei N abbricht, müssen a_{N+1} , a_{N+2} , a_{N+3} usw. null sein. Die Rekursionsformel für den Koeffizienten a_k lautet:

$$k(k+2l+1)a_k = 2\left(\lambda(k+l) - \frac{me^2}{\hbar^2}\right)a_{k-1}$$

Wenn a_{N+1} null sein soll, muss der Faktor, mit dem a_{k-1} multipliziert wird, für $k = N + 1$ null sein. Das bedeutet:

$$2\left(\lambda(N+1+l) - \frac{me^2}{\hbar^2}\right) = 0$$

$$\lambda(N+l+1) - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$$

Teilt man durch 2, so folgt $\lambda(N+l+1) - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$. Die Substitution $N + l + 1 \rightarrow n$, wobei n *Hauptquantenzahl* heißt, ergibt:

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Das ist die Quantisierungsbedingung, die erfüllt werden muss, wenn die Reihe $f(r)$ endlich sein soll, was aus physikalischen Gründen notwendig ist:

$$f(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

$$\lambda = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar}$$

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0$$

Da , schränkt die Gleichung die erlaubten
Energiewerte ein.

Bestimmung der erlaubten Energien des Wasserstoffatoms

Die Quantisierungsbedingung, die dafür sorgt, dass $\psi(r)$ endlich bleibt, wenn r gegen unendlich geht, lautet:

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\lambda = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar}.$$

Dabei ist
erhält man:

Setzt man λ in die Quantisierungsbedingung ein, so

$$\begin{aligned} \frac{n(-2mE)^{1/2}}{\hbar} - \frac{me^2}{\hbar^2} &= 0 \\ \frac{n(-2mE)^{1/2}}{\hbar} &= \frac{me^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Jetzt löst man die Gleichung für die Energie E . Man quadriert beide Seiten:

$$\begin{aligned} n^2 \frac{(-2mE)}{\hbar^2} &= \frac{m^2 e^4}{\hbar^4} \\ -n^2 2E &= \frac{me^4}{\hbar^2} \end{aligned} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Damit erhält man die Energie E . (**Man beachte:** Da E von der Hauptquantenzahl n abhängt, wurde E in E_n umbenannt.):

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2\hbar^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



Physiker schreiben dieses Ergebnis häufig in einer Form, die sich auf den Bohr'schen Radius r_0 bezieht; das ist der Radius, den Niels Bohr für ein Elektron im

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Wasserstoffatom berechnet hat. Der Bohr'sche Radius lautet

Die Gleichung für die Energie E_n lautet mithilfe von r_0 ausgedrückt:

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2\hbar^2} = \frac{-e^2}{2r_0} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Für die Energie im Grundzustand, wo $n = 1$ ist, erhält man $E = -13,6$ eV.

Beachten Sie, dass diese Energie negativ ist, da das Elektron sich in einem gebundenen Zustand befindet – man muss dem Elektron Energie zuführen, damit es dem Wasserstoffatom entkommen kann. Hier folgen die ersten beiden angeregten Zustände:

- ✓ Erster angeregter Zustand, $n = 2$: $E = -3,4$ eV
- ✓ Zweiter angeregter Zustand, $n = 3$: $E = -1,5$ eV

Damit haben Sie also die Quantisierungsbedingung

$$n\lambda - \frac{me^2}{\hbar^2} = 0 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

benutzt, um die Energieniveaus des Wasserstoffatoms zu berechnen.

Die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung

In diesem Abschnitt wird die Berechnung der Wellenfunktionen vervollständigt. Betrachten Sie die Bestimmung von $R_{nl}(r)$ (siehe den vorangegangenen Abschnitt „Zusammenfügen der Lösungen für die Radialgleichung“). Sie wissen also das Folgende:

$$R_{nl}(r) = r^l f(r) e^{-\lambda r}, \quad \text{wobei} \quad f(r) = \sum_{k=0}^N a_k r^k \quad \text{gilt. Somit folgt:}$$

$$R_{nl}(r) = r^l e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

Das ist allerdings nicht ausreichend; die obige Gleichung stammt aus der Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} [r R_{nl}(r)] + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2mr^2} [r R_{nl}(r)] - \frac{e^2}{r} [r R_{nl}(r)] = E [r R_{nl}(r)]$$

Die Lösung stimmt – bis auf eine multiplikative Konstante; also fügt man eine solche Konstante A_{nl} hinzu, die von der Hauptquantenzahl n und der Drehimpulsquantenzahl l abhängt:

$$R_{nl}(r) = A_{nl} r^l e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^N a_k r^k$$

Man bestimmt A_{nl} , indem man $R_{nl}(r)$ normiert.

Versuchen Sie jetzt, die Lösung für $R_{nl}(r)$ zu bestimmen, indem Sie einfach weiterrechnen. Versuchen Sie es beispielsweise für $R_{10}(r)$. In diesem Fall ist $n = 1$ und $l = 0$. Da $N + l + 1 = n$, folgt $N = n - l - 1$. Somit ist hier $N = 0$. Damit folgt für $R_{nl}(r)$:

$$R_{10}(r) = A_{10} r^l e^{-\lambda r} \sum_{k=0}^0 a_k r^k$$

Die Summe in dieser Gleichung ist dann $\sum_{k=0}^0 a_k r^k = a_0$, somit folgt:

$$R_{10}(r) = A_{10} r^l e^{-\lambda r} a_0$$

Da $l = 0$ ist, ist $r^l = 1$, sodass $R_{10}(r) = A_{10} e^{-\lambda r} a_0$ mit $\lambda = \frac{(-2mE)^{1/2}}{\hbar}$.

Deshalb kann man $R_{10}(r) = A_{10} e^{-\lambda r} a_0$ auch folgendermaßen schreiben:

$$R_{10}(r) = A_{10} \exp\left(\frac{-r}{nr_0}\right) a_0$$

Dabei ist r_0 der Bohr'sche Radius. Um A_{10} und a_0 zu finden, muss man $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$ normieren, was bedeutet, $|\psi_{100}(r, \theta, \phi)|^2 d^3r$ über den gesamten Raum zu integrieren und das Ergebnis gleich 1 zu setzen.

Hier gilt $d^3r = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$; die Integration der Kugelfunktionen, wie etwa Y_{00} , über die gesamte Kugel $\int |Y_{00}|^2 \sin\theta d\theta d\phi$ ergibt 1. Es muss folglich nur noch der radiale Teil normiert werden:

$$1 = \int_0^{+\infty} r^2 |R_{10}(r)|^2 dr$$

Setzt man $R_{10}(r) = A_{10} \exp\left(\frac{-r}{nr_0}\right) a_0$ in $1 = \int_0^{+\infty} r^2 |R_{10}(r)|^2 dr$ ein, so folgt:

$$1 = A_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left(\frac{-2r}{nr_0}\right) dr$$

Diese Art von Integral kann man mithilfe folgender Gleichung lösen:

$$\int_0^{+\infty} x^n \exp(ax) dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$1 = A_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left(\frac{-r}{nr_0}\right) dr$$

Somit gilt für die Gleichung folgendes:

$$1 = A_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 \exp\left(\frac{-r}{nr_0}\right) dr = A_{10}^2 a_0^2 \frac{r_0^3}{4}$$

Daraus folgt:

$$A_{10}^2 a_0^2 \frac{r_0^3}{4} = 1$$

$$A_{10}^2 a_0^2 = \frac{4}{r_0^3}$$

$$A_{10} a_0 = \frac{2}{r_0^{3/2}}$$

Das ist ein wirklich einfaches Ergebnis. Da A_{10} nur dazu dient, das Ergebnis zu

$$A_{10}^2 a_0^2 \frac{r_0^3}{4} = 1$$

normieren, kann man A_{10} gleich 1 setzen (das wäre nicht der Fall, wenn

$$a_0 = \frac{2}{r_0^{3/2}}$$

Mehrfach-Ausdrücke enthalten würde). Daher ist . Das ist schön; man erhält somit

$$R_{10}(r) = A_{10} \exp\left(\frac{-r}{nr_0}\right) a_0$$

für $R_{10}(r)$, das durch die Gleichung gegeben ist, folgenden Ausdruck:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{r_0^{3/2}} e^{\frac{-r}{r_0}}$$

Sie wissen, dass $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ gilt.

Somit erhält man für $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$:

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{r_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{r_0}} Y_{00}(\theta, \phi)$$

Phantastisch! Ganz allgemein lautet die Wellenfunktion $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ für Wasserstoff folgendermaßen:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{\left(\frac{2}{nr_0}\right)^{3/2} [(n-l-1)!]^{1/2}}{[2n(n+1)!]^{1/2}} e^{-\frac{r}{nr_0}} \left(\frac{2r}{nr_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Dabei sind $L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right)$ die zugeordneten Laguerre-Polynome. Die ersten Laguerre-Polynome lauten:

$$✓ L_0^b(r) = 1$$

$$✓ L_1^b(r) = -r + b + 1$$

$$✓ L_2^b(r) = \frac{-r^2}{2} - (b+2)r + \frac{(b+2)(b+1)}{2}$$

✓

$$L_3^b(r) = \frac{-r^3}{6} - \frac{(b+3)r^2}{2} + \frac{(b+2)(b+3)r}{2} + \frac{(b+1)(b+2)(b+3)}{6}$$

Wellenfunktionen des Wasserstoffs

Wie sehen nun die Wellenfunktionen des Wasserstoffs aus? Im vorangegangenen Abschnitt haben Sie $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$ bestimmt:

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{r_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{r_0}} Y_{00}(\theta, \phi)$$

Hier folgen weitere Wellenfunktionen des Wasserstoffs:

✓
$$\psi_{200}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{2^{3/2} r_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{2r_0}} Y_{00}(\theta, \phi)$$

✓
$$\psi_{21m}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{6^{3/2} r_0^{3/2}} \frac{r}{2r_0} e^{-\frac{r}{2r_0}} Y_{1m}(\theta, \phi)$$

✓
$$\psi_{300}(r, \theta, \phi) = \frac{2}{3(3^{3/2}) r_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{3r_0}} \left[1 - \left(\frac{2r}{3r_0} \right) + \left(\frac{2r^2}{27r_0^2} \right) \right] Y_{00}(\theta, \phi)$$

✓
$$\psi_{31m}(r, \theta, \phi) = \frac{8}{9(6^{3/2}) r_0^{3/2}} \frac{r}{3r_0} \left[1 - \left(\frac{r}{6r_0} \right) \right] Y_{1m}(\theta, \phi)$$

✓
$$\psi_{32m}(r, \theta, \phi) = \frac{4}{9(30^{3/2}) r_0^{3/2}} \frac{r^2}{9r_0^2} e^{-\frac{r}{3r_0}} Y_{2m}(\theta, \phi)$$

Die Wellenfunktion $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ verhält sich für kleine r wie r^l und geht somit gegen null. Für große r fällt $\psi_{100}(r, \theta, \phi)$ exponentiell gegen null. Sie haben also das obige Problem gelöst, in dem die Wellenfunktion für große r divergierte. Das verdanken Sie alles der Quantisierungsbedingung, die den Ausdruck für $f(r)$ von einer Exponentialfunktion auf ein Polynom endlicher Ordnung reduziert hat.

Abbildung 10.2 zeigt eine Darstellung der radialen Wellenfunktion $R_{10}(r)$; in Abbildung 10.3 ist $R_{20}(r)$ gezeigt; in Abbildung 10.4 schließlich können Sie $R_{21}(r)$ sehen.

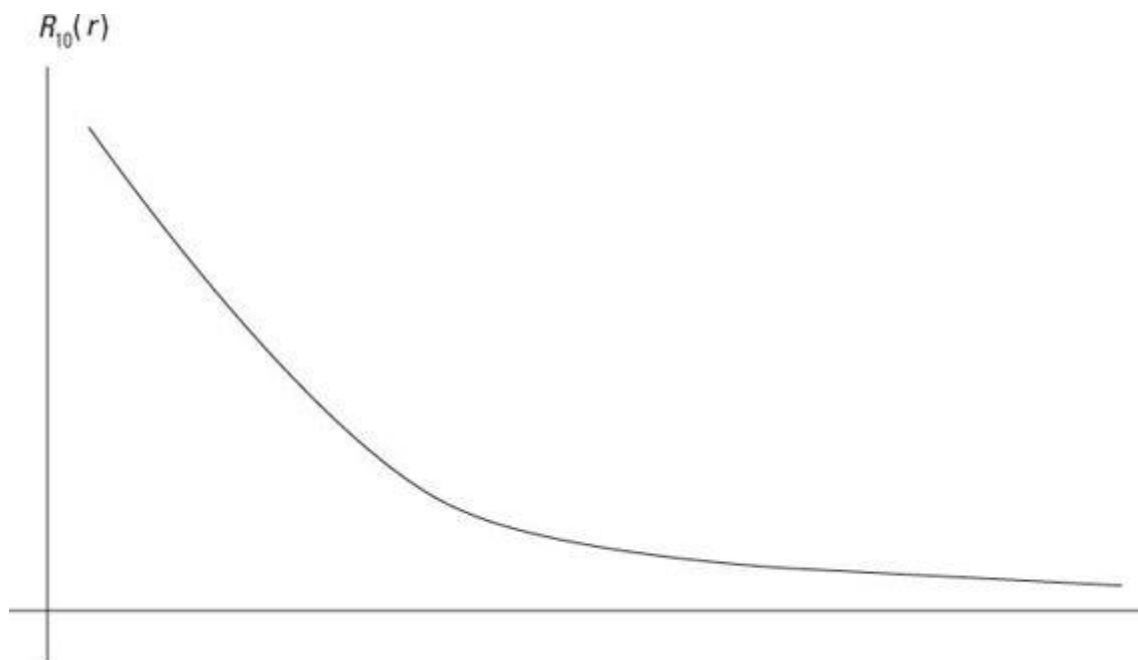


Abbildung 10.2: Die radiale Wellenfunktion $R_{10}(r)$

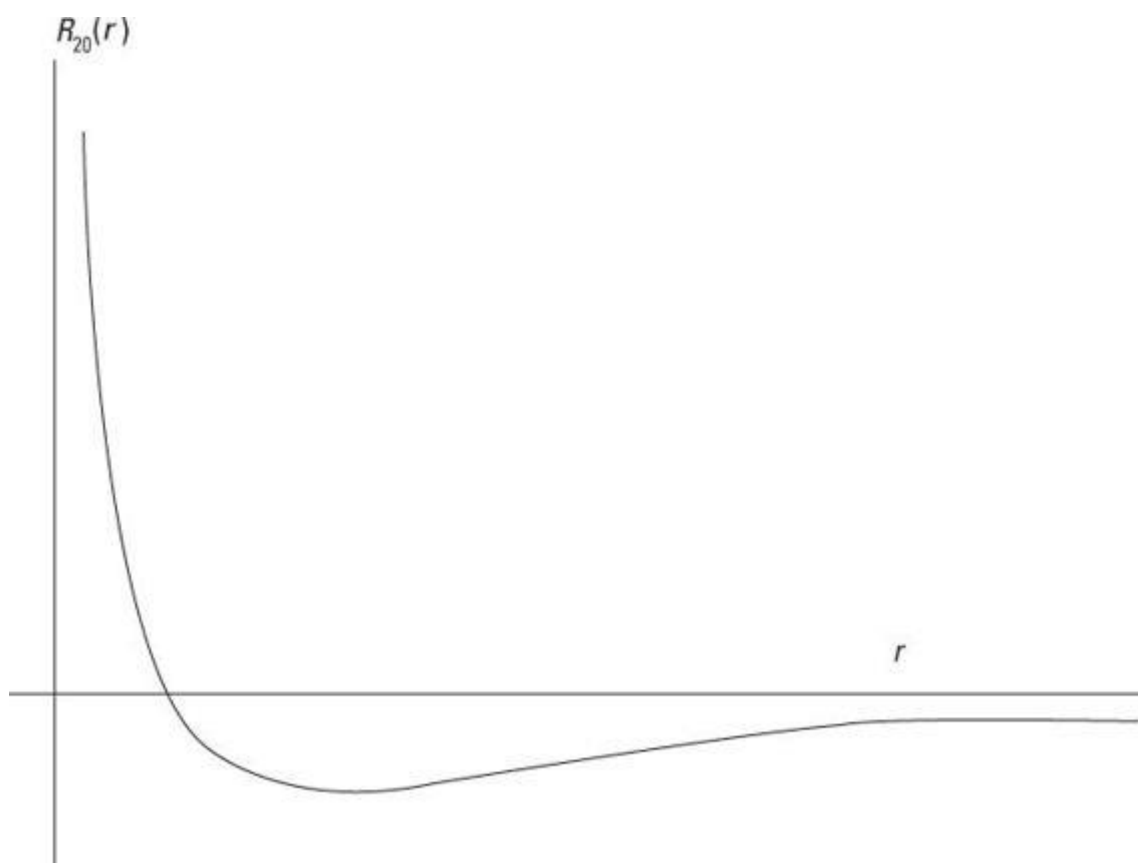


Abbildung 10.3: Die radiale Wellenfunktion $R_{20}(r)$

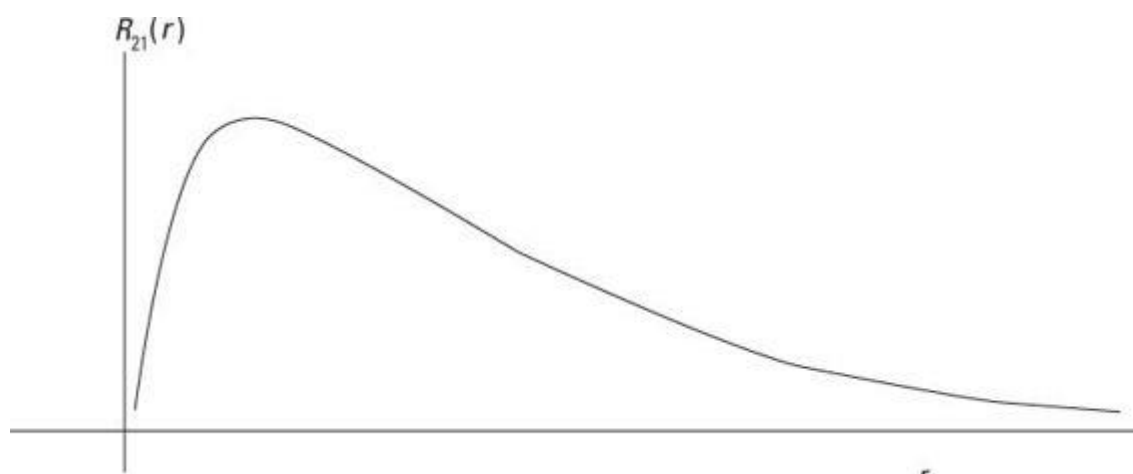


Abbildung 10.4: Die radiale Wellenfunktion $R_{21}(r)$

Die Energieentartung beim Wasserstoffatom

Jeder Quantenzustand des Wasserstoffatoms ist durch drei Quantenzahlen gekennzeichnet: n (die Hauptquantenzahl), l (die Drehimpulsquantenzahl des Elektrons) und m (die z -Komponente des Drehimpulses des Elektrons); die Wellenfunktion lautet also $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$. Wie viele dieser Zustände haben dieselbe Energie? Mit anderen Worten, wie drückt man die Energieentartung beim Wasserstoffatom anhand der Quantenzahlen n , l und m aus?

Wie Sie im Abschnitt „Bestimmung der erlaubten Energien des Wasserstoffatoms“ gesehen haben, hängt die aktuelle Energie nur von n ab:

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2\hbar^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Das bedeutet, dass E unabhängig von l und m ist. Wie viele Zustände $|n, l, m\rangle$ haben dieselbe Energie für einen bestimmten Wert von n ? Sie wissen, dass l für einen bestimmten Wert von n von 0 bis $n - 1$ gehen kann. Und jedes l kann verschiedene Werte von m haben. Somit gilt für die gesamte Entartung:

$$\text{Entartung} = \sum_{l=0}^{n-1} (\text{Entartung in } m)$$

Die Entartung in m ist die Zahl der Zustände mit verschiedenen Werten von m , die denselben Wert l besitzen. Für jeden bestimmten Wert von l kann m die Werte $-l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$ annehmen. Das sind $(2l + 1)$ mögliche Zustände von m für einen bestimmten Wert von l . Somit kann man $(2l + 1)$ für die Entartung in m einsetzen:

$$\text{Entartung} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1)$$

Es ist bekannt, dass diese Reihe gerade n^2 ergibt.

Die Entartung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms ist also n^2 . Der Grundzustand $n = 1$ hat beispielsweise die *Entartung* $= n^2 = 1$ (was Sinn macht, da l und somit m in diesem Zustand nur null sein können).

Für $n = 2$ hat man eine Entartung von 4:

✓ $\psi_{200}(r, \theta, \phi)$

✓ $\psi_{21-1}(r, \theta, \phi)$

✓ $\psi_{210}(r, \theta, \phi)$

✓ $\psi_{211}(r, \theta, \phi)$

Phantastisch!

Quantenzustände mit Spin

Sie haben sich vielleicht schon gefragt, was mit dem Spin des Elektrons ist? Sie haben Recht! Der Spin des Elektrons sorgt für weitere Quantenzustände. In diesem Abschnitt haben Sie bis jetzt die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms als Produkt aus einem radialen und einem winkelabhängigen Teil betrachtet:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Jetzt können Sie einen spinabhängigen Teil hinzufügen, entsprechend dem Spin des Elektrons. Dabei sind s der Spin des Elektrons und m_s die z-Komponente des Spins:

$$|s, m_s\rangle$$

Der spinabhängige Teil der Gleichung kann folgende Werte annehmen:

$$\checkmark \quad |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$\checkmark \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

Aus $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ wird jetzt $\psi_{nlmm_s}(r, \theta, \phi)$:

$$\psi_{nlmm_s}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) |s, m_s\rangle$$

Diese Wellenfunktion kann in Abhängigkeit von m_s zwei verschiedene Formen annehmen:

$$\checkmark \quad \psi_{nlm\frac{1}{2}}(r, s, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\checkmark \quad \psi_{nlm-\frac{1}{2}}(r, s, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Sie können auch folgende Darstellung des Spins (die Sie in Kapitel 6 kennengelernt haben) benutzen:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Für $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ lässt sich die Wellenfunktion beispielsweise wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \psi_{nlm\frac{1}{2}}(r, \theta, \phi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Und für $\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \psi_{nlm-\frac{1}{2}}(r, \theta, \phi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Und was bedeutet das für die Energieentartung? Wenn Sie den Spin des Elektrons berücksichtigen, so gibt es zu jedem Zustand $|n, l, m\rangle$ zwei Spinzustände. Daraus folgt für die Entartung:

$$\text{Entartung} = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

Wenn man den Spin des Elektrons berücksichtigt, ist die Energieentartung des Wasserstoffatoms $2n^2$.

Man kann auch noch den Spin des Protons in der Wellenfunktion berücksichtigen (obwohl man es gewöhnlich nicht macht, da der Spin des Protons nur wenig mit einem an das Wasserstoffatom angelegten Magnetfeld wechselwirkt). In diesem Fall sieht die Wellenfunktion folgendermaßen aus:

$$\psi_{nlm m_s m_{sp}}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) |s_e, m_{se} \rangle |s_p, m_{sp} \rangle$$

Dabei ist s_e der Spin des Elektrons, m_{se} die z-Komponente des Elektronenspins, s_p der Spin des Protons und m_{sp} die z-Komponente des Protonenspins.

Berücksichtigt man den Spin des Protons, so kann die Wellenfunktion in Abhängigkeit von m_s vier verschiedene Formen annehmen:

$$\checkmark \quad \psi_{nlm \frac{1}{2} \frac{1}{2}}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\checkmark \quad \psi_{nlm \frac{1}{2} -\frac{1}{2}}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\checkmark \quad \psi_{nlm -\frac{1}{2} \frac{1}{2}}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\checkmark \quad \psi_{nlm -\frac{1}{2} -\frac{1}{2}}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Die Entartung muss nun auch den Spin des Protons berücksichtigen. Somit gibt es zu jedem Zustand $|n, l, m\rangle$ vier Spinzustände. Daraus folgt für die Entartung:

$$\text{Entartung} = \sum_{l=0}^{n-1} 4(2l+1) = 4n^2$$

Linien führen zu Orbitalen

Wenn man erhitzten Wasserstoff spektroskopisch betrachtet, so erhält man ein Spektrum, das aus verschiedenen Linien besteht. Die ersten Linien tragen bestimmte, aus dem Englischen stammende Namen, wie s (für *sharp*), p (für *principal*), d (für *diffuse*) und f (für *fundamental*). Die folgenden Linien haben keine Namen, sondern werden durch die Buchstaben g, h usw. beschrieben.

Die Linien s, p, d, f und die folgenden entsprechen verschiedenen Zuständen des Drehimpulses des Elektrons, die *Orbitale* genannt werden. Der Zustand s entspricht $l = 0$, für den Zustand p gilt $l = 1$, für d gilt $l = 2$, für f gilt $l = 3$ usw. Jeder dieser Drehimpulszustände ist durch eine unterschiedlich geformte Elektronenwolke um das Proton gekennzeichnet – das sind die verschiedenen Orbitale.

Die Orbitale werden durch die drei Quantenzahlen n , l und m beschrieben. Als Beispiel zeigt Abbildung 10.5 die Elektronenwolke des Zustands $|1, 0, 0\rangle$ (1s, mit $m = 0$).

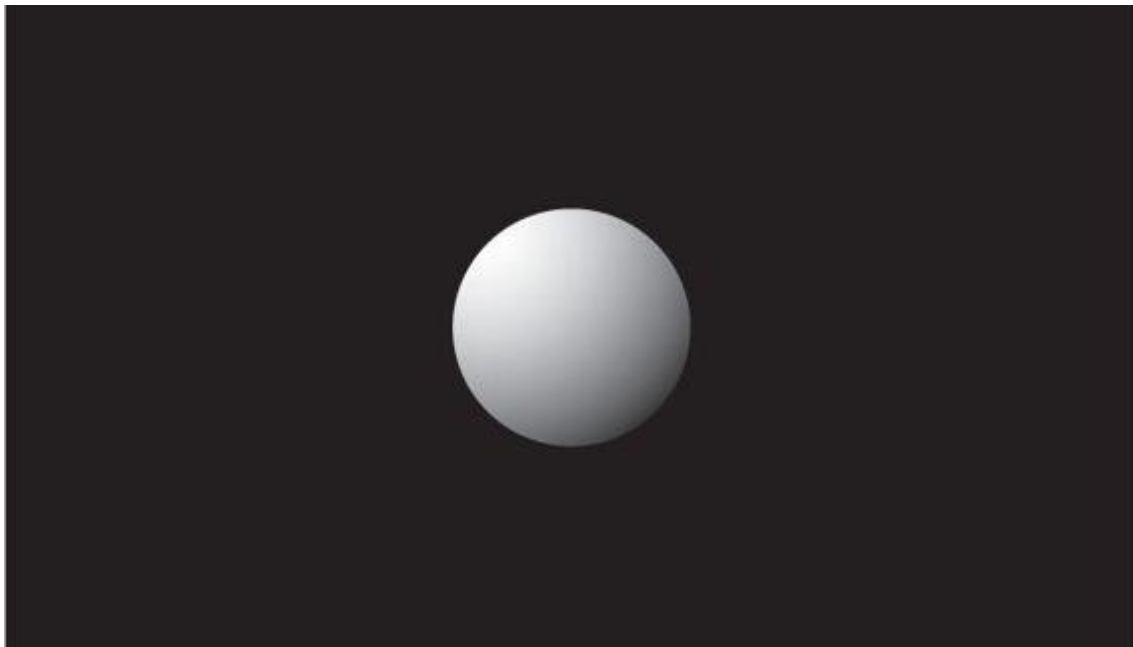


Abbildung 10.5: Der Zustand $|1, 0, 0\rangle$

In Abbildung 10.6 ist der Zustand $|4, 3, 2\rangle$ dargestellt (4f, mit $m = 2$).

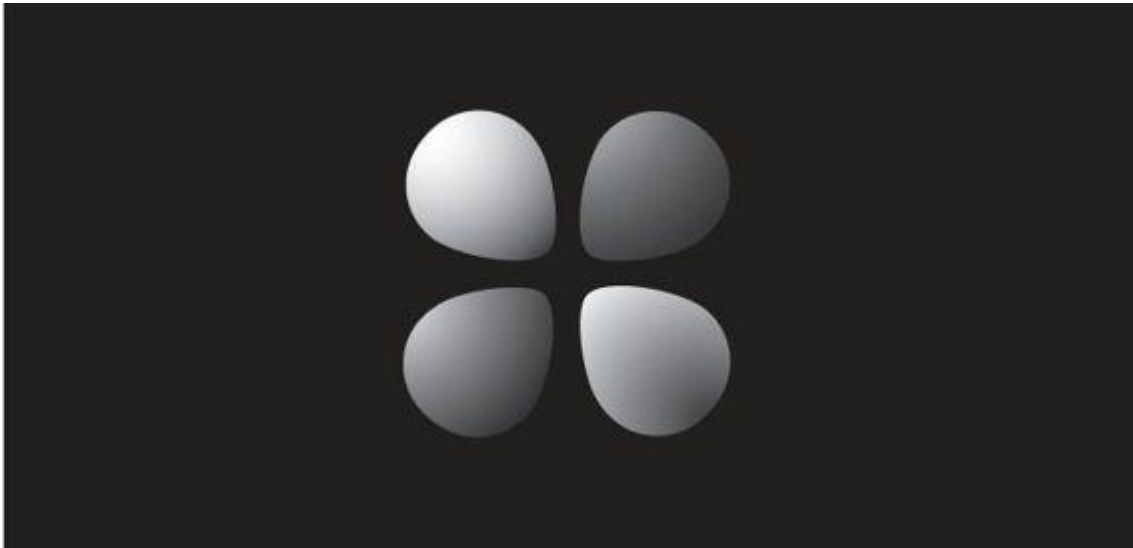


Abbildung 10.6: Der Zustand $|4, 3, 2\rangle$

Abbildung 10.7 zeigt den Zustand $|2, 1, 1\rangle$ (2p, mit $m = 1$).

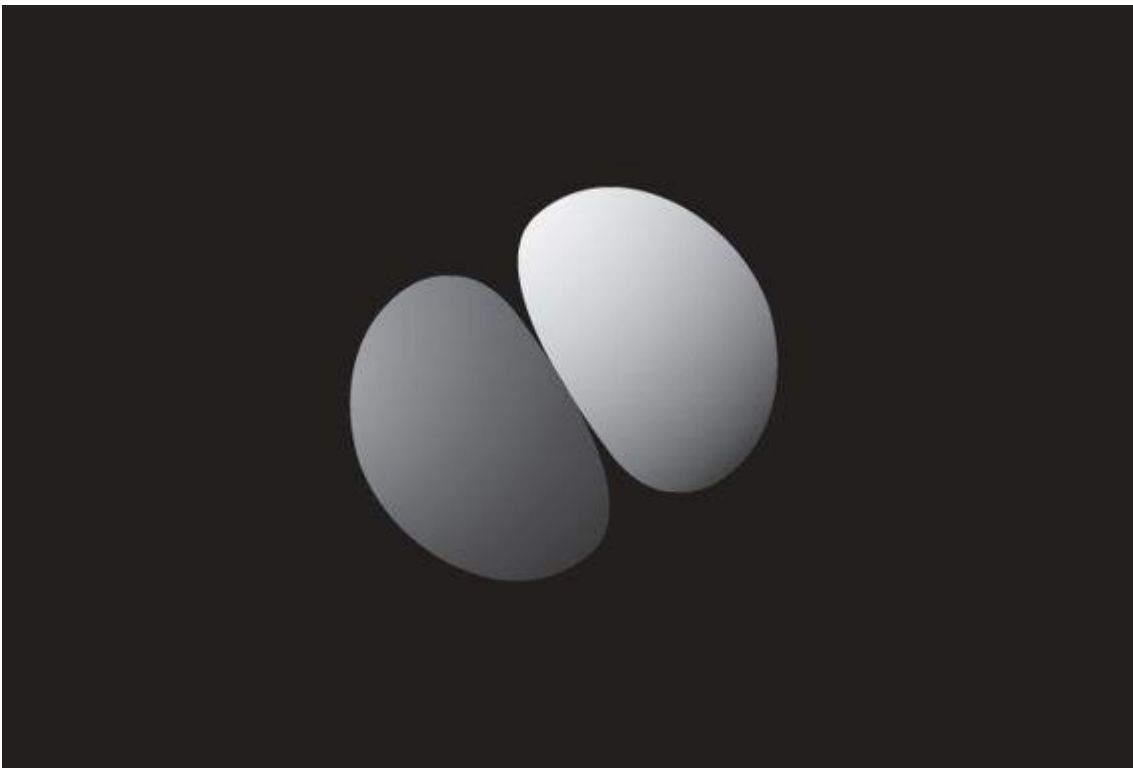


Abbildung 10.7: Der Zustand $|2, 1, 1\rangle$

Das Elektron ist schwer zu fassen

Aber wo ist das Elektron zu einer bestimmten Zeit? Oder mit anderen Worten, wie weit ist das Elektron vom Proton entfernt? Man kann $\langle r \rangle$, den Erwartungswert von r , bestimmen, der darüber eine Aussage macht. Wenn $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ die Wellenfunktion ist, so gibt der folgende Ausdruck die Wahrscheinlichkeit an, dass das Elektron sich im Raumelement d^3r befindet:

$$|\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 d^3r$$

In Kugelkoordinaten gilt $d^3r = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$; somit kann man $|\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 d^3r$ folgendermaßen schreiben:

$$|\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron in einer Kugelschale mit einem Radius von r bis $r + dr$ befindet, lautet somit:

$$\int_0^\pi |\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^2 dr$$

Da $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ gilt, folgt:

$$\int_0^\pi |R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi r^2 dr$$

Das kann man umschreiben:

$$|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

Und weiter:

$$|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

Da die Kugelfunktionen normalisiert sind, vereinfacht sich der Ausdruck:

$$|R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

Das ist also die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron in einer Kugelschale mit einem Radius von r bis $r + dr$ befindet. Damit folgt für $\langle r \rangle$, den Erwartungswert von r :

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

Das ist gerade:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |R_{nl}(r)|^2 dr$$

An dieser Stelle wird die Rechnung sehr kompliziert, da $R_{nl}(r)$ die Laguerre-Polynome enthält. Wendet man sehr viel Mathematik an, so erhält man folgendes Ergebnis:

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r^3 |R_{nl}(r)|^2 dr = [3n^2 - l(l+1)] \frac{r_0}{2}$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Dabei ist r_0 der Bohr'sche Radius: $5,29 \times 10^{-11}$ Meter, somit beträgt der Erwartungswert der Entfernung des Elektrons vom Proton:

$$\langle r \rangle = [3n^2 - l(l+1)] (2,65 \times 10^{-11}) \text{ Meter}$$

So ist beispielsweise im 1s-Zustand ($|1, 0, 0\rangle$) der Erwartungswert von r :

$$\langle r \rangle_{1s} = 3 (2,65 \times 10^{-11}) = 7,95 \times 10^{-11} \text{ Meter}$$

Und im 4p-Zustand ($|4, 1, m\rangle$):

$$\langle r \rangle_{4p} = 46 (2,65 \times 10^{-11}) = 1,22 \times 10^{-9} \text{ Meter}$$

Und damit schließt dieses Kapitel, in dem eine der großartigsten Leistungen der Quantenmechanik, nämlich die exakte Beschreibung des Wasserstoffatoms mithilfe der Schrödinger-Gleichung, ausführlich erläutert wurde.

Das wichtigste von Kapitel 10 noch einmal in Kürze

Das Wasserstoffatom ist das am einfachsten aufgebaute Atom, es ist auch das einzige, für das man die Schrödinger-Gleichung vollständig lösen kann. Es besteht aus einem Proton und einem Elektron, die sich gegenseitig umkreisen.

Um das Problem zu vereinfachen, kann man die Annahme machen, dass sich das Proton in Ruhe befindet. Dann ist die Schrödinger-Gleichung zwar nicht mehr exakt, aber es ermöglicht Ihnen, das Problem zu lösen, so dass Sie auch in diesem Fall eine Fülle neuer Erkenntnisse gewinnen. Da das Potential dann nur noch vom Relativabstand abhängt, kann man zu Relativ- und Schwerpunkt-Koordinaten übergehen. Dieser Wechsel vereinfacht das Problem weiter, da man als Folge zwei Schrödinger-Gleichungen erhält, die man wiederum getrennt lösen kann. Dabei zeigt sich, dass der Einfluss von $\psi(\mathbf{R})$, der Wellenfunktion für den Massenschwerpunkt des Wasserstoffatoms, vernachlässigt werden kann. Demzufolge ist es ausreichend, im Folgenden nur die Schrödinger-Gleichung für $\psi(\mathbf{r})$ zu untersuchen, die ein gedachtes Teilchen der Masse m beschreibt. (Dabei entspricht m ungefähr m_e und $\psi(\mathbf{r})$ etwa $\psi(\mathbf{r}_e)$.) Sie lautet:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \psi(\mathbf{r}) = E_r \psi(\mathbf{r})$$

An dieser Stelle wendet man wieder den Separationsansatz an, der bereits in Kapitel 10 bei der Behandlung von Zentralpotentialen erläutert wurde. Das heißt, man spaltet die Wellenfunktion in einen winkelabhängigen und einen radialen Anteil auf:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Da der winkelabhängige Teil aus den Kugelfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi)$ besteht, muss man im Folgenden nur noch die Lösung für die Radialgleichung bestimmen.

Zu diesem Zweck betrachtet man zunächst die Lösungen für kleine und große r getrennt; erst im Anschluss daran verbindet man beide Lösungen. Dies führt auf folgende, recht komplizierte Differentialgleichung:

$$\frac{d^2}{dr^2} f(r) + 2 \left[\frac{l(l+1)}{r} - \lambda \right] \frac{d}{dr} f(r) + 2 \left[\frac{\frac{me^2}{\hbar^2} - \lambda(l+1)}{r} \right] f(r) = 0$$

Sie lässt sich mit einer aus der Mathematik bekannten Methode lösen, dem Potenzreihenansatz. Dabei ist zu beachten, dass die Reihe nach dem N -ten Glied abbrechen muss. Dabei ist N die radiale Quantenzahl; die Hauptquantenzahl n ergibt sich folgendermaßen aus N :

$$n = N + l + 1$$

Im Anschluss daran kann man die Energieeigenwerte E_n betrachten. Es gilt:

$$E_n = \frac{-me^4}{2n^2 \hbar^2} \quad n = 1, 2, 3, 4 \dots$$

Das bedeutet, die Energieeigenwerte hängen nur von der Kombination $n = N + l + 1$ ab. Zu einem festen vorgegebenen n können somit die Drehimpulsquantenzahlen $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ gehören. Berücksichtigt man darüber hinaus, dass zu jedem l $(2l+1)$ verschiedene Werte von m gehören, ergibt sich folgende Gleichung:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$$

Demzufolge ist der Energieeigenwert E_n n^2 -fach entartet.

Man kann die radiale Schrödinger-Gleichung aber auch in Verbindung mit einer in der Mathematik eingehend untersuchten Differentialgleichung darstellen und sich die Kenntnis ihrer Lösungen zunutze machen. In dieser Darstellung lautet die Wellenfunktion $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ für das Wasserstoffatom folgendermaßen:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{\left(\frac{2}{nr_0}\right)^{3/2} [(n-l-1)!]^{1/2}}{[2n(n+1)!]^{1/2}} e^{-\frac{r}{nr_0}} \left(\frac{2r}{nr_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{nr_0}\right) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Dabei gilt:

✓ $L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{nr_0}\right)$ sind die zugeordneten Laguerre-Polynome.

✓ $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sind die Kugelflächenfunktionen.

✓ r_0 ist der Bohrsche Radius.

Jede Lösung $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom wird durch die drei Quantenzahlen n , l und m gekennzeichnet. Sie werden auch räumliche Quantenzahlen

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

genannt, im Unterschied zur Spinquantenzahl

Dabei gilt:

- ✓ Die Hauptquantenzahl n beschreibt die Schale, zu der der Zustand des Elektrons gehört. Die Schalen werden auch der Reihe nach als K-, L-, M-... Schalen bezeichnet.
- ✓ Die Nebenquantenzahl oder Drehimpulsquantenzahl l charakterisiert die Form des Orbitals in einem Atom. Man verwendet zur Beschreibung von l oftmals bestimmte, historisch festgelegte Buchstaben: s für $l = 0$, p für $l = 1$, d für $l = 2$ usw.
- ✓ Die magnetische Quantenzahl m beschreibt die Komponente des Elektronen-Bahndrehimpulses in z-Richtung.

Teil V

Gruppendynamik mit vielen Teilchen

In diesem Teil ...

In diesem Teil lernen Sie, mit vielen Teilchen gleichzeitig zu arbeiten. Dabei können die Teilchen nicht nur mit einem äußeren Potential, sondern auch untereinander wechselwirken. Sie lernen, Atome zu beschreiben, die aus Elektronen und einem Kern bestehen, sowie Systeme aus vielen Atomen. Schließlich besteht die ganze Welt ja aus Viel-Teilchen-System. Glücklicherweise ist die Quantenphysik dieser Aufgabe gewachsen.

Viele identische Teilchen

In diesem Kapitel ...

- ▶ Wellenfunktionen und Hamilton-Operatoren für Viel-Teilchen-Systeme
- ▶ Identische und unterscheidbare Teilchen
- ▶ Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen erkennen und erzeugen
- ▶ Elektronenschalen und das Periodensystem der Elemente

Wasserstoffatome (siehe Kapitel 9) enthalten nur ein Proton und ein Elektron, doch alle anderen Atome enthalten mehr als ein Elektron. Wie geht man also mit derartigen Atomen um? Und wie geht man überhaupt mit Viel-Teilchen-Systemen wie einem einfachen Gas um?

Im Allgemeinen kann man Aufgaben dieser Art *nicht* berechnen – jedenfalls nicht exakt. Stellen Sie sich allein die Komplexität der Bewegung von zwei Elektronen in einem Heliumatom vor: Sie müssen nicht nur die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und dem Atomkern berücksichtigen, sondern auch die der Elektronen untereinander. Diese hängt natürlich von den jeweiligen Positionen ab. Demzufolge enthält der Hamilton-Operator nicht nur die Ausdrücke $1/r_1$ für die potentielle Energie des ersten Elektrons und $1/r_2$ für die des zweiten Elektrons,

$$-\frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

sondern auch einen Term proportional zu $-\frac{1}{|r_1 - r_2|}$, der die potentielle Energie beschreibt, die auf der Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen beruht. Und das macht es unmöglich eine exakte Wellenfunktion zu berechnen.

Allerdings gibt es verschiedene Möglichkeiten, um ein System mit mehreren Elektronen zu behandeln. Doch bevor man damit beginnt, sollte man sich bewusst sein, dass alle fundamentalen Teilchen der gleichen Art, wie etwa Elektronen und Photonen, ununterscheidbar sind. Es ist unmöglich, ein einzelnes Elektron oder ein anderes Teilchen auf irgendeine Art so zu kennzeichnen, dass sich seine Identität sich an einem anderen Ort oder zu einem anderen Zeitpunkt feststellen lässt. Diese Tatsache hat fundamentale Folgen; sie führt zu Gesetzmäßigkeiten, die den gesamten Aufbau der Materie bestimmen.

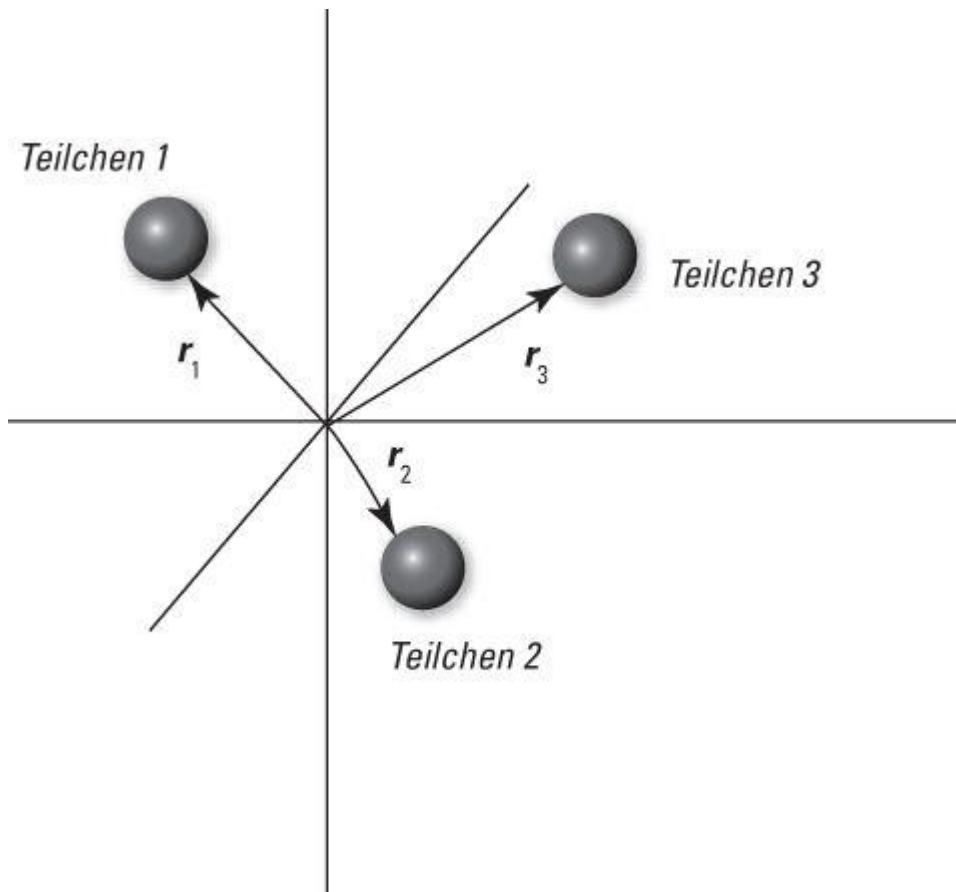
Demzufolge liegt der Schwerpunkt dieses Kapitels – neben einer Untersuchung von Systemen mit unterscheidbaren Teilchen – insbesondere in der Behandlung von Systemen mit identischen Teilchen. Ein wichtiges Hilfsmittel bei der Untersuchung von Viel-Teilchen-Systemen ist der Austauschoperator P_{ij} , der im folgenden eingeführt wird. Mit

seiner Hilfe kann man den Symmetriecharakter eines Systems beim Austausch von zwei Teilchen untersuchen. Dabei wird sich zeigen, dass man zwischen symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen unterscheiden kann, was wiederum weitreichende Folgen hat.

Doch zunächst beginnt dieses Kapitel mit einer allgemeinen Einführung in die Problematik von Viel-Teilchen-Systemen.

Viel-Teilchen-Systeme im Allgemeinen

Abbildung 11.1 zeigt ein Viel-Teilchen-System, bei dem mehrere Teilchen durch ihre Positionen beschrieben werden (der Spin wird hier nicht berücksichtigt). In diesem Abschnitt wird erklärt, wie so ein System quantenphysikalisch beschrieben wird.



11.1: Ein Viel-Teilchen-System

Abbildung

Wellenfunktionen und Hamilton-Operatoren

Beginnen wir bei der Wellenfunktion. Der Zustand eines Systems mit vielen Teilchen, wie es in Abbildung 11.1 dargestellt ist, wird durch $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)$ beschrieben. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich Teilchen 1 in $d^3\mathbf{r}_1$ befindet, Teilchen 2 in $d^3\mathbf{r}_2$, Teilchen 3 in $d^3\mathbf{r}_3$ usw. ist:

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 \dots$$

Die Normalisierung von $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)$ verlangt, dass Folgendes gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)|^2 d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 \dots = 1$$

Gut, und wie sieht der Hamilton-Operator aus, der die Energiezustände liefert? Wie sieht H aus, wenn $H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)$? Wenn Sie mit einem einzelnen Teilchen rechnen, können Sie die Gleichung wie folgt schreiben:

$$\frac{p^2}{2m} \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

Das kann man auch folgendermaßen ausdrücken:

$$\frac{p_i^2}{2m} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) + V(\mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) + V(\mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)$$

Die Gesamtenergie des Systems ist die Summe aus den Energien der einzelnen Teilchen (ignorieren Sie im Moment den Spin). Man kann also den Hamilton-Operator für Viel-Teilchen-Systeme folgendermaßen verallgemeinern:

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)$$

Daraus ergibt sich Folgendes:

$$\begin{aligned}
 H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) &= \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) \\
 &= \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3 \dots)
 \end{aligned}$$

Dabei ist m_i die Masse des i -ten Teilchens und V das Vielteilchen-Potential.

Nobelpreiswürdig: Nachdenken über Viel-Elektronen-Atome

Dieser Abschnitt beschäftigt sich damit, wie der Hamilton-Operator (siehe den vorangegangenen Abschnitt) für ein neutrales Viel-Elektronen-Atom aussieht. Ein Viel-Elektronen-Atom, wie in Abbildung 11.2 dargestellt, ist das in der Quantenphysik am häufigsten betrachtete Viel-Teilchen-System. $\mathbf{R}$ beschreibt den Ort des Kerns (relativ zum Massenschwerpunkt), $\mathbf{r}_1$ gibt den Ort des ersten Elektrons an (relativ zum Massenschwerpunkt), $\mathbf{r}_2$ den des zweiten usw.

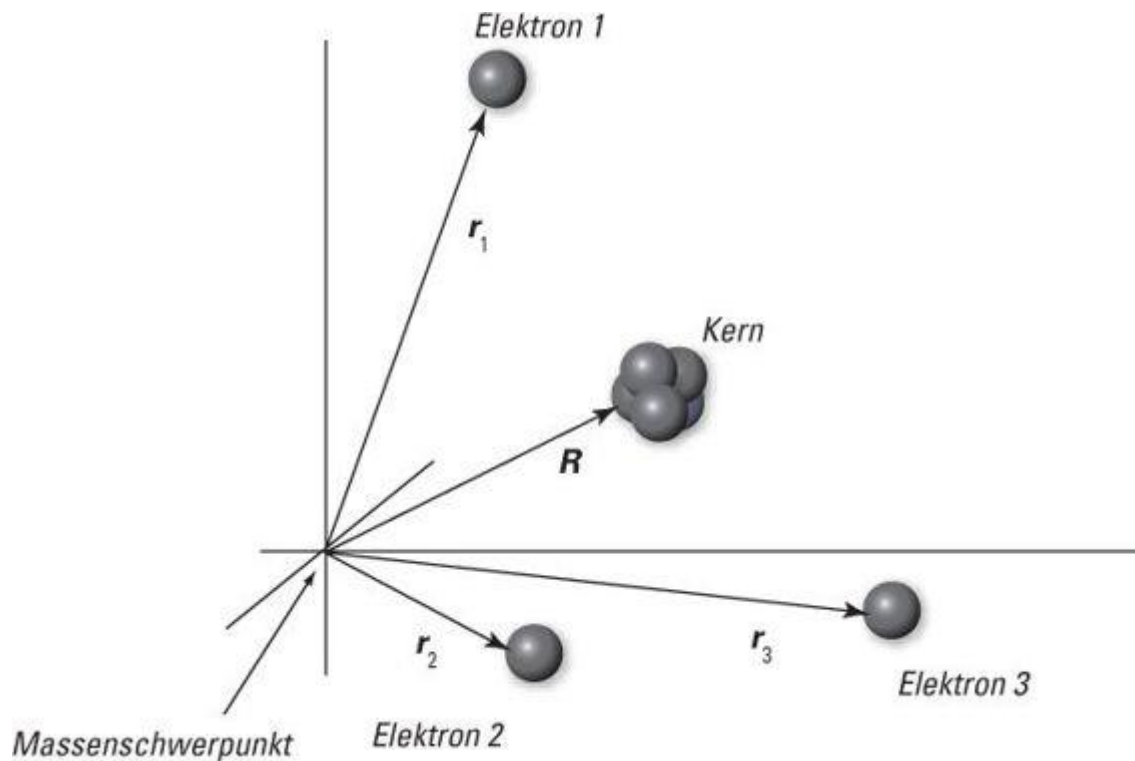


Abbildung 11.2: Ein Viel-Elektronen-Atom

Wenn man Z Elektronen hat, wird die Wellenfunktion durch $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R})$ beschrieben. Für die kinetische Energie der Elektronen und des Kerns gilt Folgendes:

$$E_{kin} = \sum_{i=1}^Z \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R})$$

Die potentielle Energie des Systems ist:

$$E_{pot} = -\sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) + \sum_{i>j}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R})$$

Wenn man diese beiden Gleichungen addiert, erhält man die Gesamtenergie ($E = E_{kin} + E_{pot}$) eines Viel-Elektronen-Atoms:

$$E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) = \sum_{i=1}^Z \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) \\ - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) + \sum_{i>j}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R})$$

Das sieht nun allerdings ziemlich verworren aus. Wollen Sie den Nobelpreis in Physik gewinnen? Dann müssen Sie nur die Lösung der obigen Gleichung präsentieren. Für alle Viel-Teilchen-Systeme, in denen alle Teilchen miteinander wechselwirken, gilt, dass man diese Gleichung nicht in N unabhängige Gleichungen aufteilen kann.



Betrachtet man Viel-Teilchen-Systeme, in denen die N Teilchen nicht miteinander wechselwirken, so kann man die Schrödinger-Gleichung in einen Satz von N unabhängigen Gleichungen aufspalten und deren Lösungen finden. Wenn die Teilchen allerdings miteinander wechselwirken und die Schrödinger-Gleichung von dieser Wechselwirkung abhängig ist, so kann man sie nicht für eine größere Zahl von Teilchen lösen.

Das heißt allerdings nicht, dass alles verloren ist. Man kann immer noch eine Menge über Gleichungen wie diese sagen, wenn man geschickt ist. Am Besten beginnt man mit einer Prüfung der Symmetrie des Problems, was im folgenden Abschnitt erläutert wird.

Ein hilfreiches Werkzeug: Austauschsymmetrie

Obwohl es unmöglich ist, eine allgemeine Lösung für eine Gleichung wie die der Gesamtenergie eines Vielteilchen-Atoms (vgl. vorangegangener Abschnitt) zu finden, kann man sich überlegen, was passiert, wenn man Teilchen miteinander vertauscht – und das Ergebnis ist sehr aufschlussreich. Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit der Idee der Austauschsymmetrie.

Die Ordnung zählt: Teilchen mit dem Austauschoperator vertauschen

Sie können herausfinden, was mit der Wellenfunktion passiert, wenn man zwei Teilchen miteinander vertauscht. Bei solchen Überlegungen gibt die Symmetrie der Wellenfunktion Aufschluss darüber, ob zwei Teilchen denselben Quantenzustand besetzen können. Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit dem Austausch von Teilchen und betrachtet symmetrische und antisymmetrische Funktionen.

Betrachten Sie die allgemeine Wellenfunktion für N Teilchen:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Man beachte: Um die Sache einfacher zu machen, wird in diesem Kapitel nur die Symmetrie in Abhängigkeit von der Ortskoordinate $\mathbf{r}$ betrachtet; Sie können aber auch andere Größen berücksichtigen, wie etwa Spin, Geschwindigkeit usw. Das würde die Aussagen nicht grundsätzlich verändern: Man kann alle messbaren Quantenzustände, wie Ort, Geschwindigkeit usw., in einem Quantenzustand zusammenfassen, der ξ genannt werden soll. Wenn Sie das machen, erhält die allgemeine Wellenfunktion für N Teilchen die folgende Form: $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N)$. Doch wie bereits gesagt, um die Sache einfacher zu machen, behandelt dieser Abschnitt nur die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$.

Nun stellen Sie sich vor, dass Sie einen Austauschoperator P_{ij} haben, der die Teilchen i und j vertauscht. Mit anderen Worten:

$$P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Und da $P_{ij} = P_{ji}$ ist, folgt:

$$\begin{aligned} P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= P_{ji}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \end{aligned}$$

Das zweimalige Anwenden des Austauschoperators bringt die vertauschten Teilchen wieder an ihren ehemaligen Platz zurück, somit ist $P_{ij}^2 = 1$. Das bedeutet:

$$\begin{aligned} P_{ij}P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) &= P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \end{aligned}$$

Im Allgemeinen kommutieren P_{ij} und P_{lm} nicht (wenn $ij \neq lm$). Das bedeutet $P_{ij}P_{lm} \neq P_{lm}P_{ij}$ ($ij \neq lm$). Deshalb ist $[P_{ij}, P_{lm}] \neq 0$ ($ij \neq lm$). Betrachten Sie beispielsweise vier Teilchen, deren

Wellenfunktion folgendermaßen lautet:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{r_1 r_3}{r_4} e^{r_2}$$

Lassen Sie die Austauschoperatoren P_{12} und P_{14} auf die Wellenfunktion wirken, um zu sehen, ob $P_{12}P_{14}$ gleich $P_{14}P_{12}$ ist. Es ist:

$$P_{14}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{r_4 r_3}{r_1} e^{r_2}$$

Daher folgt:

$$P_{12}P_{14}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{r_2 r_3}{r_1} e^{r_1}$$

Betrachten Sie nun $P_{14}P_{12}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$. Es ergibt:

$$P_{12}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{r_2 r_3}{r_4} e^{r_1}$$

Somit erhält man für:

$$P_{14}P_{12}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{r_4 r_3}{r_2} e^{r_1}$$

Vergleicht man $P_{12}P_{14}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{r_2 r_3}{r_1} e^{r_1}$ mit der letzten Gleichung, so erkennt man, dass $P_{12}P_{14}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \neq P_{14}P_{12}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$ ist. Mit anderen Worten, es ist *von Bedeutung*, in welcher Reihenfolge man die Austauschoperatoren anwendet.

Einteilung in symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen

Da $P_{ij}^2 = 1$ (siehe obigen Abschnitt) ist, hat P_{ij} die möglichen Eigenwerte 1 und -1 , wenn eine Wellenfunktion eine Eigenfunktion von P_{ij} ist. Für $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$ lautet eine Eigenfunktion von P_{ij} :

$$P_{ij}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \\ \text{oder } -\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Das bedeutet, dass es zwei Sorten von Eigenfunktionen des Austauschoperators gibt:

✓ **Symmetrische Eigenfunktionen:**

$$P_{ij}\psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

✓ **Antisymmetrische Eigenfunktionen:**

$$P_{ij}\psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = -\psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Betrachten wir also einige symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen. Was ist mit der folgenden – ist sie symmetrisch oder antisymmetrisch?

$$\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2$$

Man kann den Vertauschungsoperator P_{12} anlegen:

$$P_{12}\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2$$

Da $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2$, ist $\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ eine symmetrische Wellenfunktion, weil dann ja $P_{12}\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

Was ist mit dieser Wellenfunktion?

$$\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{r_1^2 + r_2^2}{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}$$

Wenden Sie wieder den Austauschoperator P_{12} an:

$$P_{12}\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{r_2^2 + r_1^2}{(r_2 - r_1)^2}$$

Gut, da $\frac{r_2^2 + r_1^2}{(r_2 - r_1)^2} = \frac{r_1^2 + r_2^2}{(r_1 - r_2)^2}$, gilt $P_{12}\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, somit ist $\psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ symmetrisch.

Eine weitere Wellenfunktion lautet:

$$\psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{5(r_1 - r_2)}{(r_1 - r_2)^2}$$

Jetzt wendet man P_{12} an:

$$P_{12}\psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{5(r_2 - r_1)}{(r_2 - r_1)^2}$$

Wie verhalten sich die beiden Gleichungen zueinander? Da

$\frac{5(r_2 - r_1)}{(r_2 - r_1)^2} = -\frac{5(r_1 - r_2)}{(r_1 - r_2)^2}$ ist, ist also $P_{12}\psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Daher ist $\psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ antisymmetrisch.

Und was ist mit dieser Wellenfunktion?

$$\psi_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{r_1 r_2}{(r_1 - r_2)^2} + r_1^2 + r_2^2$$

Man wendet P_{12} an:

$$P_{12}\psi_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{r_2 r_1}{(r_2 - r_1)^2} + r_2^2 + r_1^2$$

Und wie verhält sich diese zur Ursprungsgleichung?

$$\frac{r_1 r_2}{(r_1 - r_2)^2} + r_1^2 + r_2^2 = \frac{r_2 r_1}{(r_2 - r_1)^2} + r_2^2 + r_1^2$$

Offensichtlich ist $\psi_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ symmetrisch.

Sie denken jetzt wohl, das könnte so weitergehen, aber was ist mit der nächsten Wellenfunktion?

$$\psi_5(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{r_1 r_2}{(r_1 - r_2)^2} + r_1^2 - r_2^2$$

Man wendet jetzt P_{12} an:

$$P_{12}\psi_5(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{r_2 r_1}{(r_2 - r_1)^2} + r_2^2 - r_1^2$$

Wie verhalten sich die beiden Gleichungen zueinander?

$$\frac{r_1 r_2}{(r_1 - r_2)^2} + r_1^2 - r_2^2 \neq \frac{r_2 r_1}{(r_2 - r_1)^2} + r_2^2 - r_1^2$$

Somit ist $\psi_5(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ weder symmetrisch noch antisymmetrisch. Mit anderen Worten, $\psi_5(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ist keine Eigenfunktion des Austauschoperators P_{12} .

Systeme mit vielen unterscheidbaren Teilchen

Wenn Sie dieses Kapitel von Anfang an gelesen haben, wissen Sie jetzt etwas über den Austausch von Teilchen. Jetzt betrachten Sie ein System von Teilchen, die man unterscheiden kann, also ein System von erkennbar verschiedenen Teilchen. Wie Sie in diesem Abschnitt sehen werden, kann man solche Systeme entkoppeln und in linear unabhängige Gleichungen auflösen.

Stellen Sie sich vor, Sie haben ein System aus zahlreichen verschiedenen Raumschiffen, die im Raum treiben. Sie können all diese Raumschiffe unterscheiden, da sie alle verschieden sind – sie haben beispielsweise verschiedene Massen.

Jedes Raumschiff beeinflusst nur sein eigenes Potential; das bedeutet, dass das Potential jedes Raumschiffes nicht von den Potentialen der anderen Raumschiffe abhängt. Folglich ist das Potential aller Raumschiffe die Summe aus den jeweiligen Potentialen der einzelnen Raumschiffe. Wenn man N Raumschiffe betrachtet, gilt für das Potential:

$$E_{\text{pot}} = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i)$$

Wenn man die potentielle Energie, wie in diesem Fall, in eine Summe von unabhängigen Ausdrücken verwandeln kann, wird das Leben natürlich einfacher. Der Hamilton-Operator lautet dann folgendermaßen:

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V_i(\mathbf{r}_i) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Diese Gleichung ist doch bedeutend einfacher als die für das Atom mit 7 Elektronen:

$$\begin{aligned} H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) = & \sum_{i=1}^z \frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) \\ & - \sum_{i=1}^z \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) + \sum_{i>j}^z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_z, \mathbf{R}) \end{aligned}$$

Beachten Sie, dass man die obige Gleichung für das Potential aller Raumschiffe in N verschiedene Gleichungen aufteilen kann:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi_i(\mathbf{r}_i) + V_i(\mathbf{r}_i) \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{r}_i)$$

Die Gesamtenergie ist dann die Summe der Energien der einzelnen Raumschiffe:

$$E = \sum_{i=1}^N E_i$$

Und die Wellenfunktion ist das Produkt der Einzelfunktionen:

$$\psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_{n_i}(\mathbf{r}_i)$$

Dabei ist Π ein Zeichen wie Σ , nur dass es für das Produkt der dahinter stehenden Terme steht, nicht für ihre Summe; n_i weist auf alle Quantenzahlen für das i -te Teilchen hin.



Wenn die Teilchen, mit denen Sie arbeiten, unterscheidbar sind und voneinander unabhängige Potentiale besitzen, so wird das Rechnen mit ihnen einfacher, wie Sie in diesem Abschnitt gesehen haben. Man kann dann das System in N voneinander unabhängige Einteilchen-Systeme unterteilen. Die Gesamtenergie ist dann die Summe der jeweiligen Energien der einzelnen Teilchen. Die Schrödinger-Gleichung lässt sich in N verschiedene Gleichungen aufteilen. Und die Wellenfunktion ist schließlich ein Produkt aus den Wellenfunktionen der N verschiedenen Teilchen.

Betrachten wir ein Beispiel. Stellen Sie sich vor, Sie haben vier Teilchen mit unterschiedlicher Masse in einem Potentialtopf. Sie wollen die Energie und die Wellenfunktion des Systems bestimmen. Das Potential des Potentialtopfs lautet für jedes der nicht miteinander wechselwirkenden Teilchen wie folgt:

$$V_i(x_i) = 0 \text{ für } 0 \leq x_i \leq a$$

$$V_i(x_i) = \infty \text{ für } x_i > a$$

$$V_i(x_i) = \infty \text{ für } x_i < 0$$

Somit lautet die Schrödinger-Gleichung:

$$E \psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \sum_{i=1}^4 \frac{-\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dx_i^2} \psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(x_1, x_2, x_3, x_4)$$

Man kann diese Gleichung separieren, sodass man vier Einteilchen-Gleichungen erhält:

$$✓ \quad E_1 \psi_{n_1}(x_1) = \frac{-\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx_1^2} \psi_{n_1}(x_1)$$

$$✓ \quad E_2 \psi_{n_2}(x_2) = \frac{-\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx_2^2} \psi_{n_2}(x_2)$$

$$✓ \quad E_3 \psi_{n_3}(x_3) = \frac{-\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2}{dx_3^2} \psi_{n_3}(x_3)$$

$$✓ \quad E_4 \psi_{n_4}(x_4) = \frac{-\hbar^2}{2m_4} \frac{d^2}{dx_4^2} \psi_{n_4}(x_4)$$

Dieses eindimensionale Problem wurde bereits in Kapitel 3 gelöst. Die Energieniveaus sind:

$$E_i = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_i^2}{2m_i a^2}$$

$$E = \sum_{i=1}^N E_i$$

Und weil die Gesamtenergie die Summe der einzelnen Energien ist, gilt:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[\frac{n_1^2}{m_1} + \frac{n_2^2}{m_2} + \frac{n_3^2}{m_3} + \frac{n_4^2}{m_4} \right]$$

Im Grundzustand aller vier Teilchen gilt $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$ und daher gilt für die Energie:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left[\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} + \frac{1}{m_4} \right]$$

Für ein Teilchen in einem Potentialtopf lautet die Wellenfunktion für ein eindimensionales System:

$$\psi_i(x) = \frac{2^{1/2}}{a^{1/2}} \sin\left(\frac{n_i \pi}{a} x_i\right)$$

Die Wellenfunktion für das Vier-Teilchen-System ist gerade das Produkt aus den einzelnen Wellenfunktionen und lautet:

$$\psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{4}{a^2} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi}{a} x_3\right) \sin\left(\frac{n_4 \pi}{a} x_4\right)$$

Für den Grundzustand $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$ lautet die Wellenfunktion beispielsweise:

$$\psi_{1,1,1,1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{4}{a^2} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_3\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_4\right)$$

Systeme mit N unabhängigen, unterscheidbaren Teilchen lassen oft Lösungen zu, wie Sie hier gesehen haben; man muss das System nur in N unabhängige Gleichungen aufteilen.

Mit vielen identischen Teilchen jonglieren

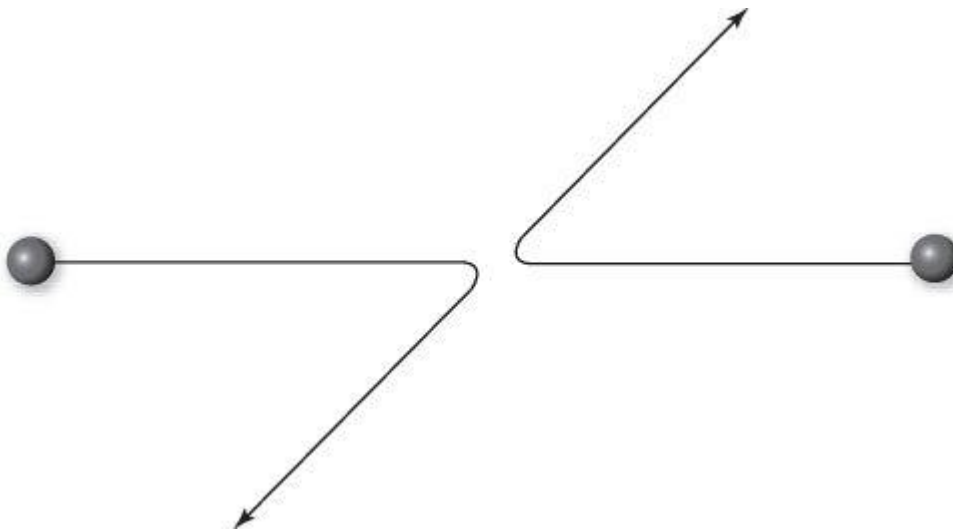
Das richtige Abenteuer beginnt erst, wenn die Teilchen in einem Viel-Teilchen-System alle ununterscheidbar sind. Wie wollen Sie dann wissen, welches Teilchen gerade wo ist, wenn Sie die Teilchen nicht auseinander halten können? Der folgende Abschnitt erklärt, was in diesem Fall passiert.

Die Identität verlieren

Stellen Sie sich vor, Sie haben mehrere Billardkugeln und wollen sie klassisch betrachten. Sie können jede Kugel unterschiedlich kennzeichnen, und wenn die Kugeln dann auf dem Billardtisch durcheinander wirbeln, sind Sie in der Lage, sie zu unterscheiden – Ball sieben in die Ecktasche usw. Klassisch betrachtet behalten identische Teilchen ihre Individualität. Sie können sie auseinanderhalten.

In der Quantenmechanik ist das nicht so, da man den Ort eines Teilchens nicht mit absoluter Genauigkeit bestimmen kann. Wenn Sie also mehrere Elektronen haben, verlieren Sie sofort den Überblick darüber, welches Elektron welches ist – Sie können sie nicht so wie Billardkugeln kennzeichnen.

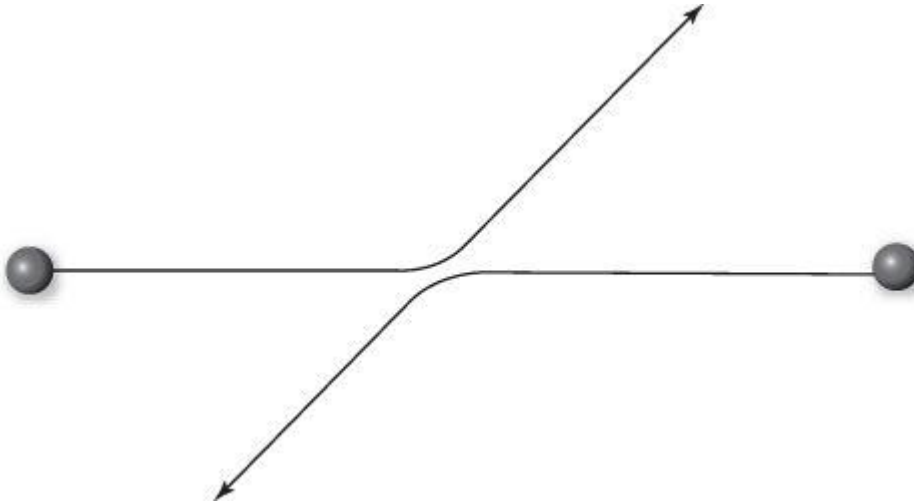
Betrachten Sie beispielsweise die Situation in Abbildung 11.3. Zwei Elektronen stoßen zusammen und fliegen wieder auseinander. Es sieht aus, als könne man den Lauf der beiden leicht verfolgen.



11.3: Zwei Elektronen stoßen zusammen

Abbildung

Jetzt betrachten Sie aber einmal die Situation in Abbildung 11.4 – die Elektronen können auch so zusammengestoßen und auseinander geflogen sein und nicht wie in Abbildung 11.3 gezeigt. Sie können das nicht wissen.



Abbildung

11.4: Zwei Elektronen stoßen zusammen

Welches Elektron ist also welches? Aus Ihrer Sicht können Sie das nicht sagen. Sie können Detektoren benutzen, um die Elektronen zu fangen; Sie können aber nicht entscheiden, welches der ankommenden Elektronen in welchen Detektor fliegt, da beide in den Abbildungen 11.3 und 11.4 gezeigten Situationen möglich sind.



In der Quantenmechanik behalten identische Teilchen ihre Individualität in Bezug auf messbare oder beobachtbare Größen nicht bei. Sie verlieren ihre Individualität, sobald sie in Kontakt mit ähnlichen Teilchen kommen. Das gilt für jedes N-Teilchen-System. Wenn N identische Teilchen miteinander wechselwirken, kann man nicht genau bestimmen, welches bei r_1 oder r_2 oder r_3 oder r_4 usw. ist.

Symmetrie und Antisymmetrie

Der Verlust der Individualität unter ähnlichen Teilchen bedeutet in der Praxis, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte unverändert bleibt, wenn man Teilchen austauscht. Wenn Sie beispielsweise Elektron 10281 mit Elektron 59830 vertauschen, haben Sie immer noch die gleiche Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron d^3r_{10281} und d^3r_{59830} besetzt.

Mathematisch betrachtet sieht das folgendermaßen aus (dabei sind r und s der Ort und der Spin der Teilchen):

$$\left| \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_N s_N) \right|^2 = \left| \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_N s_N) \right|^2$$

Diese Gleichung bedeutet, dass Folgendes gilt:

$$\psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_N s_N) = \pm \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_N s_N)$$



Demzufolge muss die Wellenfunktion eines Systems mit N identischen Teilchen bei Austausch zweier Teilchen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein. Es stellt sich heraus, dass hier der Spin der entscheidende Faktor ist:

✓ **Antisymmetrische Wellenfunktion:** Wenn die Teilchen einen halbzahligen Spin haben ($1/2$, $3/2$ usw.), lautet die Wellenfunktion bei Austausch zweier Teilchen:

$$\begin{aligned} & \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_N s_N) \\ &= -\psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_N s_N) \end{aligned}$$

✓ **Symmetrische Wellenfunktion:** Wenn die Teilchen einen ganzzahligen Spin haben (0 , 1 usw.), lautet die Wellenfunktion bei Austausch zweier Teilchen:

$$\begin{aligned} & \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_N s_N) \\ &= \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_N s_N) \end{aligned}$$

Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen zeigen ein unterschiedliches physikalisches Verhalten.



Teilchen, die einen ganzzahligen Spin haben, wie Photonen oder Pi-Mesonen, werden *Bosonen* genannt. Teilchen mit halbzahligem Spin, wie Elektronen, Protonen und Neutronen heißen dagegen *Fermionen*. Ein System aus Fermionen verhält sich völlig anders als ein System aus Bosonen.

Austausch-Entartung: Der gleichbleibende Hamilton-Operator

Man kann den Hamilton-Operator wie folgt schreiben:

$$H(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N)$$

Er ändert sich nicht, wenn man zwei identische Teilchen austauscht. Mit anderen Worten, der Hamilton-Operator ändert sich nicht, egal wie viele identische Teilchen man austauscht. Das nennt man *Austausch-Entartung*, mathematisch ausgedrückt:

$$H(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = H(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_N s_N)$$

Das heißt nebenbei bemerkt, dass der Austauschoperator P_{ij} eine Invariante der Bewegung ist, da er mit dem Hamilton-Operator kommutiert:

$$[H, P_{ij}] = 0$$

Zusammengesetzte Teilchen und ihre Symmetrie

Im vorletzten Abschnitt »Symmetrie und Antisymmetrie« wurde gezeigt, dass die Wellenfunktion eines Systems von N Teilchen bei Austausch zweier Teilchen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist:

✓ **Symmetrisch:**

$$\psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_N s_N) = \psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_N s_N)$$

✓ **Antisymmetrisch:**

$$\psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_N s_N) = -\psi(r_1 s_1, r_2 s_2, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_N s_N)$$

Dies ist die Grundlage des *Symmetrisierungspostulats*, das besagt, dass es in einem System aus N identischen Teilchen nur symmetrische oder antisymmetrische Zustände gibt; und damit insbesondere, dass keine Zustände mit gemischter Symmetrie auftreten können.



Das Symmetrisierungspostulat, wie es auch in der Natur beobachtet wird, besagt also, dass

✓ Teilchen mit halbzahligem Spin ($1/2, 3/2, 5/2, \dots$) Fermionen sind und bei Austausch zweier Teilchen antisymmetrische Zustände annehmen.

✓ Teilchen mit ganzzahligem Spin ($0, 1, 2, \dots$) Bosonen sind und bei Austausch zweier Teilchen symmetrische Zustände annehmen.

Demzufolge ist die Wellenfunktion von N Fermionen vollständig antisymmetrisch, während die Wellenfunktion von N Bosonen vollständig symmetrisch ist.

Es sieht so aus, als könne man sehr einfach bestimmen, ob ein Teilchen ein Fermion oder ein Boson ist – man schaut es sich einfach an. Elektronen, Protonen und Neutronen sind beispielsweise Fermionen, denn sie haben einen halbzahligem Spin. Und Photonen, Pi-Mesonen usw. sind Bosonen, mit ganzzahligem Spin.

Was ist aber nun, wenn das Teilchen, das Sie betrachten, ein zusammengesetztes Teilchen ist? Was ist, wenn Sie beispielsweise ein Alpha-Teilchen betrachten, das aus zwei Protonen und zwei Neutronen besteht? Ist das ein Fermion oder ein Boson?

Protonen und Neutronen bestehen tatsächlich aus je drei Quarks, Pi-Mesonen hingegen aus zwei Quarks – und Quarks haben den Spin $1/2$.

Zusammengesetzte Teilchen können ebenfalls Fermionen oder Bosonen sein; das hängt davon ab, ob der Gesamtspin des zusammengesetzten Teilchens halb- oder ganzzahlig ist. Wenn der Spin des zusammengesetzten Teilchens $1/2$, $3/2$, $5/2$ usw. ist, so ist es ein Fermion. Wenn der Spin des zusammengesetzten Teilchens 0 , 1 , 2 usw. ist, dann handelt es sich um ein Boson.



Im Allgemeinen gilt, dass das zusammengesetzte Teilchen ein Fermion ist, wenn es aus einer ungeraden Anzahl von Fermionen besteht. Sonst ist es ein Boson. Da Quarks Fermionen sind und Protonen und Neutronen aus jeweils drei Quarks bestehen, sind diese schließlich Fermionen. Da das Pi-Meson aus zwei Quarks besteht, ist es ein Boson. Das Alpha-Teilchen, das aus zwei Protonen und zwei Neutronen besteht, ist ein Boson. Man kann auch Atome als zusammengesetzte Teilchen betrachten. Nehmen Sie beispielsweise das Wasserstoffatom: Es besteht aus einem Proton (ein Fermion) und einem Elektron (ebenfalls ein Fermion), zusammen also zwei Fermionen. Das macht das Wasserstoffatom also zu einem Boson.

Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen

Zahlreiche Wellenfunktionen, die Lösungen physikalischer Problemstellungen wie etwa beim Potentialtopf sind, sind nicht von Natur aus symmetrisch oder antisymmetrisch; sie sind einfach nur *asymmetrisch*. Mit anderen Worten, sie haben keine definierte Symmetrie. Wie gelangt man in solchen Fällen zu symmetrischen oder antisymmetrischen Wellenfunktionen?

Die Antwort lautet, dass Sie sie selber erzeugen müssen, und das tun Sie, indem Sie asymmetrische Funktionen addieren. Betrachten Sie beispielsweise eine asymmetrische Wellenfunktion von zwei Teilchen, $\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2)$.



Um eine symmetrische Wellenfunktion zu erzeugen, müssen Sie $\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2)$ zu $\psi(\mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_1s_1)$, bei der die beiden Teilchen vertauscht sind, addieren. Nimmt man an, dass $\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2)$ und $\psi(\mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_1s_1)$ normalisiert sind, kann man so eine symmetrische Wellenfunktion erzeugen:

$$\psi_s(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2) + \psi(\mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_1s_1)]$$



Wenn man die beiden Wellenfunktionen voneinander subtrahiert, erhält man eine antisymmetrische Wellenfunktion:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2) - \psi(\mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_1s_1)]$$

Diese Rechnung wird schnell umfangreicher, wenn Sie mehr Teilchen hinzunehmen, da alle Teilchen vertauscht werden müssen. Wie sieht zum Beispiel eine symmetrische Wellenfunktion aus, die auf der asymmetrischen Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_3s_3)$ beruht? Sie lautet folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \psi_s(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_3s_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} & [\psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_3s_3) + \psi(\mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_3s_3, \mathbf{r}_2s_2) + \psi(\mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_3s_3, \mathbf{r}_1s_1) \\ & + \psi(\mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_3s_3) + \psi(\mathbf{r}_3s_3, \mathbf{r}_1s_1, \mathbf{r}_2s_2) + \psi(\mathbf{r}_3s_3, \mathbf{r}_2s_2, \mathbf{r}_1s_1)] \end{aligned}$$

Und was ist mit der antisymmetrischen Wellenfunktion? Sie lautet:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_3 s_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_3 s_3) - \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_3 s_3, \mathbf{r}_2 s_2) + \psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_3 s_3, \mathbf{r}_1 s_1) - \psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_3 s_3) + \psi(\mathbf{r}_3 s_3, \mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) - \psi(\mathbf{r}_3 s_3, \mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)]$$

Auf diese Weise kann man theoretisch symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen für jedes System aus N Teilchen erzeugen.

Identische nicht wechselwirkende Teilchen

Wenn man mit identischen, nicht wechselwirkenden Teilchen arbeitet, wird alles viel einfacher, da man die Gleichungen einzeln behandeln kann und nicht alles in eine einzige stecken muss. Stellen Sie sich vor, Sie haben ein System aus N identischen Teilchen, wobei jedes das gleiche Potential spürt. Dann kann man die Schrödinger-Gleichung in N identische Ein-Teilchen-Gleichungen separieren:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi_i(\mathbf{r}_i) + V_i(\mathbf{r}_i) \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{r}_i)$$

Die Gesamtenergie ergibt sich dabei aus der Summe der Energien der einzelnen Teilchen:

$$E = \sum_{i=1}^N E_i$$

Jetzt betrachten Sie die Wellenfunktion des Systems. Weiter oben in diesem Kapitel (im Abschnitt »Systeme mit vielen unterscheidbaren Teilchen«) haben Sie die Wellenfunktion für ein System von N unterscheidbaren Teilchen betrachtet und als Ergebnis das Produkt aus den einzelnen Wellenfunktionen erhalten:

$$\psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_{n_i}(\mathbf{r}_i)$$

Diese Gleichung gilt jedoch nicht für identische Teilchen, da man nicht sagen kann, Teilchen 1 ist in Zustand $\psi_1(\mathbf{r}_1)$, Teilchen 2 ist in Zustand $\psi_2(\mathbf{r}_2)$ usw. Es handelt sich hier ja um identische Teilchen, nicht um unterscheidbare wie weiter oben.

Diese Gleichung kann hier außerdem nicht gelten, da ihr die innewohnende Symmetrie fehlt, denn Systeme aus N identischen Teilchen müssen eine definierte Symmetrie besitzen. Man kann dann die Wellenfunktionen also nicht einfach multiplizieren, sondern muss ein wenig vorsichtiger sein.

Wellenfunktionen in Zwei-Teilchen-Systemen

Wie erstellt man symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen für ein Zwei-Teilchen-System? Man beginnt mit den Ein-Teilchen-Wellenfunktionen (siehe den vorletzten Abschnitt »Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen«):

$$\checkmark \quad \psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) + \psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)]$$

$$\checkmark \quad \psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) - \psi(\mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_1 s_1)]$$

Entsprechend lautet die symmetrische Wellenfunktion, die hier aus zwei Ein-Teilchen-Wellenfunktionen besteht, wie folgt:

$$\psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2 s_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1 s_1)]$$

Und die antisymmetrische Wellenfunktion, die ebenfalls aus zwei Ein-Teilchen-Wellenfunktionen besteht, lautet:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2 s_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1 s_1)]$$

Dabei steht n_i für sämtliche Quantenzahlen des i -ten Teilchens.

Beachten Sie insbesondere, dass $\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = 0$, wenn $n_1 = n_2$. Das bedeutet, dass die antisymmetrische Wellenfunktion verschwindet, wenn zwei Teilchen den gleichen Satz von Quantenzahlen haben; das ist dann der Fall, wenn sich beide im gleichen Quantenzustand befinden. Daraus ergeben sich wichtige physikalische Folgen.

Man kann $\psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2)$ auch folgendermaßen ausdrücken:

$$\psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_p P \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2)$$

wobei P der Permutationsoperator ist, der die Permutation seiner Argumente bewirkt, und das Fakultät-Zeichen auf die zwei möglichen Permutationen hinweist.

Und $\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2)$ kann man wie folgt schreiben:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_P (-1)^P P \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2)$$

Dabei ist der Ausdruck $(-1)^P$ gleich 1 für gerade Permutationen (bei denen man beides vertauscht, $\mathbf{r}_1 s_1$ und $\mathbf{r}_2 s_2$ und n_1 und n_2) und -1 für ungerade Permutationen (bei denen $\mathbf{r}_1 s_1$ und $\mathbf{r}_2 s_2$ vertauscht wird, nicht aber n_1 und n_2 ; oder man vertauscht n_1 und n_2 , nicht aber $\mathbf{r}_1 s_1$ und $\mathbf{r}_2 s_2$).

Manchmal drückt man $\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2)$ auch mithilfe einer Determinante aus:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \det \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) & \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2 s_2) \\ \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1 s_1) & \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) \end{vmatrix}$$

Beachten Sie, dass diese Determinante 0 ergibt, wenn $n_1 = n_2$.

Wellenfunktionen für Drei-Teilchen-oder-mehr-Systeme

Auch bei einem Drei-Teilchen-System wird die Wellenfunktion aus Ein-Teilchen-Wellenfunktionen zusammengesetzt.

Die symmetrische Wellenfunktion lautet:

$$\psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_3 s_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P P \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) \psi_{n_3}(\mathbf{r}_3 s_3)$$

Und die antisymmetrische Wellenfunktion ist:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \mathbf{r}_3 s_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P (-1)^P P \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) \psi_{n_3}(\mathbf{r}_3 s_3)$$

Das Fakultät-Zeichen weist auf die 6 (= 3!) möglichen Permutationen hin. Diese antisymmetrische Wellenfunktion wird null, wenn auch nur zwei Teilchen den gleichen Satz von Quantenzahlen haben ($n_i = n_j$, $i \neq j$).

Nun erraten Sie sicher schon, wie man diese Gleichungen für ein System von N Teilchen verallgemeinern kann? Hier lautet die symmetrische Wellenfunktion:

$$\psi_s(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P P \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_N s_N)$$

Und die antisymmetrische Wellenfunktion lautet:

$$\psi_a(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P P \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1 s_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2 s_2) \dots \psi_{n_N}(\mathbf{r}_N s_N)$$

Die große Erkenntnis ist, dass die antisymmetrische Wellenfunktion null wird, wenn auch nur zwei Teilchen den gleichen Satz von Quantenzahlen haben ($n_i = n_j$, $i \neq j$), denn das hat wichtige Folgen für die Physik, wie Sie als nächstes sehen werden.

Nicht für Alle ist Platz: Das Pauli-Prinzip

Die antisymmetrische Wellenfunktion verschwindet, wenn zwei Teilchen in einem N-Teilchen-System die gleichen Quantenzahlen haben. Da Fermionen Teilchen mit antisymmetrischen Wellenfunktionen sind, kann man genauso gut sagen, dass in einem System von N Teilchen zwei Fermionen nicht die gleichen Quantenzahlen haben können; das heißt, sie können nicht den gleichen Zustand einnehmen.

Dieser Gedanke, den der österreichische Physiker Wolfgang Pauli 1925 zuerst formuliert hat, heißt das *Pauli-Prinzip* bzw. *Pauli-Verbot*. Den Schwerpunkt der Diskussion bildete damals das Atom, und das Pauli-Prinzip bezieht sich auf Elektronen (die zu den Fermionen gehören), die in allen Atomen vorhanden sind.



Das *Pauli-Prinzip* besagt, dass zwei Elektronen in einem Atom nicht den gleichen Quantenzustand besetzen können. Dieses Ergebnis ist wesentlich für die Struktur der Atome. Elektronen können sich nicht einfach irgendwo ansammeln, sondern müssen die Quantenzustände auffüllen, die noch nicht besetzt sind. Das gilt nicht für Bosonen – wenn Sie beispielsweise mehrere Alpha-Teilchen (Bosonen) haben, dann können sie sich alle im gleichen Quantenzustand befinden.

Elektronen in Atomen werden durch verschiedene Quantenzahlen beschrieben, wie n (die Energie), l (der Drehimpuls), m (die z-Komponente des Drehimpulses) und m_s (die z-Komponente des Spins). Wenn man diese Informationen verwendet, kann man die Elektronenstruktur der Atome erstellen.

Das Periodensystem der Elemente

Einer der größten Erfolge der Schrödinger-Gleichung, zusammen mit dem Pauli-Prinzip (siehe letzter Abschnitt), ist die Erklärung der Elektronenstruktur der Atome.



Atome besitzen eine Schalenstruktur, und die Elektronen füllen diese Schalen nach dem Pauli-Prinzip auf, das besagt, dass zwei Elektronen nicht den gleichen Zustand besetzen können:

- ✓ Die Hauptschale ist durch die Hauptquantenzahl n gekennzeichnet, die die Entfernung des Elektrons vom Kern beschreibt.
- ✓ Diese Schalen haben Unterschalen, die durch die Drehimpulsquantenzahl l beschrieben werden.
- ✓ Jede Unterschale hat weitere Unterschalen, die *Orbitale* heißen, die durch die Quantenzahl m , also die z -Komponente des Drehimpulses, beschrieben werden.

Die Schale n hat $n - 1$ Unterschalen, entsprechend $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Und daraus folgt, dass jede Unterschale $2l + 1$ Orbitale hat, entsprechend $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$.

Wie beim Wasserstoffatom gesehen, werden die verschiedenen Unterschalen ($l = 0, 1, 2, 3, 4$ usw.) durch die Buchstaben s, p, d, f, g, h usw. beschrieben. So hat beispielsweise für ein gegebenes n ein s -Zustand ein Orbital ($m = 0$), ein p -Zustand drei Orbitale ($m = -1, 0, +1$), ein d -Zustand fünf Orbitale ($m = -2, -1, 0, 1, 2$) usw.

Darüber hinaus kann jedes Orbital, entsprechend der z -Komponente des Spins m_s , zwei Elektronen aufnehmen – eines mit Spin nach oben und eins mit Spin nach unten.

Wie füllen also die Elektronen, die Fermionen sind, die Struktur des Atoms? Elektronen können keinen Quantenzustand einnehmen, der schon besetzt ist. Befindet sich das Atom im Grundzustand, so füllen die Elektronen die Orbitale in der Reihenfolge nach steigender Energie auf. Wenn alle Orbitale einer Unterschale aufgefüllt sind, so geht das nächste Elektron in die nächste Unterschale. Und wenn die Unterschale gefüllt ist, so geht das nächste Elektron zur nächsten Schale usw.

Wenn man die verschiedenen Elektronenschalen, Unterschalen und Orbitale auffüllt, so erhält man natürlich verschiedene Elektronenstrukturen. Und da die Wechselwirkung zwischen Elektronen die Grundlage der Chemie ist, erhält man verschiedene chemische Eigenschaften der Atome, wenn die Elektronen die Quantenniveaus dieser Atome sukzessive auffüllen – was in den Perioden (Reihen) und Gruppen (Spalten) des Periodensystems zum Ausdruck kommt.

Das Wichtigste von Kapitel 11 noch einmal in Kürze

In den vorangegangenen Kapiteln wurden bereits viele Erscheinungen behandelt, die bei Atomen auftreten, allerdings nur für ein einzelnes Elektron. Dieses Kapitel beschäftigt sich dagegen erstmals mit Systemen, die aus zwei oder mehr Teilchen bestehen. Ein wichtiger Unterschied zwischen diesen beiden Gebieten der Quantenphysik besteht darin, dass für ein Viel-Teilchen-System die Schrödinger-Gleichung nicht mehr exakt lösbar ist. Wie sich gezeigt hat, gibt es aber andere Möglichkeiten, Systeme mit mehreren Teilchen zu behandeln, die zu wichtigen Ergebnissen wie der Erklärung des Pauli-Prinzips oder dem Periodensystem der Elemente führen.

Untersucht man ein Viel-Teilchen-System aus N unterscheidbaren Teilchen, so muss man zunächst prüfen, ob die Teilchen miteinander wechselwirken. Ist dies nicht der Fall, so ist die Wellenfunktion das Produkt aus den N Einteilchen-Wellenfunktionen, der zugehörige Energieeigenwert ist die Summe aus den Einteilchen-Energien.

Betrachtet man dagegen Systeme aus N identischen Teilchen, so ist die Situation komplizierter; man muss sich dabei mit den Konsequenzen befassen, die aus den quantenmechanischen Regeln für Systeme mit ununterscheidbaren Teilchen folgen.

Eine wichtige Größe zur Beschreibung von Viel-Teilchen-Systemen ist der Symmetriecharakter. Mithilfe des Permutationsoperators P_{ij} , der die Teilchen i und j miteinander vertauscht, kann gezeigt werden, dass ein Viel-Teilchen-System bei Teilchenaustausch entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist und diese Eigenschaft auch in jedem Fall beibehält. Das heißt, der Symmetriecharakter eines Systems ist eine Erhaltungsgröße.

Wie Sie wissen, gibt es zwei Sorten von Teilchen, Bosonen und Fermionen. Fermionen haben halbzahliges Spin und antisymmetrische Wellenfunktionen (Elektronen sind Fermionen), Bosonen haben ganzzahliges Spin und symmetrische Wellenfunktionen. Wie im Abschnitt »Identische nicht wechselwirkende Teilchen« gezeigt wurde, wird die antisymmetrische Wellenfunktion null, wenn sich zwei Teilchen im gleichen Quantenzustand befinden. Daraus folgt, dass zwei Fermionen des gleichen Systems nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen können. Genau das ist der Inhalt des Pauli-Prinzips.

Anders ausgedrückt besagt das Pauli-Prinzip, dass Fermionen nicht am selben Ort existieren können, sich also »ausschließen« – daher trägt das Pauli-Prinzip auch den Namen Paulisches Ausschlussprinzip.

Da auch die Quarks, die Bestandteile der Protonen und Neutronen, zu den Fermionen gehören, gilt das Pauli-Prinzip für den gesamten Aufbau der Materie. Somit beschreibt das Pauli-Prinzip nicht nur den Aufbau von Viel-Elektronen-Atomen, sondern spielt auch beim Aufbau des Periodensystems der Elemente eine entscheidende Rolle.

Näherungsmethode: Störungstheorie

In diesem Kapitel ...

- ▶ Nicht entartete und entartete Störungstheorie
- ▶ Gestörte harmonische Oszillatoren
- ▶ Der Stark-Effekt und gestörte Wasserstoffatome

Obwohl in den letzten Kapiteln einige wichtige und interessante quantenmechanische Probleme gelöst wurden, ist bei der Untersuchung komplizierterer Systeme eine exakte Lösung nicht möglich. In diesem Fall hat man aber die Möglichkeit, auf Näherungsverfahren zurückzugreifen. Eine dieser Methoden ist die Störungstheorie, die man anwendet, wenn sich ein Problem nur wenig von einem exakt lösbaren unterscheidet.

Das ist beispielsweise der Fall, wenn man zwei Typen von Systemen miteinander verbindet. Um ein Beispiel zu geben: Sie wissen sehr genau über Potentialtöpfe Bescheid, und Sie kennen sich mit Elektronen in Magnetfeldern aus. Was aber ist, wenn Sie diese beiden Probleme miteinander verknüpfen? Die Wellenfunktionen der beiden Systeme, die Sie genau kennen, sind jetzt nicht mehr anwendbar – Sie brauchen statt dessen eine Art von gemischter Wellenfunktion.

Die Rettung heißt Störungstheorie! Mithilfe dieser Theorie können Sie Mischungen von Situationen behandeln, solange die Störung nicht zu groß ist. In diesem Kapitel lernen Sie die zeitunabhängige Störungstheorie kennen, außerdem entartete und nicht entartete Hamilton-Operatoren. Sie betrachten schließlich einige Beispiele, bei denen sich etwa ein harmonischer Oszillator oder Wasserstoffatome in einem elektrischen Feld befinden.

Die zeitunabhängige Störungstheorie



Hinter der zeitunabhängigen Störungstheorie steckt die Idee, dass man mit einem System beginnt, dessen Wellenfunktionen und Energieniveaus man kennt. Bis zu diesem Punkt ist alles bekannt. Dann passiert etwas Neues: Eine *Störung* tritt auf, und die Situation ändert sich. Dies kann beispielsweise ein elektrisches oder magnetisches Feld sein, das Sie an Ihr wohlbekanntes System anlegen und das folglich das System verändert.

Mithilfe der Störungstheorie können Sie solche Situationen behandeln, solange die Störung nicht zu stark ist. Mit anderen Worten, wenn Sie ein schwaches Magnetfeld an Ihr bekanntes System anlegen, werden sich die Energieniveaus kaum ändern, sondern müssen nur leicht korrigiert werden. (Man beachte: Deshalb heißt es *Störungstheorie* und nicht *Starke-Beeinträchtigungs-Theorie*.) Die Änderung, die Sie am System vornehmen, ist so gering, dass Sie die neuen Energieniveaus und Wellenfunktionen über *Korrekturen* der ursprünglichen Energieniveaus und Wellenfunktionen des ungestörten Systems berechnen können.

Was bedeutet es nun für physikalische Ausdrücke, wenn man von Störungen spricht? Stellen Sie sich vor, Sie haben folgenden Hamilton-Operator:

$$H = H_0 + \lambda W \quad (\lambda \ll 1)$$

Dabei ist H_0 der bekannte Hamilton-Operator mit bekannten Eigenfunktionen und Eigenwerten und λW der sogenannte Störterm des Hamilton-Operators, wobei $\lambda \ll 1$ darauf hinweist, dass λW ein kleiner Zusatzterm ist.

Probleme dieser Art löst man, indem man die Eigenzustände dieses Hamilton-Operators bestimmt. Mit anderen Worten, Sie wollen folgende Aufgabe lösen:

$$H|\psi_n\rangle = (H_0 + \lambda W)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (\lambda \ll 1)$$

Der Lösungsweg für diese Gleichung hängt davon ab, ob die bekannte, ursprüngliche Lösung von H_0 *entartet* (das bedeutet, dass verschiedene Zustände dieselbe Energie haben) oder nicht entartet ist. Der nächste Abschnitt beschäftigt sich mit dem nicht entarteten Fall.

Störungstheorie für nicht entartete Ausgangszustände

Dieser Abschnitt behandelt den Fall, dass der ungestörte Hamilton-Operator H_0 nicht entartete Lösungen hat. Das heißt, zu jedem Zustand $|\phi_n\rangle$ gibt es genau eine Energie E_n , die für alle Zustände unterschiedlich ist: $H_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$ (genau wie eine bijektive Funktion zu jedem y-Wert nur einen x-Wert hat). Man bezeichnet die nicht entarteten Energieniveaus des ungestörten Hamilton-Operators mit $E_n^{(0)}$, um ihn von den Korrekturen, die die Störung erforderlich macht, zu unterscheiden. Somit lautet die Gleichung:

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle$$

Die Energieniveaus des gestörten Systems werden im Folgenden mit E_n bezeichnet.

Die Idee der Störungstheorie ist, dass man auf der Grundlage des Parameters λ (der sehr viel kleiner als eins ist) eine sogenannte Reihenentwicklung machen kann, um die Wellenfunktionen und die Energieniveaus des gestörten Systems zu berechnen. Im folgenden Abschnitt geht es um eine Entwicklung bis zum Term mit λ^2 .

Eine kleine Entwicklung: Störung der Gleichungen

Um die Energie des gestörten Systems E_n zu berechnen, beginnt man mit der Energie des ungestörten Systems:

$$E_n = E_n^{(0)} + \dots$$

Anschließend addiert man den Korrekturterm erster Ordnung $\lambda E_n^{(1)}$ zur Energie:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Dann addiert man $\lambda^2 E_n^{(2)}$, den Korrekturterm zweiter Ordnung:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Auch bei $|\psi_n\rangle$, der Wellenfunktion des gestörten Systems, beginnt man mit der Wellenfunktion des ungestörten Systems $|\phi_n\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \dots$$

Man addiert den Korrekturterm erster Ordnung $\lambda |\psi_n^{(1)}\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Anschließend addiert man den Korrekturterm zweiter Ordnung zur Wellenfunktion $\lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Wenn $\lambda \rightarrow 0$ geht, wird aus $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$ die ungestörte Energie:

$$E_n = E_n^{(0)}$$

und aus $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (\lambda \ll 1)$ die ungestörte Wellenfunktion:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle$$

Jetzt ist es also Ihre Aufgabe, $E_n^{(1)}$ und $E_n^{(2)}$ sowie $\psi_n^{(1)}$ und $\psi_n^{(2)}$ zu bestimmen. Wie macht man das im Allgemeinen? Nun ist es wohl an der Zeit, ein wenig Mathematik ins Spiel zu bringen. Sie müssen mit drei gestörten Gleichungen beginnen:

✓ **Hamilton-Operator:**

$$H|\psi_n\rangle = (H_0 + \lambda W)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (\lambda \ll 1)$$

✓ **Energieniveaus:** $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$

✓ **Wellenfunktionen:**

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Verbindet man diese drei Gleichungen, so erhält man die folgende Monstergleichung:

$$\begin{aligned} & (H_0 + \lambda W)(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \quad (\lambda \ll 1) \end{aligned}$$

Anpassen der Koeffizienten von λ und Vereinfachung

Man kann die Monstergleichung im vorangegangenen Abschnitt behandeln, indem man die Koeffizienten von λ auf beiden Seiten der Gleichung gleichsetzt.

Setzt man die Terme nullter Ordnung in λ auf beiden Seiten gleich, erhält man folgende Beziehung:

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle$$

Nun betrachtet man die Terme erster Ordnung in λ ; setzt man sie auf beiden Seiten der Monstergleichung gleich, so erhält man folgenden Ausdruck:

$$H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + W |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle$$

Anschließend setzt man die Koeffizienten von λ^2 in der Monstergleichung gleich und erhält folgenden Ausdruck:

$$H_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + W |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle$$

Dies ist also die Gleichung, die sich aus den Termen zweiter Ordnung in λ ergibt. Nun müssen Sie $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$ usw. bestimmen, indem Sie die Gleichungen nullter, erster und zweiter Ordnung benutzen.

Beachten Sie zunächst, dass die ungestörte Wellenfunktion $|\phi_n\rangle$ sich nur wenig von der gestörten Wellenfunktion $|\psi_n\rangle$ unterscheidet, da die Störung nur gering ist. Das bedeutet, dass $\langle \phi_n | \psi_n \rangle \approx 1$ ist. Sie können also $|\psi_n\rangle$ so normalisieren, dass $\langle \phi_n | \psi_n \rangle$ genau gleich 1 ist:

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle = 1$$

Da die Gleichung $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$ gilt, folgt für die obige Gleichung:

$$\lambda \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + \dots = 0$$

Da die Koeffizienten von λ beide verschwinden müssen, erhält man folgende Gleichung:

$$\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 0$$

Diese Gleichung ist nützlich, um die Rechnungen zu vereinfachen.

Die Korrekturen erster Ordnung bestimmen

Nachdem man die Koeffizienten von λ angepasst und vereinfacht hat (siehe vorheriger Abschnitt), kann man die Korrekturen erster Ordnung für die Energieniveaus und die

Wellenfunktionen bestimmen. Man erhält $E_n^{(1)}$, die Korrektur erster Ordnung der Energie,

durch die Multiplikation von $H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + W |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle$ mit $\langle \phi_n|$:

$$\langle \phi_n | H_0 | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | E_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_n | E_n^{(1)} | \phi_n \rangle$$

Man kann $H |\psi_n\rangle = (H_0 + \lambda W) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$ ($\lambda \ll 1$) benutzen, um diese Gleichung zu folgendem Ausdruck zu vereinfachen:

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle$$

Dies ist also der Ausdruck für $E_n^{(1)}$, die Korrektur erster Ordnung.

Jetzt muss $|\psi_n^{(1)}\rangle$ bestimmt werden, die Korrektur erster Ordnung der Wellenfunktion. Man kann die Gleichung der Wellenfunktion mit dem folgenden Ausdruck multiplizieren, der gleich 1 ist:

$$\sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m|$$

Somit erhält man:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \left(\sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \right) |\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle |\phi_m\rangle \quad m \neq n$$

Man beachte, dass der Term für $m = n$ null ergibt, da $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0$.

Man kann nun $\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle$ durch die Multiplikation von $H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + W |\phi_n\rangle$

$$= E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle \quad \text{mit } \langle \phi_m | \text{ berechnen. Man erhält:}$$

$$\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle |\phi_m\rangle$$

Setzt man diesen Ausdruck in

ein, so erhält man:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle$$

Das ist also der Ausdruck für $|\psi_n^{(1)}\rangle$, die Korrektur erster Ordnung der Wellenfunktion. Wie Sie wissen, besteht die Wellenfunktion aus den Korrekturen nullter, erster und zweiter Ordnung und lautet:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Vernachlässigt man im Moment die Korrektur zweiter Ordnung und setzt

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle$$

für die Korrektur erster Ordnung in die Wellenfunktion des gestörten Systems ein, so erhält man den Ausdruck:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \lambda W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Das ist die Wellenfunktion des gestörten Systems. Sie enthält allerdings nur die Korrektur erster Ordnung. Was ist also mit der zweiter Ordnung? Lesen Sie einfach weiter.

Die Korrekturen zweiter Ordnung

Jetzt kann man die Korrekturen zweiter Ordnung für die Energieniveaus und die Wellenfunktionen bestimmen (der vorherige Abschnitt enthält die Korrekturen erster Ordnung).

Man kann $E_n^{(2)}$ berechnen, indem man beide Seiten der Gleichung

$$H_0 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + W \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left| \phi_n \right\rangle \quad \text{mit } \langle \phi_n |$$

multipliziert:

$$\left\langle \phi_n \left| H_0 \right| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \left\langle \phi_n \left| W \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \left\langle \phi_n \left| E_n^{(0)} \right| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \left\langle \phi_n \left| E_n^{(1)} \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \left\langle \phi_n \left| E_n^{(2)} \right| \phi_n \right\rangle$$

Das sieht wie eine sehr komplizierte Gleichung aus, doch nur solange, bis Sie bemerken, dass $\left\langle \phi_n \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle$ null ergibt. Somit erhält man Folgendes:

$$\left\langle \phi_n \left| H_0 \right| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \left\langle \phi_n \left| W \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \left\langle \phi_n \left| E_n^{(0)} \right| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \left\langle \phi_n \left| E_n^{(2)} \right| \phi_n \right\rangle$$

Und da $\left\langle \phi_n \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle$ ebenfalls null ergibt, erhält man folgenden Ausdruck:

$$\left\langle \phi_n \left| W \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \left\langle \phi_n \left| E_n^{(2)} \right| \phi_n \right\rangle$$

Da $E_n^{(2)}$ nur eine Zahl ist, folgt:

$$\left\langle \phi_n \left| W \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(2)} \left\langle \phi_n \left| \phi_n \right\rangle$$

Und weil natürlich $\langle \phi_n, \phi_n \rangle = 1$ ist, erhält man die Gleichung:

$$E_n^{(2)} = \left\langle \phi_n \left| W \right| \psi_n^{(1)} \right\rangle$$

Beachten sie, dass die Korrektur zweiter Ordnung null wird, wenn $\left| \psi_n^{(1)} \right\rangle$ ein

Eigenzustand von W ist.

Somit gilt also $E_n^{(2)} = \langle \phi_n | W | \psi_n^{(1)} \rangle$. Dies kann man vereinfachen, indem man

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle \langle \phi_m | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

benutzt. Setzt man diese Gleichung in

$$E_n^{(2)} = \langle \phi_n | W | \psi_n^{(1)} \rangle$$

ein, so erhält man den Ausdruck:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} = \langle \phi_n | W | \psi_n^{(1)} \rangle &= \left\langle \phi_n | W | \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \phi_m \right\rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned}$$

Somit erhält man die beiden Gleichungen $E_n^{(1)} = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle$ und

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Für die Gesamtenergie mit den Korrekturen erster und zweiter Ordnung gilt:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Somit ergibt sich folgender Ausdruck für die Gesamtenergie:

$$E_n = E_0 + \lambda \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Sie kennen nun die Korrekturen erster und zweiter Ordnung der Energie, die die Störungstheorie liefert.

Beachten Sie, dass der Ausdruck in der Summe klein sein muss, damit diese Formel gilt. Und überlegen Sie sich, was mit dem Erweiterungsterm passiert, wenn die Energieniveaus entartet sind:

$$\sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

In diesem Fall erhält man am Ende ein $E_n^{(0)}$, das gleich $E_m^{(0)}$ ist, was bedeutet, dass die Gleichung für die Energiekorrektur komplizierter wird und diese Näherung nicht mehr gilt. Das wiederum bedeutet, dass Sie eine andere Näherung der Störungstheorie benötigen, um mit Systemen mit entarteten Energiezuständen umgehen zu können (das folgt in dem Abschnitt »Störungen und entartete Hamilton-Operatoren«).

Im nächsten Abschnitt folgt ein Beispiel, um den Umgang mit gestörten nicht entarteten Hamilton-Operatoren zu veranschaulichen.

Die Störungstheorie im Test: Harmonische Oszillatoren in elektrischen Feldern

Betrachten Sie den Fall, dass sich ein kleines Teilchen in einem harmonischen Potential hin und her bewegt, wie in Abbildung 12.1 dargestellt.

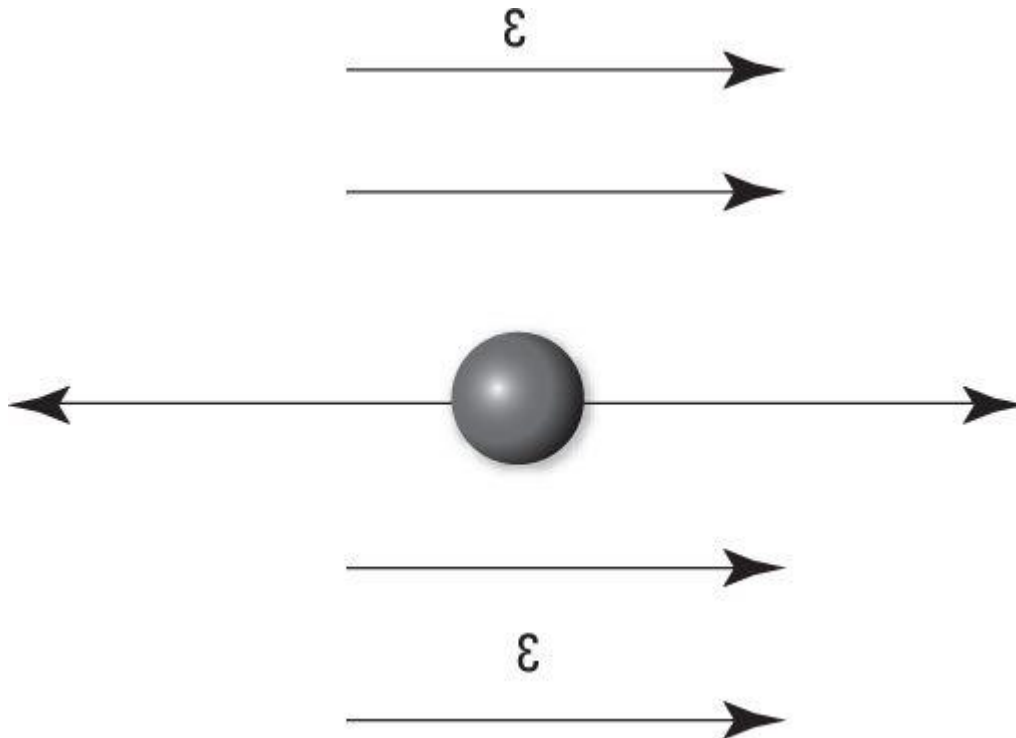


Abbildung 12.1: Ein harmonischer Oszillator

Wenn die Masse des Teilchens m ist, sein Ort x und die Kreisfrequenz der Bewegung ω , lautet der Hamilton-Operator für dieses Teilchen:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Nun stellen Sie sich vor, dass das Teilchen mit der Ladung q geladen ist und Sie ein schwaches elektrisches Feld ϵ anlegen, wie in Abbildung 12.2 gezeigt.



12.2: Ein harmonischer Oszillator in einem elektrischen Feld

Abbildung

Die vom elektrischen Feld verursachte Kraft ist in diesem Fall die Störung, und somit lautet der Hamilton-Operator:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + q \epsilon x$$

In den folgenden Abschnitten werden die Energie und die Wellenfunktionen des gestörten Systems berechnet und mit den exakten Lösungen verglichen.

Exakte Lösungen berechnen

Wie lauten also die Energieeigenwerte des obigen Hamilton-Operators für den harmonischen Oszillator in einem elektrischen Feld? Berechnen Sie zunächst die exakten Eigenwerte, und wenden Sie anschließend die Störungstheorie an. Sie können die genauen Energieeigenwerte berechnen, indem Sie eine der beiden folgenden Substitutionen vornehmen:

$$\checkmark \quad y = x + \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}$$

$$\checkmark \quad x = y - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}$$

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + q\varepsilon x$$

Setzt man die Gleichung für x in

ein, so

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}.$$

erhält man

Der letzte Ausdruck ist eine Konstante, die Gleichung hat somit folgende Form:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 + C$$

$$C = \frac{-q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \quad H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2 + C$$

Dabei ist C ist nur der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators mit einer zusätzlichen Konstante, was bedeutet, dass die Energieniveaus einfach zu bestimmen sind:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + C$$

Ersetzt man C wieder, erhält man die exakten Energieniveaus:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

Großartig, das ist die exakte Lösung.

Störungstheorie anwenden

Wenn Sie die exakten Eigenwerte des geladenen Oszillators kennen (siehe vorangehender Abschnitt), können Sie diese mit den anhand der Störungstheorie gewonnen Lösungen vergleichen. Zunächst werden wir die Energie und die Wellenfunktionen des gestörten Systems bestimmen.

Energie des geladenen Oszillators

Was ist mit der Energie des geladenen Oszillators, wenn sie mithilfe der Störungstheorie bestimmt wird? Sie wissen, dass die korrigierte Energie durch folgende Gleichung gegeben ist:

$$E_n = E_0 + \lambda \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

wobei λW der Störterm im Hamilton-Operator ist. In diesem Fall ist $\lambda W = q\epsilon x$. Nun betrachten Sie die Gleichung für die korrigierte Energie und ersetzen λW durch $q\epsilon x$. Die

Korrektur erster Ordnung ist $\lambda \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle$. Wenn man $\lambda W = q\epsilon x$ einsetzt, erhält man folgenden Ausdruck:

$$\langle \phi_n | q\epsilon x | \phi_n \rangle = q\epsilon \langle \phi_n | x | \phi_n \rangle$$

$\langle \phi_n | x | \phi_n \rangle$ ist aber gleich null, da es der Erwartungswert von x ist. Da ein harmonischer Oszillator sich genauso lange im negativen wie im positiven x -Bereich bewegt, ist der zu erwartende Wert von x null. Damit ist die Korrektur erster Ordnung der Energie, wie sie aus der Störungstheorie folgt, gleich null.

Wie lautet dann die Korrektur zweiter Ordnung der Energie, wie sie aus der Störungstheorie folgt? Die Antwort ist:

$$\lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Da $\lambda W = q\epsilon x$ ist, folgt:

$$q^2 \epsilon^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | x | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots$$

Drückt man dies durch Bra- und Ket-Vektoren aus (siehe Kapitel 4), so wird $\langle \phi_m |$ durch

$\langle m |$ und $|\phi_n\rangle$ durch $|n\rangle$ ersetzt. Damit ergibt sich für die Korrektur zweiter Ordnung der Energie der folgende Ausdruck:

$$q^2 \varepsilon^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | x | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots$$

Sie können diesen Ausdruck Schritt für Schritt entschlüsseln. Zunächst gilt für die Energie:

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Das macht die Sache ein wenig einfacher.

Für den harmonischen Oszillator gelten darüber hinaus folgende Gleichungen:

$$\checkmark \quad \langle n+1 | x | n \rangle = (n+1)^{1/2} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}}$$

$$\checkmark \quad \langle n-1 | x | n \rangle = n^{1/2} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}}$$

$$\checkmark \quad E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)} = \hbar \omega$$

$$\checkmark \quad E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)} = -\hbar \omega$$

Mit diesen vier Gleichungen sind Sie gut gerüstet und können nun den Ausdruck

$$q^2 \varepsilon^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | x | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots$$

, die Korrektur zweiter Ordnung der Energie, in Angriff nehmen. Vernachlässigt man Terme höherer Ordnung, folgt für die Summe:

$$q^2 \varepsilon^2 \frac{|\langle n+1 | x | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \dots \quad q^2 \varepsilon^2 \frac{|\langle n-1 | x | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} \dots$$

Anschließend ersetzt man $E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}$ und $E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}$ in dieser Summe:

$$q^2 \varepsilon^2 \frac{|\langle n+1 | x | n \rangle|^2}{-\hbar\omega} + \dots \quad q^2 \varepsilon^2 \frac{|\langle n-1 | x | n \rangle|^2}{\hbar\omega} \dots$$

Danach ersetzt man $\langle n+1 | x | n \rangle$ und $\langle n-1 | x | n \rangle$ und erhält folgenden Ausdruck:

$$q^2 \varepsilon^2 \frac{(n+1)\hbar}{(-\hbar\omega)(2m\omega)} + \dots \quad q^2 \varepsilon^2 \frac{n\hbar}{(\hbar\omega)(2m\omega)} \dots$$

Das bedeutet folgendes:

$$-q^2 \varepsilon^2 \frac{(n+1)}{2m\omega^2} + \dots \quad q^2 \varepsilon^2 \frac{n}{2m\omega^2} \dots$$

Somit lautet die Korrektur zweiter Ordnung:

$$\frac{-q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

Deshalb sollte der Störungstheorie zufolge die Energie des harmonischen Oszillators in einem elektrischen Feld folgendermaßen lauten:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

Vergleichen Sie dieses Ergebnis mit der weiter oben erhaltenen Gleichung für die exakten

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

Energieniveaus – das Ergebnis ist dasselbe! Mit anderen Worten, die Störungstheorie hat dasselbe Ergebnis geliefert wie die exakte Lösung. Das ist eine tolle Übereinstimmung!

Natürlich können Sie nicht erwarten, dass die Lösungen immer übereinstimmen, wenn Sie die Störungstheorie benutzen, aber dieses Ergebnis ist schon eindrucksvoll.

Wellenfunktionen des geladenen Oszillators

Nun berechnen Sie die Wellenfunktionen des geladenen Oszillators in Anwesenheit des elektrischen Feldes. Die Gleichung für die Korrektur erster Ordnung der Wellenfunktion lautet:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \lambda W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Verwendet man wieder die Bra- und Ket-Vektoren $\langle m|$ und $|n\rangle$, so lautet die Gleichung:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \lambda W | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Da $\langle W = qex$ ist, folgt:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + q\varepsilon \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | x | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle \dots \quad (\lambda \ll 1)$$

Genauso wie bei der Energie tragen nur zwei Ausdrücke zur Summe bei, da $\langle n|x|n\rangle = 0$ ist. Diese beiden Ausdrücke sind:

$$\checkmark \quad \langle n+1 | x | n \rangle = (n+1)^{1/2} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}}$$

$$\checkmark \quad \langle n-1 | x | n \rangle = n^{1/2} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}}$$

Beachten Sie, dass außerdem $E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)} = \hbar\omega$ und $E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)} = -\hbar\omega$ gilt.

Aus diesen vier Gleichungen folgt für $|\psi_n\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q\varepsilon}{\hbar\omega} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}} \left(n^{1/2} |n-1\rangle - (n+1)^{1/2} |n+1\rangle \right)$$

Bedenken Sie, was diese Gleichung bedeutet: Legt man ein elektrisches Feld an einen quantenmechanischen harmonischen Oszillator an, so verbreitert sich die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators.

Genauer: Ursprünglich ist die Wellenfunktion des Oszillators nur die Standardwellenfunktion des harmonischen Oszillators $|\psi_n\rangle = |n\rangle$. Legt man ein elektrisches Feld an, verbreitert sich die Wellenfunktion; eine Komponente von $|n-1\rangle$ kommt hinzu, die proportional zum elektrischen Feld ε und der Ladung q des Oszillators ist:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q\varepsilon}{\hbar\omega} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}} \left(n^{1/2} |n-1\rangle - \dots \right)$$

Außerdem verbreitert sich die Wellenfunktion auch zum anderen benachbarten Zustand $|n+1\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q\varepsilon}{\hbar\omega} \frac{\hbar^{1/2}}{(2m\omega)^{1/2}} \left(n^{1/2} |n-1\rangle - (n+1)^{1/2} |n+1\rangle \right)$$



Man vermischt also Zustände. Diese Vermischung von Zuständen erfordert, dass die angelegte Störung klein sein muss im Vergleich zum Abstand der ungestörten Zustände. Andernfalls läuft man Gefahr, das gesamte System so weit zu verwischen, dass man keine Vorhersagen mehr treffen kann, was wirklich passiert.

Auf jeden Fall ist es ein schönes Ergebnis: Vermischen von Zuständen im Verhältnis zur Stärke des angelegten elektrischen Feldes. Und es ist typisch für ein Ergebnis, das man mithilfe der Störungstheorie erhält.

Das war also die nicht entartete Störungstheorie. Wie Sie sehen, hängt sie streng davon ab, dass die Energiezustände getrennt sind, sodass die Lösung sie mischen kann. Aber was passiert, wenn man ein System hat, bei dem die Energien entartet sind? Das wird im nächsten Abschnitt behandelt.

Störungstheorie für entartete Hamilton-Operatoren

Dieser Abschnitt behandelt Systeme, in denen die Energien entartet sind. Betrachten Sie zunächst diesen ungestörten Hamilton-Operator:

$$H_0 |\phi_{n_\alpha}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{n_\alpha}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots)$$

Mit anderen Worten, verschiedene Zustände haben dieselbe Energie. Angenommen, die Energiezustände sind f-fach entartet:

$$H_0 |\phi_{n_\alpha}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{n_\alpha}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots, f)$$

Was bedeutet das im Bild der Störungstheorie? Der vollständige Hamilton-Operator H besteht aus dem ursprünglichen, ungestörten Hamilton-Operator H_0 und dem Störterm H_s :

$$H |\psi_n\rangle = (H_0 + H_s) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

In der Näherung nullter Ordnung kann man die Eigenfunktion $|\psi_n\rangle$ als eine Kombination der entarteten Zustände $|\phi_{n_\alpha}\rangle$ ausdrücken:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^f a_\alpha |\phi_{n_\alpha}\rangle \dots$$

Beachten Sie, dass im Folgenden angenommen wird, dass $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ und $\langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0$ gilt, wenn m ungleich n ist. Außerdem wird angenommen, dass $|\psi_n\rangle$ normalisiert ist; das bedeutet $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$.

Setzt man die Gleichung für die Näherung nullter Ordnung in den vollständigen Hamilton-Operator ein, so erhält man folgenden Ausdruck:

$$\sum_{\alpha=1}^f \left[E_n^{(0)} |\phi_{n_\alpha}\rangle + H_s |\phi_{n_\alpha}\rangle \right] a_\alpha = E_n \sum_{\alpha=1}^f a_\alpha |\phi_{n_\alpha}\rangle$$

Multipliziert man diese Gleichung mit $\langle \phi_{n_\beta} |$, so erhält man:

$$\sum_{\alpha=1}^f \left[\langle \phi_{n\beta} | E_n^{(0)} | \phi_{n\alpha} \rangle + \langle \phi_{n\beta} | H_s | \phi_{n\alpha} \rangle \right] a_\alpha = E_n \sum_{\alpha=1}^f a_\alpha \langle \phi_{n\beta} | \phi_{n\alpha} \rangle$$

Benutzt man $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ und $\langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0$, wenn m ungleich n ist, so erhält man folgende Gleichung:

$$a_\beta E_n = a_\beta E_n^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^f a_\alpha \langle \phi_{n\beta} | H_s | \phi_{n\alpha} \rangle$$

Viele Physiker schreiben diese Gleichung auch in der folgenden Form:

$$\sum_{\alpha=1}^f a_\alpha H_{s\alpha\beta} - (a_\beta E_n - a_\beta E_n^{(0)}) = 0 \quad (\beta = 1, 2, 3, \dots, f)$$

Dabei ist $H_{s\alpha\beta} = \langle \phi_{n\beta} | H_s | \phi_{n\alpha} \rangle$. Man kann die Gleichung auch so schreiben:

$$\sum_{\alpha=1}^f a_\alpha H_{s\alpha\beta} - a_\beta E_n^{(1)} = 0 \quad (\beta = 1, 2, 3, \dots, f)$$

Dabei ist $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{(0)}$. Das ist ein System von linearen Gleichungen; eine Lösung existiert nur, wenn die Determinante der folgenden Matrix nicht verschwindet:

$$\begin{pmatrix} H_{s11} - E_n^{(1)} & H_{s12} & H_{s13} & \dots & H_{s1f} \\ H_{s21} & H_{s22} - E_n^{(1)} & H_{s23} & \dots & H_{s2f} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{sf1} & H_{sf2} & H_{sf3} & \dots & H_{sff} - E_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

Die Determinante dieser Matrix ist eine Gleichung f -ten Grades in $E_n^{(1)}$, und sie hat f verschiedene Wurzeln $E_{n\alpha}^{(1)}$. Diese f Wurzeln sind die Korrekturen erster Ordnung zum

Hamilton-Operator. In der Regel unterscheiden sich diese Wurzeln aufgrund der wirkenden Störung. Mit anderen Worten, die Störung hebt typischerweise die Entartung auf.

Die Bestimmung der Eigenwerte zur ersten Ordnung geht folgendermaßen: Sie erstellen

eine $f \times f$ -Matrix des Störterms des Hamilton-Operators H_s , wobei ist:

$$H_{s\alpha\beta} = \langle \phi_{n_\beta} | H_s | \phi_{n_\alpha} \rangle$$

$$\begin{pmatrix} H_{s11} & H_{s12} & H_{s13} & \dots & H_{s1f} \\ H_{s21} & H_{s22} & H_{s23} & \dots & H_{s2f} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{sf1} & H_{sf2} & H_{sf3} & \dots & H_{sff} \end{pmatrix}$$

Dann diagonalisieren Sie die Matrix und bestimmen die f Eigenwerte $E_{n_\alpha}^{(1)}$ und die entsprechenden Eigenvektoren:

$$\begin{pmatrix} a_{\alpha 1} \\ a_{\alpha 2} \\ a_{\alpha 3} \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{\alpha f} \end{pmatrix} = a_\beta \quad \beta = 1, 2, 3, \dots, f$$

Dann erhalten Sie die Energieeigenwerte zur ersten Ordnung wie folgt:

$$E_{n_\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n_\alpha}^{(1)}$$

Und die Eigenvektoren lauten:

$$|\psi_{n_\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1}^f a_{\alpha\beta} |\phi_{n_\beta}\rangle$$

Im nächsten Abschnitt folgt ein Beispiel, das diesen Gedanken verdeutlichen wird.

Test der entarteten Störungstheorie: Wasserstoff in elektrischen Feldern

In diesem Abschnitt werden Sie erfahren, ob die Störungstheorie mit dem Wasserstoffatom umgehen kann, dessen Energiezustände in verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen entartet sind, wenn Sie die Entartung durch Anlegen eines elektrischen Feldes aufheben.

Stellen Sie sich vor, Sie legen ein elektrisches Feld ϵ an ein Wasserstoffatom an, das sich im zweiten angeregten Zustand befindet ($n = 2$). Dieser Zustand hat vier Eigenfunktionen, die dieselbe Energie besitzen, und deren Quantenzahlen $|nlm\rangle$ lauten (diese Eigenfunktionen werden in $|1\rangle$, $|2\rangle$ usw. umbenannt, damit die Rechnung einfacher wird):

$$\checkmark |1\rangle = |200\rangle$$

$$\checkmark |2\rangle = |211\rangle$$

$$\checkmark |3\rangle = |210\rangle$$

$$\checkmark |4\rangle = |21-1\rangle$$

Diese ungestörten Zustände besitzen alle dieselbe Energie $E = -R/4$, wobei R die Rydberg-Konstante ist (13,6 eV). Doch wenn Sie ein elektrisches Feld anlegen werden einige dieser Zustände ihre Energie verändern.

Wie sieht der durch das elektrische Feld ϵ verursachte Störterm des Hamilton-Operators aus? Er lautet:

$$H_s = e\epsilon z$$

Sie müssen also diese Gleichung für die verschiedenen Zustände auswerten. Was ergibt zum Beispiel der folgende Ausdruck, wenn $\langle 1| = \langle 200|$ und $|3\rangle = |210\rangle$ ist?

$$\langle 1|H_s|3\rangle$$

Sie haben die Wellenfunktionen für das ungestörte Wasserstoffatom bereits in Kapitel 9 berechnet. Allgemein lautet die Lösung für die Wellenfunktion $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ für Wasserstoff:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{\left(\frac{2}{nr_0}\right)^{3/2} [(n-l-1)!]^{1/2}}{[2n(n+1)!]^{1/2}} e^{-\frac{r}{nr_0}} \left(\frac{2r}{nr_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

$$L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right)$$

Dabei sind die zugeordneten Laguerre-Polynome. Führt man die Mathematik aus, so erhält man das folgende Ergebnis, wobei a_0 der Bohr'sche Radius des Atoms ist:

$$\langle 1 | H_s | 3 \rangle = e\epsilon \langle 1 | z | 3 \rangle = -3e\epsilon a_0$$

$\langle 1 | H_s | 3 \rangle$ ist natürlich nur einer der Terme, die Sie berechnen müssen. Die vollständige Matrix für den Störterm des Hamiltonoperators, die alle Zustände berücksichtigt, lautet:

$$\begin{pmatrix} H_{s11} & H_{s12} & H_{s13} & H_{s14} \\ H_{s21} & H_{s22} & H_{s23} & H_{s24} \\ H_{s31} & H_{s32} & H_{s33} & H_{s34} \\ H_{s41} & H_{s42} & H_{s43} & H_{s44} \end{pmatrix}$$

wobei $H_{s\alpha\beta} = \langle \alpha | H_s | \beta \rangle$ gilt.

Wenn man die Mathematik ausführt, erhält man folgendes bemerkenswert einfache Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} H_{s11} & H_{s12} & H_{s13} & H_{s14} \\ H_{s21} & H_{s22} & H_{s23} & H_{s24} \\ H_{s31} & H_{s32} & H_{s33} & H_{s34} \\ H_{s41} & H_{s42} & H_{s43} & H_{s44} \end{pmatrix} = -3e\epsilon a_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Diagonalisiert man diese Matrix, so erhält man folgende Eigenwerte – die Korrektur erster Ordnung zu den ungestörten Energien:

$$✓ E_1^{(1)} = -3e\epsilon a_0$$

$$✓ E_2^{(1)} = 0$$

$$✓ E_3^{(1)} = 3e\epsilon a_0$$

$$✓ E_4^{(1)} = 0$$

Dabei ist $E_1^{(1)}$ die Korrektur erster Ordnung der Energie zur Eigenfunktion $|1\rangle$, $E_2^{(1)}$ die Korrektur erster Ordnung der Energie zur Eigenfunktion $|2\rangle$ usw. Addiert man diese Korrekturen zu den ungestörten Energien für den Zustand $n = 2$, erhält man die endgültigen Energieniveaus:

$$✓ E_1 = \frac{-R}{4} - 3e\epsilon a_0$$

$$✓ E_2 = \frac{-R}{4}$$

$$✓ E_3 = \frac{-R}{4} + 3e\epsilon a_0$$

$$✓ E_4 = \frac{-R}{4}$$

Dabei ist R die Rydberg-Konstante. Beachten Sie das Ergebnis: Das Anlegen eines elektrischen Feldes (Stark-Effekt) hebt die Energie-Entartung in $|200\rangle$ und $|210\rangle$ (den Eigenfunktionen $|1\rangle$ und $|3\rangle$) auf, aber die Entartung in $|211\rangle$ und $|21-1\rangle$ (den Eigenfunktionen $|2\rangle$ und $|4\rangle$) bleibt erhalten.

Das Wichtigste von Kapitel 12 noch einmal in Kürze

Mithilfe der Störungstheorie kann man die Auswirkung einer zeitunabhängigen Störung auf ein lösbares quantenmechanisches System untersuchen. In der Regel wird die Störungstheorie dazu verwendet, Probleme zu lösen, bei denen mehr als zwei Körper beteiligt sind. Sie wird in der Regel aber nicht dazu verwendet, um Viel-Teilchen-Systeme mit einer großen Teilchenzahl zu untersuchen; dafür stehen andere Näherungsverfahren zur Verfügung.

Man wendet die Störungstheorie bei Systemen an, bei denen der Hamilton-Operator aus dem bekannten Hamilton-Operator H_0 und genau einer Störung λW besteht. Dabei muss $\lambda \ll 1$ sein, so dass die Störung das Spektrum von H_0 nur geringfügig verändert. Somit ergibt sich für den Hamilton-Operator:

$$H = H_0 + \lambda W \quad \lambda \ll 1$$

Daher besteht das Ziel darin, die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ und die Eigenwerte E_n von H zu bestimmen:

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

Der Ansatz der Störungstheorie besteht in der Annahme, dass man die Eigenzustände und Eigenfunktionen in eine Potenzreihe des Parameters λ entwickeln kann:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$
$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

Dabei ist $\lambda \ll 1$ und der erste Term ist jeweils der ungestörte.

Die weitere Untersuchung hängt davon ab, ob die Ausgangszustände entartet sind oder nicht; man unterscheidet die nicht entartete Störungstheorie und die Störungstheorie für entartete Zustände.

In der Störungstheorie für nicht entartete Ausgangszustände lautet die Energiekorrektur erster Ordnung:

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle$$

Die Energiekorrektur zweiter Ordnung lautet:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Sind die Ausgangszustände dagegen entartet, muss man zunächst eine unitäre Transformation durchführen, um gewisse mathematische Schwierigkeiten zu umgehen. Als Beispiel für die Anwendung der Störungstheorie auf entartete Zustände wurde am Ende dieses Kapitels der Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes auf die Energieniveaus des Wasserstoffatoms untersucht. Dabei wird angenommen, dass sich das Wasserstoffatom im zweiten angeregten Zustand ($n = 2$) befindet; das heißt, die Zustände $|2,0,0\rangle$, $|2,1,1\rangle$, $|2,1,0\rangle$ und $|2,1,-1\rangle$ haben alle dieselbe Energie. Das Ergebnis zeigt, dass das Anlegen eines elektrischen Feldes die Energie-Entartung in $|2,0,0\rangle$ und $|2,1,0\rangle$ aufhebt, die Entartung aber in $|2,1,1\rangle$ und $|2,1,-1\rangle$ aber erhalten bleibt.

Peng-Peng: Streutheorie

In diesem Kapitel ...

- ▶ Wechsel zwischen Schwerpunktsystem und Laborsystem
- ▶ Lösung der Schrödinger-Gleichung
- ▶ Berechnung der Wellenfunktion
- ▶ Anwendung der Born'schen Näherung

Ein weiteres wichtiges Gebiet der modernen Physik ist die Elementarteilchen- und Hochenergiephysik. In diesen Bereichen verwenden die Physiker Teilchenbeschleuniger, um neue Erkenntnisse über den Aufbau der Materie zu erhalten, von Elementarteilchen bis zu Festkörpern. Sie kennen sicher das CERN in der Nähe von Genf, eine europäische Großforschungseinrichtung, an der physikalische Grundlagenforschung betrieben wird. Dort werden Teilchen mithilfe von riesigen Teilchenbeschleunigern auf nahezu Lichtgeschwindigkeit beschleunigt und zur Kollision gebracht. Anschließend werden die Flugbahnen der entstandenen Teilchen mit Detektoren rekonstruiert, um daraus Rückschlüsse über ihre Eigenschaften zu ziehen.

Dabei spielt die Streuung von Teilchen an anderen Teilchen eine bedeutende Rolle. Daher werden in diesem Kapitel die Grundbegriffe der Streutheorie behandelt. Man beschreibt die Ergebnisse von Streuexperimenten durch die sogenannten Wirkungsquerschnitte, die im direkten Zusammenhang mit den Lösungen der Schrödinger-Gleichung stehen. Sowohl der differentielle als auch der totale Wirkungsquerschnitt werden im ersten Abschnitt dieses Kapitels erläutert.

Im darauffolgenden Abschnitt wird ein typisches Streuexperiment beschrieben und erläutert, wie man zwischen Labor- und Schwerpunktsystem wechselt. Das Kapitel endet schließlich mit der Erläuterung der Bornschen Näherung, einer Methode zur Berechnung der Streuamplitude.

Teilchenstreuung und Wirkungsquerschnitt

Bei Streuexperimenten unterscheidet man *einfallende* Teilchen und *gestreute* Teilchen. Betrachten Sie das Beispiel in Abbildung 13.1. In der Darstellung fliegen die Teilchen in einem Strom von links her ein und treffen dann auf ein Ziel (Target). Die meisten Teilchen setzen ihren Weg unbeeinflusst fort, doch einige interagieren auch mit dem Target und werden gestreut.

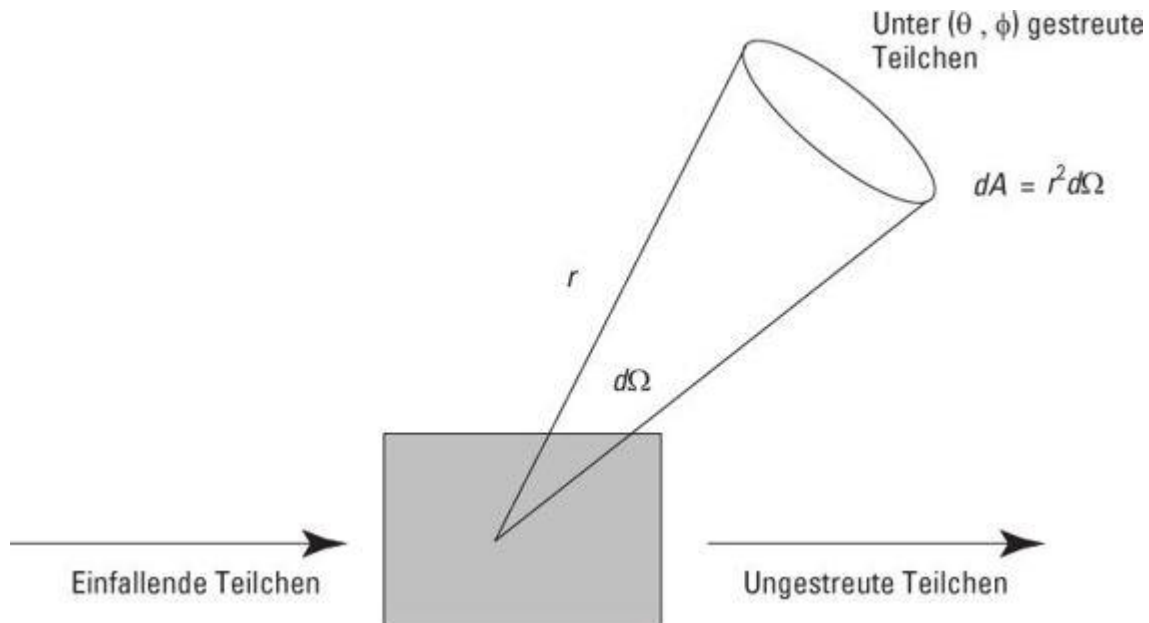


Abbildung 13.1: Streuung an einem Target

Die Teilchen, die gestreut werden, werden unter einem bestimmten Winkel in drei Dimensionen gestreut. Der Streuwinkel wird als Winklelement $d\Omega$ angegeben, das gerade gleich $\sin \theta \, d\theta \, d\phi$ ist, wobei ϕ und θ die Kugelkoordinaten sind, die in Kapitel 8 eingeführt wurden.

Die Zahl der Teilchen, die in einer bestimmten Zeit in ein bestimmtes Winklelement $d\Omega$ gestreut werden, ist proportional zu einer wichtigen Größe der Streutheorie: dem differentiellen Wirkungsquerschnitt.



Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* (oder Streuquerschnitt) ist gegeben

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega}$$

durch ; er ist ein Maß für die Zahl der Teilchen, die pro Sekunde pro einfallendem Fluss in das Winklelement $d\Omega$ gestreut werden. Der *einfallende Fluss* J (auch *Stromdichte* genannt) ist die Zahl der einfallenden Teilchen pro Einheitsfläche pro Zeiteinheit. Damit gilt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{1}{J} \frac{dN(\phi, \theta)}{d\Omega}$$

Dabei ist $N(\phi, \theta)$ die Anzahl der Teilchen unter den Winkeln ϕ und θ .

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega}$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt hat die Dimension einer Fläche, der Name Wirkungsquerschnitt ist also passend. Während also der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Streuung eines Teilchens in ein bestimmtes Winkelement ist z.B. das Zentrum der Zielscheibe, entspricht der totale Wirkungsquerschnitt der gesamten Scheibe.



Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* ist der Wirkungsquerschnitt für die Streuung in ein bestimmtes Winkelement. Der *totale Wirkungsquerschnitt* σ ist ein Maß dafür, dass irgendetwas in einen beliebigen Winkel gestreut wird. Wenn also der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Streuung in ein bestimmtes Winkelement wie die »schwarze Zehn« ist, so entspricht der totale Wirkungsquerschnitt dem gesamten Target.

Man kann den totalen Wirkungsquerschnitt zum differentiellen Wirkungsquerschnitt mithilfe der folgenden Integration in Beziehung setzen:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\phi, \theta) d\Omega}{d\Omega} = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\phi, \theta) d\phi}{d\Omega}$$

Wechsel zwischen Schwerpunktsystem und Laborsystem

Jetzt können Sie beginnen, sich mit den Details der Streutheorie zu beschäftigen, indem Sie das Schwerpunktsystem dem Laborsystem gegenüberstellen. Experimente finden im Laborsystem statt. Doch die Rechnungen der Streutheorie erfolgen im Schwerpunktsystem, weshalb Sie wissen müssen, wie man zwischen beiden Systemen wechselt. Der folgende Abschnitt zeigt, wie sich die beiden Systeme unterscheiden und wie man Streuwinkel und Wirkungsquerschnitte umrechnen muss, wenn man das System wechselt.

Die Streuung beschreiben

Abbildung 13.2 beschreibt die Streuung im Laborsystem. Ein Teilchen, das sich mit der Geschwindigkeit $v_{1\text{lab}}$ bewegt, stößt auf ein anderes Teilchen, das sich in Ruhe befindet ($v_{2\text{lab}} = 0$). Durch den Zusammenstoß wird Teilchen 1 unter einem Winkel θ_1 gestreut und bewegt sich nun mit der Geschwindigkeit $v'_{1\text{lab}}$. Das andere Teilchen wird unter dem Winkel θ_2 gestreut und bewegt sich nach dem Stoß mit der Geschwindigkeit $v'_{2\text{lab}}$.

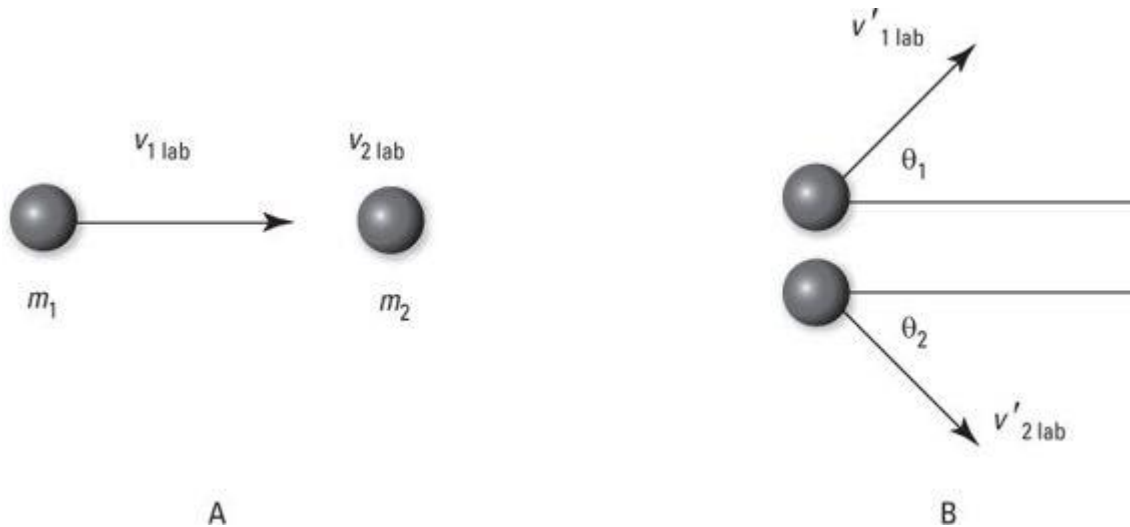


Abbildung 13.2: Streuung im Laborsystem

Im Schwerpunktsystem ist dagegen der Schwerpunkt der beiden Teilchen, die sich aufeinander zu bewegen, in Ruhe. Nach dem Zusammenstoß bewegen sie sich unter den Winkeln θ und $\pi - \theta$ wieder voneinander fort.

Sie müssen zwischen diesen beiden Systemen – Schwerpunkt- und Laborsystem – hin und her wechseln, das heißt, Sie müssen die Ausdrücke für Geschwindigkeit und Winkel in beiden Systemen in Verbindung bringen (in nicht relativistischer Weise).

Die Streuwinkel umrechnen

Zunächst sollen die Winkel θ und θ_1 betrachtet werden. Man kann mithilfe von v_{sp} , der Geschwindigkeit des Massenschwerpunkts, v_{lab} und v_{1s} , die Geschwindigkeit von Teilchen 1 im Schwerpunktsystem, folgendermaßen zueinander in Beziehung setzen:

$$\mathbf{v}_{lab} = \mathbf{v}_{1s} + \mathbf{v}_{sp}$$

Nach dem Zusammenstoß von Teilchen 1 mit Teilchen 2 gilt außerdem:

$$\mathbf{v}'_{lab} = \mathbf{v}'_{1s} + \mathbf{v}_{sp}$$

Jetzt kann man die Komponenten dieser Geschwindigkeiten bestimmen:

$$\checkmark \quad v'_{lab} \cos \theta_1 = v'_{1s} \cos \theta + v_{sp}$$

$$\checkmark \quad v'_{lab} \sin \theta_1 = v'_{1s} \sin \theta$$

Teilt man die zweite Gleichung durch die erste, so ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{v_{sp}}{v'_{1s}}}$$

Aber wäre es nicht besser, die Formel würde nicht die Geschwindigkeiten, sondern die Massen enthalten, wie etwa die folgende?

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}$$

Ja, das geht. Man kann Folgendes zeigen:

$$\mathbf{v}_{sp} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{v}_{lab}$$

Und außerdem:

$$\mathbf{v}_{1s} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{v}_{lab}$$

Man kann die Erhaltung des Drehimpulses benutzen, um herauszufinden, was nach dem

Stoß passiert. Da sich der Schwerpunkt im Schwerpunktsystem in Ruhe befindet, ist der Gesamtdrehimpuls in diesem System vor und nach dem Stoß gleich null. Es gilt somit:

$$m_1 v_{1s} = m_2 v_{2s}$$

Deshalb folgt:

$$v_{2s} = \frac{m_1}{m_2} v_{1s}$$

Nach dem Stoß gilt $m_1 v'_{1s} \cos \theta - m_2 v'_{2s} \cos \theta = 0$, damit folgt:

$$v'_{2s} = \frac{m_1}{m_2} v'_{1s}$$

Wenn der Stoß elastisch ist (Sie können davon ausgehen, dass alle Stöße in diesem Kapitel elastisch sind), bleibt neben dem Drehimpuls auch die kinetische Energie erhalten. Somit gilt die folgende Gleichung:

$$\frac{1}{2} m_1 v_{1s}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{2s}^2 = \frac{1}{2} m_1 v'_{1s}^2 + \frac{1}{2} m_2 v'_{2s}^2$$

$$v_{2s} = \frac{m_1}{m_2} v_{1s} \quad \text{und} \quad v'_{2s} = \frac{m_1}{m_2} v'_{1s}$$

Setzt man in diese Gleichung ein, so gilt:

$$v'_{1s} = v_{1s}$$

$$v'_{2s} = v_{2s}$$

$$v_{1s} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_{1lab}$$

Mithilfe dieser beiden Gleichungen kann man nochmals umschreiben:

$$v'_{1s} = v_{1s} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_{1lab}$$

$$v_{sp} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_{1lab}$$

Teilt man durch diese Gleichung, so erhält man:

$$\frac{v_{sp}}{v'_{1s}} = \frac{m_1}{m_2}$$

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{v_{sp}}{v'_{1s}}}$$

Weiter oben wurde gezeigt, dass $\frac{v_{sp}}{v'_{1s}} = \frac{m_1}{m_2}$ in diese Gleichung ein, erhält man folgende Beziehung:

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}$$

Das stellt genau die Verbindung zwischen θ_1 und θ her, die Sie erhalten wollten. Benutzt

$$\cos \theta_1 = \frac{1}{(\tan^2 \theta_1 + 1)^{1/2}}$$

man die Beziehung , so kann man

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}$$

in folgenden Ausdruck umschreiben:

$$\cos \theta_1 = \frac{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}{\left[1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \right]^{1/2}}$$

Man kann ganz analog θ_2 und θ zueinander in Beziehung setzen. Man kann zeigen, dass

$$\tan \theta_2 = \cot \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

ist und zudem, wenn man einen kleinen Trick anwendet, dass Folgendes gilt:

$$\theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}$$

Nun haben Sie also eine Beziehung zwischen den Winkeln im Labor- und im

Schwerpunktsystem hergestellt. Wie sieht es mit den Wirkungsquerschnitten in beiden Systemen aus? Das folgt im nächsten Abschnitt.

Die Wirkungsquerschnitte umrechnen

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Verbindung der Winkel θ_1 und θ_2 zu θ aufgezeigt, die Winkel der gestreuten Teilchen im Labor- und im Schwerpunktsystem. Welche Beziehung gilt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt – das Zentrum der Zielscheibe für das Streuen von Teilchen in ein bestimmtes Winkелеlement – beim Wechsel der Koordinatensysteme?

Das Differential $d\sigma$ ist infinitesimal klein und bleibt dasselbe in den beiden Systemen. Doch die Winkel, die das Raumelement $d\Omega$ ausmachen, verändern sich, wenn man zwischen beiden Systemen wechselt. Im Folgenden wird gezeigt, wie man den differentiellen Wirkungsquerschnitt im Laborsystem

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{lab}$$

zum differentiellen Wirkungsquerschnitt im Schwerpunktsystem

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

in Beziehung setzt.

Im Laborsystem gilt $d\Omega_1 = \sin\theta_1 d\theta_1 d\phi_1$. Im Schwerpunktsystem gilt $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. Da $d\sigma_{lab} = d\sigma_{sp}$ ist, gilt die folgende Gleichung:

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab}^{d\Omega_1} = \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}^{d\Omega}$$

Verbindet man diese Gleichung mit den obigen für das Labor- und Schwerpunktsystem, so erhält man:

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp} \frac{\sin\theta}{\sin\theta_1} \frac{d\theta}{d\theta_1} \frac{d\phi}{d\phi_1}$$

Da in diesem Fall zylindrische Symmetrie vorliegt, gilt $\phi = \phi_1$. Somit folgt:

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp} \frac{\sin \theta}{\sin \theta_1} \frac{d\theta}{d\theta_1} = \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp} \frac{d(\cos \theta)}{d(\cos \theta_1)}$$

$$\cos \theta_1 = \frac{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}{\left[1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}.$$

Sie haben bereits gesehen, dass

Somit gilt folgende Gleichung:

$$\frac{d(\cos \theta_1)}{d(\cos \theta)} = \frac{1 + \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right)}{\left[1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}$$

Daraus folgt:

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = \frac{\left[1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}{1 + \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right)} \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

Sie können genauso zeigen, dass folgende Gleichung gilt:

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = 4 \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

Teilchen gleicher Masse im Laborsystem

Stellen Sie sich vor, Sie haben zwei Teilchen der gleichen Masse, die im Laborsystem zusammenstoßen (wo ein Teilchen zunächst ruht). Jetzt soll gezeigt werden, dass sich die beiden Teilchen nach der Streuung im Laborsystem unter einem rechten Winkel zueinander bewegen.

$$\cos \theta_1 = \frac{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}{\left[1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}} \quad \text{die}$$

Wenn $m_1 = m_2$ ist, folgt aus Gleichung $\tan(\theta_1) = \tan(\theta/2)$, somit gilt $\theta_1 = \theta/2$.

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = \frac{\left[1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}{1 + \cos \theta \left(\frac{m_1}{m_2} \right)} \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

Aus
folgt in diesem Fall:

$$\left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = 4 \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

Beachten Sie außerdem, dass dann $\tan(\theta_2) = \cot(\theta/2)$ bzw. $\tan(\theta_2) = \tan(\pi/2 - \theta/2)$ gilt.

Sie wissen, dass $\theta_1 = \theta/2$ ist; aus $\tan(\theta_2) = \tan(\pi/2 - \theta/2)$ folgt:

$$\theta_2 = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}$$

Setzt man $\theta_1 = \theta/2$ in diese Gleichung ein, ergibt sich Folgendes:

$$\theta_2 = \frac{\pi}{2} - \theta_1$$

$$\theta_2 + \theta_1 = \frac{\pi}{2}$$

Somit addieren sich θ_1 und θ_2 , die Winkel der Teilchen nach dem Stoß im Laborsystem,

zu $\pi/2$. Das bedeutet θ_1 und θ_2 bilden einen rechten Winkel. Cool.

Wenn wie hier $m_1 = m_2$ gilt, vereinfachen sich die obigen Gleichungen folgendermaßen:

$$\checkmark \quad \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = 4 \cos(\theta_1) \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

$$\checkmark \quad \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_1} \right|_{lab} = 4 \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

$$\checkmark \quad \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_2} \right|_{lab} = 4 \cos(\theta_2) \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

$$\checkmark \quad \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega_2} \right|_{lab} = 4 \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left. \frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \right|_{sp}$$

Die Streuamplitude von spinlosen Teilchen

In dem früheren Abschnitt »Wechsel zwischen Schwerpunktsystem und Laborsystem« haben Sie erfahren, wie man vom Laborsystem in das Schwerpunktsystem wechselt und umgekehrt, und diese Umrechnungen gelten sowohl klassisch als auch in der Quantenphysik (jedenfalls solange, wie die beteiligten Geschwindigkeiten nicht relativistisch sind). Im folgenden betrachten Sie im Rahmen der zeitunabhängigen Quantenphysik die elastische Streuung von zwei spinlosen nicht relativistischen Teilchen.

Gehen Sie davon aus, dass die Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen nur von ihrem relativen Abstand $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ abhängt. Sie können Aufgaben dieser Art vereinfachen, indem Sie zwei entkoppelte Probleme daraus machen (Einzelheiten dazu stehen in Kapitel 9). Die erste entkoppelte Gleichung behandelt den Schwerpunkt der Teilchen wie ein freies Teilchen, und die

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

zweite behandelt ein fiktives Teilchen der Masse

Die erste Gleichung, die den Schwerpunkt betrifft, ist bei der Diskussion der Streuung nicht von Interesse. Die zweite Gleichung ist diejenige, auf die man sich konzentrieren muss:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Dabei gilt

Sie können diese Gleichung benutzen, um die Wahrscheinlichkeit zu berechnen, dass ein Teilchen in ein Winkелеlement $d\Omega$ gestreut wird; diese Wahrscheinlichkeit wird durch den

differentiellen Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ angegeben.



In der Quantenphysik entsprechen Teilchen Wellenpaketen. Bei Streuprozessen müssen diese Wellenpakete so breit sein, dass die Verbreiterung, die bei der Streuung auftritt, unwesentlich ist (das Wellenpaket kann aber auch nicht so breit sein, dass es das gesamte Labor, einschließlich der Detektoren, umfasst). Der springende Punkt ist hier folgender: Nach der Streuung zerfällt die Wellenfunktion in zwei Teile, einen gestreuten und einen ungestreuten Teil. Genau das ist die Streuung in der quantenphysikalischen Welt.

Die Wellenfunktion des einfallenden Teilchens

Man muss bedenken, dass das Streupotential $V(r)$ auf den sehr engen Bereich a begrenzt ist. Außerhalb dieses Bereichs verhalten sich die beteiligten Wellenfunktionen wie freie Teilchen. Daher ist die Wellenfunktion des einfallenden Teilchens außerhalb des Bereichs von $V(r)$ – also außerhalb der Entfernung a vom anderen Teilchen – durch folgende Gleichung gegeben (weil $V(r) = 0$ ist):

$$\nabla^2 \phi_{\text{ein}}(r) + k_0^2 \phi_{\text{ein}}(r) = 0$$

wobei
$$k_0 = \frac{\sqrt{2\mu E_0}}{\hbar}.$$

Der Ausdruck $\nabla^2 \phi_{\text{ein}}(r) + k_0^2 \phi_{\text{ein}}(r) = 0$ ist die Gleichung für eine ebene Welle, somit gilt $\phi_{\text{ein}}(r) = A e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$. Dabei ist A der Normalisierungsfaktor und $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}$ ist das Skalarprodukt aus dem Wellenvektor der einfallenden Welle und $\mathbf{r}$. Mit anderen Worten, Sie behandeln das einfallende Teilchen wie ein Teilchen mit dem Impuls $p = \hbar k_0$.

Die Wellenfunktion des gestreuten Teilchens

Nach der Streuung der spinlosen Teilchen ist die ungestreute Wellenfunktion nicht von großer Bedeutung für Sie, im Gegensatz zur gestreuten Wellenfunktion. Die einfallende

Wellenfunktion hat die Form $\phi_{\text{ein}}(r) = Ae^{ik_0 \cdot r}$ die gestreute Wellenfunktion sieht etwas anders aus:

$$\phi_{\text{st}}(r) = A f(\phi, \theta) \frac{e^{ik \cdot r}}{r}$$

Dabei ist $f(\phi, \theta)$ die *Streuamplitude*, und diese sollen Sie nun bestimmen. A ist der Normalisierungsfaktor; darüber hinaus gilt:

$$|k| = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

Dabei ist E die Energie des gestreuten Teilchens.

Der Zusammenhang zwischen Streuamplitude und differentiellm Wirkungsquerschnitt

Wenn man die Behandlung der Streuung in der Quantenphysik verstehen will, so ist die Streuamplitude spinloser Teilchen entscheidend. Um das zu verdeutlichen, werden im Folgenden die Flussdichten betrachtet: J_{ein} ist die Flussdichte der einfallenden Teilchen und J_{st} die der gestreuten Teilchen:

$$✓ \quad J_{\text{ein}} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\phi_{\text{ein}} \nabla \phi_{\text{ein}}^* - \phi_{\text{ein}}^* \nabla \phi_{\text{ein}})$$

$$✓ \quad J_{\text{st}} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\phi_{\text{st}} \nabla \phi_{\text{st}}^* - \phi_{\text{st}}^* \nabla \phi_{\text{st}})$$

Setzt man die Ausdrücke für ϕ_{ein} und ϕ_{st} in diese Gleichungen ein, so folgt:

$$✓ \quad J_{\text{ein}} = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{\mu}$$

$$✓ \quad J_{\text{st}} = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\phi, \theta)|^2$$

Dabei ist $f(\phi, \theta)$ die Streuamplitude.

Die Anzahl der Teilchen $dN(\phi, \theta)$, die in das Winkelement $d\Omega$ gestreut werden und die Fläche $dA = r^2 d\Omega$ passieren, lautet als Ausdruck des Flusses:

$$dN(\phi, \theta) = J_{\text{st}} r^2 d\Omega$$

$$J_{\text{st}} = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\phi, \theta)|^2$$

Setzt man

in diese Gleichung ein, so erhält man:

$$\frac{dN(\phi, \theta)}{d\Omega} = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} |f(\phi, \theta)|^2$$

Mit der zu Beginn des Kapitels verwendeten Gleichung

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{1}{J} \frac{dN(\phi, \theta)}{d\Omega}$$

ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{1}{J_{\text{ein}}} \frac{dN(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{k}{k_0} |f(\phi, \theta)|^2$$

Und jetzt folgt der Trick: Bei der elastischen Streuung ist $k = k_0$, und somit erhält man als Ergebnis:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = |f(\phi, \theta)|^2$$



Das Problem, den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu bestimmen, hat sich somit zur Bestimmung der Streuamplitude vereinfacht.

Bestimmung der Streuamplitude

Um die Streuamplitude – und damit den differentiellen Wirkungsquerschnitt – eines spinlosen Teilchens zu bestimmen, muss man die Schrödinger-Gleichung lösen:

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

Diese lässt sich auch folgendermaßen formulieren:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \psi(r)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung kann man als Summe aus einem homogenen und einem inhomogenen Anteil schreiben:

$$\psi(r) = \psi_h(r) + \psi_i(r)$$

Die homogene Lösung erfüllt die Gleichung:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_h(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \psi_h(r)$$

Die homogene Lösung ist eine ebene Welle; sie entspricht der einfallenden ebenen Welle:

$$Ae^{ik_0 \cdot r}$$

Will man betrachten, was bei der Streuung passiert ist, so muss man die inhomogene Lösung finden. Das macht man mithilfe der *Green'schen Funktion*. Die Lösung von

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \psi(r)$$

ist:

$$\psi(r) = Ae^{ik_0 \cdot r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(r-r') V(r') \psi(r') d^3 r'$$

$$G(r-r') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{iq(r-r')}}{k^2 - q^2} d^3 q$$

Dabei ist

Man kann diesen Ausdruck umformen:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{-1}{4\pi^2 i |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int \frac{q e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{q^2 - k^2} dq$$

Man kann diese Gleichung als Ausdruck der ankommenden und/oder der auslaufenden Welle lösen. Da das gestreute Teilchen eine auslaufende Welle ist, hat die Green'sche Funktion die folgende Form:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{-e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Sie wissen Folgendes:

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$$

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{-e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Setzt man in diese Gleichung ein, so folgt:

$$\psi(\mathbf{r}) = Ae^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{\mu}{2\pi \hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$$

Damit hat man für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ eine Integralgleichung erhalten. Aber wie wollen Sie dieses Mordsding lösen? Natürlich, Sie können die Born'sche Näherung benutzen.

Die Born'sche Näherung: Die Rettung der Wellengleichung

Sie stehen also vor dem Problem, die folgende Gleichung für $\psi(r)$ lösen zu müssen:

$$\psi(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \psi(r') d^3r'$$

Dabei ist $\phi_{\text{ein}} = Ae^{ik_0 \cdot r}$.

Sie können das mit einer Reihe von sukzessiven Näherungen machen, die *Born'sche Näherung* genannt werden (ein großartiges Ergebnis). Die Born'sche Näherung nullter Ordnung ist einfach $\psi_0(r) = \phi_{\text{ein}}(r)$. Setzt man $\psi_0(r)$, den Term nullter Ordnung, in die obere Gleichung ein, so erhält man den Term erster Ordnung:

$$\psi_1(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_1|}}{|r-r_1|} V(r_1) \psi_0(r_1) d^3r_1$$

Wenn man $\psi_0(r) = \phi_{\text{ein}}(r)$ in die Gleichung einsetzt, erhält man:

$$\psi_1(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_1|}}{|r-r_1|} V(r_1) \phi_{\text{ein}}(r_1) d^3r_1$$

Man erhält den Term zweiter Ordnung, indem man diese Gleichung in

$$\psi(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \psi(r') d^3r' \text{ einsetzt:}$$

$$\psi_2(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_2|}}{|r-r_2|} V(r_2) \psi_1(r_2) d^3r_2$$

$$\psi_1(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_1|}}{|r-r_1|} V(r_1) \phi_{\text{ein}}(r_1) d^3r_1$$

Setzt man in diese Gleichung ein, so erhält man folgendes Ergebnis:

$$\begin{aligned}
\psi_2(\mathbf{r}) = & \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|} V(\mathbf{r}_2) \phi_{\text{ein}}(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2 \\
& + \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|} V(\mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_2 \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|} V(\mathbf{r}_1) \phi_{\text{ein}}(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1
\end{aligned}$$

Dieses Muster setzt sich für Terme höherer Ordnung fort, die man bestimmen kann, indem man Terme niedrigerer Ordnung in die höherer einsetzt.

Die Wellenfunktion bei großen Abständen

Nachdem Sie die Born'sche Näherung kennen (siehe den vorangegangenen Abschnitt), wird im Folgenden dargestellt, was passiert, wenn r groß ist. In Streuexperimenten gilt gewöhnlich $r \gg r'$ wobei r der Abstand zwischen Target und Detektor ist und r' die Größe des

Detektors. Was wird aus

$$\psi(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \psi(r') d^3r'$$
der
 exakten Integralgleichung für die Wellenfunktion, wenn $r \gg r'$?

Da $r \gg r'$ gilt $k|r-r'| \approx kr - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'$, wobei $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'$ das Skalarprodukt von $\mathbf{k}$ und $\mathbf{r}'$ ist ($\mathbf{k}$ ist der Wellenvektor des gestreuten Teilchens). Darüber hinaus ist

$$\frac{1}{|r-r'|} \approx \frac{1}{r}$$

Setzt man diese beiden Gleichungen in

$$\psi(r) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \psi(r') d^3r'$$

ein, so erhält man:

$$\psi(r) = Ae^{ik_0 \cdot r} + \frac{Ae^{ikr}}{r} f(\phi, \theta) \quad r \rightarrow \infty$$

Dabei gilt:

$$f(\phi, \theta) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik \cdot r'} V(r') \psi(r') d^3r' = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \phi | V | \psi \rangle$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist gegeben durch:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = |f(\phi, \theta)|^2$$

In diesem Fall erhält man somit folgenden Ausdruck:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{-\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int e^{-ik \cdot r'} V(r') \psi(r') d^3r' \right|^2 = \frac{-\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \langle \phi | V | \psi \rangle$$

Anwendung der ersten Born'schen Näherung

Ist das Potential schwach, so ist die einfallende ebene Welle nur ein wenig verzerrt, und die gestreute Welle ist wieder eine ebene Welle. Das ist die Voraussetzung für die erste Born'sche Näherung, die hier betrachtet werden soll. Wenn Sie also annehmen, dass das Potential schwach ist, dann können Sie anhand der Gleichung

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} V(\mathbf{r}_1) \psi_0(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1$$

folgende Aussage machen:

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \phi_{\text{ein}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{\text{ein}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'$$

Was ist dann $f(\phi, \theta)$?

$$f(\phi, \theta) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'$$

Daraus ergibt sich folgende Gleichung, wobei $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$:

$$f(\phi, \theta) = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iq \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'$$

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = |f(\phi, \theta)|^2$$

Da gilt, folgt:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int e^{-iq \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \right|^2$$

Wenn die Streuung elastisch ist, ist der Betrag von $\mathbf{k}$ gleich dem Betrag von $\mathbf{k}_0$, und es folgt:

$$q = |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}| = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Wenn man außerdem annimmt, dass $V(r)$ kugelsymmetrisch ist und man die z-Achse entlang $\mathbf{q}$ legen kann, dann ist $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}' = qr' \cos\theta'$, und es folgt:

$$\begin{aligned}
 f(\phi, \theta) &= \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iq \cdot \mathbf{r}'} V(r') d^3\mathbf{r}' \\
 &= \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r'^2 V(r') dr' \int_0^\pi e^{-iqr' \cos\theta'} \sin\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi'
 \end{aligned}$$

Das ergibt gerade:

$$\begin{aligned}
 f(\phi, \theta) &= \frac{-\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r'^2 V(r') dr' \int_0^\pi e^{-iqr' \cos\theta'} \sin\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \\
 &= \frac{-2\mu}{q\hbar^2} \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr') dr'
 \end{aligned}$$

Da $\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = |f(\phi, \theta)|^2$ gilt, erhält man folgende Gleichung:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{4\mu^2}{q^2\hbar^4} \left| \int_0^\pi r' V(r') \sin(qr') dr' \right|^2$$

Sie sind in diesem Kapitel sehr weit gekommen, von der Schrödinger-Gleichung bis zur Born'schen Näherung und nun zur obigen Gleichung für ein schwaches kugelsymmetrisches Potential. Wie wäre es, wenn wir jetzt mit ein paar konkreten Zahlen rechnen würden?

Mit der Born'schen Näherung rechnen

In diesem Abschnitt berechnen Sie den differentiellen Wirkungsquerschnitt für zwei elektrisch geladene Teilchen der Ladung Z_1e und Z_2e . Das Potential lautet in diesem Fall:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

In der ersten Born'schen Näherung lautet der differentielle Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{-4Z_1^2 Z_2^2 e^4 \mu^2}{q^2 \hbar^4} \left| \int_0^\pi \sin(qr') dr' \right|^2$$

Da $\int_0^\pi \sin(qr') dr' = \frac{1}{q}$ ist, erhält man folgenden Ausdruck:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4 \mu^2}{q^4 \hbar^4}$$

Da $q = 2k \sin(\theta/2)$ ist, folgt des Weiteren:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4 \mu^2}{q^4 \hbar^4} = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E^2} \sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

Dabei ist E die kinetische Energie des einfallenden Teilchens:

Jetzt werden wir noch etwas genauer: Stellen Sie sich vor, Sie jagen ein Alpha-Teilchen mit $Z_1 = 2$ auf einen Goldkern mit $Z_2 = 79$. Was bedeutet es im Schwerpunktsystem, wenn der Streuwinkel im Laborsystem 60° beträgt?

Das Verhältnis der Teilchenmassen m_1/m_2 beträgt in diesem Fall 0,02. Wenn $\theta_{\text{lab}} = 60^\circ$, folgt für θ , den Streuwinkel im Schwerpunktsystem:

$$\tan \theta_{lab} = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}$$

Löst man diese Gleichung für θ , so erhält man $\theta = 61^\circ$. Wie lautet dann der Wirkungsquerschnitt für diesen Winkel? Nehmen Sie die Gleichung:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{4Z_1^2 Z_2^2 e^4 \mu^2}{q^4 \hbar^4} = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E^2} \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

Wenn die Energie des Alpha-Teilchens 8 MeV beträgt, dann ergibt das Einsetzen der Zahlen:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = 5,1 \times 10^{-29} \text{ m}^2$$

Das ist die Größe des Targets – der Wirkungsquerschnitt – den man treffen muss, um die beobachteten Streuwinkel zu erzeugen.

Das Wichtigste von Kapitel 13 noch einmal in Kürze

In einem typischen Streuexperiment wird ein Target, das beispielsweise aus Teilchen des Typs 2 besteht, mit einem Teilchenstrahl aus Typ 1 beschossen. Vor dem Stoß ruht Teilchen 2, Teilchen 1 bewegt sich mit einer bestimmten Geschwindigkeit v ; der Schwerpunkt bewegt sich gleichförmig, während der Stoß nur die Relativkoordinaten beeinflusst. Dabei zählt man die Teilchen eines Typs, die in eine bestimmte Richtung emittiert werden.

In der Streutheorie ist es aber üblich, das Bezugssystem zu wechseln und diesen Vorgang in einem System zu beschreiben, in dem der Schwerpunkt ruht. Diese Art von System wird Schwerpunktsystem genannt, während das System, in dem das Targetteilchen ruht, Laborsystem heißt. Im ersten Teil dieses Kapitels wurde gezeigt, wie man zwischen beiden Systemen wechselt und die Streuwinkel und die Wirkungsquerschnitte umrechnet.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ ist ein Maß für die Zahl der Teilchen, die pro Sekunde pro einfallendem Strom J in das Winkелеlement $d\Omega$ gestreut werden. Dabei beschreibt der einfallende Strom bzw. die Stromdichte J die Zahl der einfallenden Teilchen pro Einheitsfläche pro Zeiteinheit; $N(\phi, \theta)$ ist die Anzahl der Teilchen unter den Winkeln ϕ und θ . Es gilt:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = \frac{1}{J} \frac{dN(\phi, \theta)}{d\Omega}$$

Im zweiten Teil des Kapitels wurde die Streuamplitude spinloser Teilchen untersucht. Dabei zeigt sich, dass nicht die ungestreute Wellenfunktion, sondern nur die gestreute Wellenfunktion von Interesse ist. Sie lautet:

$$\phi_{st}(r) = A f(\phi, \theta) \frac{e^{ik \cdot r}}{r}$$

Dabei ist $f(\phi, \theta)$ die Streuamplitude. Betrachtet man elastische Streuung, so gilt folgende Gleichung:

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} = |f(\phi, \theta)|^2$$

Demzufolge hat sich die Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnitts auf das Problem reduziert, die Streuamplitude zu berechnen. Zum Abschluss des Kapitels wird schließlich die Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnittes für zwei elektrisch geladene Teilchen der Ladung $Z_1 e$ und $Z_2 e$ mithilfe der Bornschen Näherung erläutert.

Teil VI

Der Top-Ten-Teil

In diesem Teil ...

In diesem Teil geht es noch einmal so richtig rund. Wir stellen Ihnen die zehn besten Webseiten und die zehn Highlights der Quantenphysik vor. Ohne sie hätte man Effekte wie den Welle-Teilchen-Dualismus, die Unschärferelation oder den photoelektrischen Effekt nicht beschreiben können. In diesem Teil finden Sie sie wieder.

Zehn Webseiten zur Quantenphysik

In diesem Kapitel ...

- ▶ Die grundlegenden Ideen und Gleichungen
- ▶ Illustrationen und Animationen

Wenn Wissenschaftler anfangen, sich über Würfel, Billardkugeln und eine Katze in einer Schachtel, die möglicherweise doch nicht tot ist, zu unterhalten, dann wissen Sie, dass es um wirklich herausfordernde Themen geht. Glücklicherweise gibt es viele Internetseiten – einige von ihnen mit Animationen – die Ihnen helfen wollen, die Quantenphysik zu verstehen. Einige der besten sind im Folgenden aufgelistet.

Elektronen und Photonen aus Ulm

<http://fernando.chemie.uni-ulm.de/didactics/quantenchemie/html/>

Diese ausgezeichnete Seite behandelt viele Themen der Quantenphysik. Sie beschäftigt sich vor allem mit der Entwicklung der Theorie, ist sehr übersichtlich und bietet für die Quantenphysik-Liebhaber eine Vielzahl von Literaturhinweisen.

Quanten.de-Portal

<http://www.quanten.de/index.html>

Das *Quanten.de-Portal* bietet alles, was man über die Quantenphysik wissen will: Es liefert Informationen zu vielen speziellen Themen, darüber hinaus gibt es Webverzeichnisse, Links, Bücher und sogar einen Newsletter.

Joachims Quantenwelt

<http://www.quantenwelt.de/>

Joachims Quantenwelt versucht die Quantenphysik ohne Formeln darzustellen. Dabei werden viele Themen behandelt und viele Begriffe sehr gut erklärt. Es gibt auch ein alphabetisches Stichwortverzeichnis, das von großer Hilfe ist.

Visual Quantum Mechanics

<http://vqm.uni-graz.at/index-ge.html>

Der Name sagt es schon: *Visual Quantum Mechanics* versucht, die Quantenwelt sichtbar zu machen. Es gibt Bilder, Filme und Animationen, aber auch Artikel zu vielen Themen der Quantenphysik, darunter auch eine Einführung in die Quantenmechanik.

HydrogenLab

<http://www.hydrogenlab.de/>

Diese Seite beschäftigt sich, wie der Name schon sagt, ausschließlich mit dem Wasserstoffatom, wobei vor allem versucht wird, es sichtbar zu machen: Die Seite liefert Einzelbilder, Animationen, Multimediapräsentationen und auch Programme. Wer wissen will, wie das Wasserstoffatom aussieht, sollte zu dieser Seite gehen.

MILQ

<http://homepages.physik.uni-muenchen.de/~milq/>

Diese Seite stammt vom *Münchener Internetprojekt zur Lehrerfortbildung in Quantenmechanik*: Sie bietet einen Basiskurs zur Quantenmechanik und behandelt zusätzlich viele Spezialthemen. Zu jedem dieser Themen gibt es Animationen und begleitende Downloads. Dazu finden sich Arbeitsblätter, die sehr hilfreich sind.

Multimediaphysik

www.schulphysik.de

Diese Seite der Universität Würzburg bietet einen ausgezeichneten Startpunkt für die Beschäftigung mit der Physik und vor allem auch der Quantenphysik im Internet. Zu jedem Thema und zu jedem Stichwort gibt es Hinweise und Links. Der Name *Multimediaphysik* sagt es schon.

Quantum Mechanics Tutorial

<http://www.gilestv.com/tutorials/quantum.html>

Diese sehr gut aufgemachte Seite (in Englisch) gehört zu den Flash-animierten *Modern Physics Tutorials* von Giles Hogben. Sie ist sehr gut illustriert, behandelt Fragen wie den Welle-Teilchen-Dualismus und bietet eine sehr gute allgemeine Einführung in die Quantenphysik.

An Introduction to Quantum Mechanics

<http://www.chemistry.ohio-state.edu/betha/qm>

Was ist eine Wellenfunktion? Was ist ein Orbital?: *An Introduction to Quantum mechanics* (in Englisch) stammt von Neal McDonald, Midori Kitagawa-DeLeon, Anna Timasheva, Heath Hanlin, Zil Lilas und Sherwin J. Singer von der Ohio State University. Die Seite bietet unter anderem Abhandlungen über Wahrscheinlichkeiten, den Welle-Teilchen-Dualismus, Wellenfunktionen und vieles mehr.

HyperPhysics

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>

Diese Seite ist zwar auf Englisch, aber hier findet man wirklich alles, was mit Physik zu tun hat. Unter anderem gibt es auch interaktive Aufgaben in allen Bereichen, darüber hinaus sehr viele Stichwörter und eine Reihe von Themen zur Quantenphysik.

Zehn Highlights der Quantenphysik

In diesem Kapitel ...

- ▶ Erklärung unerwarteter Ergebnisse
- ▶ Eigenschaften der Quantenwelt
- ▶ Entwicklung neuartiger Vorstellungen

Die Quantenmechanik hat äußerst erfolgreich viele physikalische Effekte und Phänomene erklärt, zum Beispiel den Welle-Teilchen-Dualismus; sie wurde ja auch hauptsächlich eingeführt, um physikalische Messungen zu erklären, die im Widerspruch zur klassischen Physik standen. Dieses Kapitel stellt zehn Highlights der Quantenphysik vor; dabei wird auch immer auf Internetseiten verwiesen, die weitere Einzelheiten zu diesen Highlights liefern.

Welle-Teilchen-Dualismus

Ist ein Teilchen eine Welle? Oder sind Wellen Teilchen? Dies sind zwei der Fragen, die zur Entwicklung der Quantenphysik geführt haben, da in einigen Experimenten Teilchen auch Wellencharakter aufgewiesen haben und Wellen auch Teilcheneigenschaften besaßen.

Diese Internetseite liefert weitere Informationen:



<http://web.physik.rwth-aachen.de/~roth/physik4/kapitel1.pdf>

Der photoelektrische Effekt

Ein weiterer Meilenstein in der Entwicklung der Quantenphysik war die Erklärung des photoelektrischen Effektes. Bei diesem Experiment wird ein Metall mit Licht bestrahlt. Die Energie der vom Metall emittierten Elektronen ist dabei unabhängig von der Intensität des Lichts. Es stellte sich heraus, dass die Elektronenenergie mit der Frequenz des Lichts ansteigt, nicht mit seiner Intensität. Dies war ein wichtiger Hinweis darauf, dass Licht aus einem Strahl unteilbarer Photonen besteht.

Wenn Sie mehr über den photoelektrischen Effekt wissen wollen, gehen Sie zu den folgenden Webseiten:

✓ <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/1556>

✓ <http://www.pctheory.uni-ulm.de/didactics/quantenchemie/html/PhEff-F.html>

Entdeckung des Spins

Das Ergebnis des Stern-Gerlach-Versuchs kann nicht ohne den Spin von Teilchen erklärt werden, ein weiteres Highlight der Quantenphysik. Bei diesem Experiment passieren Elektronen ein magnetisches Feld. Die klassische Theorie sagt voraus, dass der Elektronenstrahl auf einem Bildschirm einen einzigen Fleck erzeugt; beobachtet werden aber zwei (als Folge der beiden möglichen Spin-Orientierungen, auf und ab).

Weitere Informationen finden Sie hier:

- ✓ <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/1630>
- ✓ <http://www.physik.unibas.ch/Praktikum/VPII/SternGerlach/SternGerlach.html>

Unterschiede zwischen den Newton'schen Gesetzen und der Quantenphysik

In der klassischen Physik können gebundene Teilchen jede Energie und Geschwindigkeit besitzen; die Quantenphysik zeigt, dass dies nicht richtig ist. Wiederum in der klassischen Physik können sowohl Ort als auch Impuls von Teilchen genau bestimmt werden; die Quantenphysik zeigt erneut, dass dies unmöglich ist (dank der Heisenberg'schen Unschärferelation). Darüber hinaus erlaubt die Quantenphysik die Überlagerung von Zuständen sowie das Tunneln von Teilchen in Bereiche, die klassisch nicht erlaubt sind.

Eine Erklärung der Unterschiede zwischen klassischer und Quantenphysik findet sich auf folgender Webseite:



<http://www.theo-physik.uni-kiel.de/uebungen/qmkapitel1.ps.gz>

Die Heisenberg'sche Unschärferelation

Eine der größten Erfolge der Quantenphysik ist die Heisenberg'sche Unschärfebeziehung; Heisenberg zeigte theoretisch, dass man den Ort und den Impuls eines Teilchens nicht gleichzeitig genau messen kann. Dies ist eines der wichtigsten Ergebnisse, und es bedeutete das Ende der klassischen Physik.

Zu den besten Internetseiten über dieses Thema gehören:



<https://www.quanten.de/pdf/unschaerferelation.pdf>



<http://www.pctheory.uni-ulm.de/didactics/quantenchemie/html/GrenzF.html>

Der Tunneleffekt

Wie können Teilchen in Bereiche gelangen, für die sie nicht genügend Energie besitzen und die sie der klassischen Theorie zufolge nicht erreichen können? Wie kann zum Beispiel ein Elektron der Energie E in ein elektrostatisches Feld eindringen, wenn dafür höhere Energien erforderlich sind? Die Antworten auf diese Fragen liefert der quantenphysikalische Tunneleffekt.

Weitere Einzelheiten liefern folgende Internetseiten:



<http://www.chemie.unibas.ch/~physnach/PDF/Tunneleffekt.pdf>



http://www-alt.physik.unimuenchen.de/intranet/archiv/SoSe05/PLIV/skript/PL4_10_Tunneleffekt_handout.pdf

Diskrete Atomspektren

Die Vorhersage der quantisierten Niveaus oder Orbitale in Atomen ist ein weiterer Höhepunkt der Quantenphysik. Es stellte sich heraus, dass Elektronen in einem Atom nicht jede beliebige Energie besitzen können. Vielmehr sind nur bestimmte *quantisierte* Zustände erlaubt. Diese Tatsache ist eine der wichtigsten Grundlagen der Quantenphysik.

Wenn Sie mehr wissen wollen, gehen Sie zu:



[http://www.wtu-freiberg.de/mk/Dokumente/Atomphysik/Atomspektren\(3\).ppt](http://www.wtu-freiberg.de/mk/Dokumente/Atomphysik/Atomspektren(3).ppt)

Der harmonische Oszillator

Die Quantisierung der Energieniveaus von harmonischen Oszillatoren ist ein weiteres Highlight der Quantenphysik. Der klassischen Physik zufolge können harmonische Oszillatoren jede Energie einnehmen, nicht aber im Rahmen der Quantenphysik. Raten Sie, welche Theorie recht hat!

Weitere Einzelheiten finden Sie hier:

✓ <http://www.students.uni-mainz.de/tlangen/harmosz.pdf>

✓ <http://fptchlx02.tu-graz.ac.at/quanten/qmoszillator.html>

Potentialtöpfe

Ebenso wie für harmonische Oszillatoren war die Quantisierung von Teilchen in Potentialtöpfen ein weiterer Erfolg der Quantenphysik. Der klassischen Physik zufolge können Teilchen in Potentialtöpfen jede beliebige Energie einnehmen, während die Quantenphysik vorhersagt, dass nur diskrete Niveaus erlaubt sind.

Es gibt viele weitere Informationen im Internet, unter anderem auf folgender Seite:



<http://www.pctheory.uni-ulm.de/didactics/quantenchemie/html/potTopfF.html>

Schrödingers Katze

In der Quantenphysik Gegenstand eines berühmten Gedankenexperiments: In einem Raum befindet sich eine Katze und ein instabiler Atomkern, der nach einer gewissen Zeit zerfällt. Dieser Zerfall wird von einem Geigerzähler nachgewiesen, der dann ein Giftgas freisetzt, das die Katze tötet.

Der Quantenmechanik zufolge gibt es für den Atomkern für eine Zeitspanne einen Zustand der Überlagerung, in dem er sowohl zerfallen als auch nicht zerfallen ist. Wenn dies auch für die makroskopische Katze gälte, so müsste sie in dieser Zeitspanne sowohl tot als auch lebendig sein. Ein wirklich kniffliges Problem!

Weitere Einzelheiten und Antworten liefert folgende Internetseite:

http://www.quanten.de/pdf/schroedingers_katze.pdf

Glossar

Hier folgt ein Glossar der gebräuchlichsten Begriffe der Quantenphysik:

Amplitude: Die größte Auslenkung eines schwingenden Teilchens.

Anti-Hermiteischer Operator: Ein Operator, für den gilt $A^\dagger = -A$

Antiteilchen: Jedes Elementarteilchen besitzt ein entsprechendes Antiteilchen. Es kommt in der normalen Materie nicht vor und unterscheidet sich vom konventionellen Teilchen durch die Ladung, besitzt aber die gleiche Masse, Spin und magnetisches Moment. Das Photon ist sein eigenes Antiteilchen.

Arbeit: Das Produkt aus Kraft und dem Weg, über den die Kraft wirkt.

Betrag: Der Betrag oder die Länge eines Vektors (Vektoren besitzen eine Richtung und einen Betrag).

Bohr'scher Radius: Der mittlere Abstand der Kreisbahn eines Elektrons in einem Wasserstoffatom (im klassischen Sinn): etwa 10^{-10} .

Bosonen: Teilchen mit ganzzahligem Spin, wie etwa Photonen, π -Mesonen usw.

Bra-Ket-Schreibweise: Abkürzung der Matrixform von Zustandsvektoren durch einen Ket-Vektor $|\psi\rangle$, bzw. seines konjugiert komplexen Vektors (Bra-Vektor) $\langle\psi|$.

Compton-Effekt: Die vom Streuwinkel abhängige Zunahme der Wellenlänge, die auftritt, wenn Licht auf ein ruhendes Elektron trifft.

Diagonalisierung: Umformung einer Matrix, sodass in ihrer Diagonalen nur von Null verschiedene Elemente auftauchen.

Differentieller Wirkungsquerschnitt: Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist in der Streutheorie ein Maß für die Zahl der in ein bestimmtes Winkелеlement gestreuten Teilchen; er stellt so etwas wie den Mittelpunkt einer Zielscheibe dar.

Dirac-Konstante: Die Planck'sche Wirkungskonstante ($h = 6,6256 \times 10^{-34}$ Js) geteilt durch 2π . Sie wird durch ein durchgestrichenes h dargestellt: $\hbar$.

Dirac-Schreibweise: Siehe Bra-Ket-Schreibweise.

Drehimpuls: Das Produkt aus dem Abstand eines Teilchens (Körpers) von einem Drehpunkt und seines Impulses senkrecht zur Achse Teilchen-Drehpunkt.

Eigenwert: Eine komplexe Konstante, die die Änderung des Betrages eines Vektors beschreibt.

Eigenvektor: Ein Vektor, dessen Betrag, nicht aber dessen Richtung sich ändert, wenn ein Operator auf ihn wirkt.

Einfache harmonische Bewegung: Eine sich wiederholende Bewegung, bei der die Rückstellkraft proportional zur Auslenkung ist.

Einfallender Fluss: Die Anzahl einfallender Teilchen pro Einheitsfläche und Zeit.

Elastischer Stoß: Ein Stoß, bei dem die kinetische Energie der Stoßpartner erhalten bleibt.

Elektrisches Feld: Die Kraft auf eine Probeladung, geteilt durch ihre Ladung, als Folge der Wechselwirkung mit anderen Ladungen.

Elektron: Ein negativ geladenes Elementarteilchen mit halbzahligen Spin.

Elektronenvolt (eV): Die Energie, die ein Elektron gewinnt, wenn es eine Potentialdifferenz von 1 V durchläuft.

Emissivität: Eine Eigenschaft von Materie, die eine Aussage darüber macht, wie gut sie Strahlung emittiert.

Energie: Die Fähigkeit eines Systems Arbeit zu verrichten.

Energie-Entartung: Die Anzahl von Zuständen mit der gleichen Energie.

Energieerhaltung: Dieses physikalische Gesetz besagt, dass sich die Energie eines abgeschlossenen Systems nicht ändert, solange keine äußeren Einflüsse auf das System wirken.

Energie-Topf: Siehe Potentialtopf.

Erwartungswert: Der wahrscheinlichste Wert, der durch die Anwendung eines Operators erzeugt wird.

Erzeugungsoperator: Ein Operator, der die Energie eines Eigenzustands um ein Niveau anhebt.

Fermionen: Teilchen mit halbzahligen Spin, wie etwa Elektronen, Protonen, Neutronen, Quarks usw.

Frequenz: Die Anzahl von Schwingungen pro Sekunde.

Gebundener Zustand: Ein Zustand, von dem sich ein Teilchen nicht frei in das Unendliche entfernen kann.

Geschwindigkeit: Die Rate der Ortsänderung eines Objekts. Die Geschwindigkeit ist ein Vektor.

Hamilton-Operator: Ein Operator, der die Gesamtenergie eines Teilchens beschreibt, sowohl die kinetische als auch die potentielle.

Heisenberg'sche Unschärferelation: Siehe Unschärferelation.

Hermesch-Adjungierte: Ein durch $A^\dagger$ dargestellter Operator, der komplexe Zahlen durch ihre konjugiert komplexen ersetzt, Zeilen und Spalten vertauscht.

Hermesch Operator: Operatoren, die gleich ihrem hermitesch adjungierten sind; mit anderen Worten, ein Operator ist hermitesch, wenn $A^\dagger = A$.

Impuls: Das Produkt aus Masse und Geschwindigkeit eines Teilchens. Der Impuls ist ein Vektor.

Intensität einer Welle: Die zeitlich gemittelte, von einer Welle transportierte Energie pro Einheitsfläche.

Joule: Im MKS-System die Einheit der Energie: 1 Nm.

Ket-Vektor: Siehe Bra-Ket-Schreibweise.

Kinetische Energie: Die Bewegungsenergie eines Teilchens.

Kommutieren: Zwei Operatoren kommutieren, wenn ihr Kommutator gleich null ist. Der Kommutator zweier Operatoren A und B ist $[A, B] = AB - BA$.

Komplex konjugiert: Die Zahl, die man erhält, wenn man das Vorzeichen des Imaginärteils einer Zahl austauscht. Die komplex Konjugierte wird durch das Symbol * gekennzeichnet.

Kugelkoordinaten: Koordinatensystem, bei dem zwei Winkel und die Länge eines Radiusvektors zur Beschreibung einer Position benutzt werden.

Laborsystem: In der Streuungstheorie das Bezugssystem, in dem ein einfallendes Teilchen auf ein ruhendes trifft. Siehe auch Schwerpunktsystem.

Laplace-Operator: Ein Operator (dargestellt durch Δ), den man benutzt, um den Hamilton-Operator zu finden.

Leistung: Die Rate der Änderung der Energie eines Systems.

Magnetisches Feld: Die von magnetischen oder sich bewegenden Ladungen ausgeübte Kraft auf eine sich bewegende Probeladung (geteilt durch deren Ladung).

Masse: Die Eigenschaft von Materie, sich einer Beschleunigung zu widersetzen.

MKS-System: Das Maßsystem, das auf den Einheiten Meter, Kilogramm und Sekunde beruht.

Newton: Im MKS-System die Einheit der Kraft: $1 \text{ N} = 1 \text{ kg m s}^{-2}$.

Normalisierte Funktion: Eine Funktion, bei der sich die Wahrscheinlichkeiten zu 1 addieren.

Orbitale: Drehimpulszustände eines Teilchens (z.B. eines Elektrons), die sich in der Atomstruktur als Unterschalen darstellen.

Orthogonal: Wenn für zwei Ket-Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ gilt: $\langle \psi | \phi \rangle = 0$, so sind sie zueinander orthogonal.

Orthonormal: Wenn zwei Ket-Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ folgende Bedingungen erfüllen: $\langle \psi | \phi \rangle = 0$, $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ und $\langle \phi | \phi \rangle = 1$, so sind sie zueinander orthonormal.

Paar-Erzeugung: Die Umwandlung eines hochenergetischen Photons in ein Elektron und ein Positron.

Paar-Vernichtung: Die Umwandlung eines Elektrons und eines Positrons in Licht.

Pauli-Prinzip: Zwei Elektronen können in einem Atom nicht denselben Zustand einnehmen.

Photoelektrischer Effekt: Die Emission von Elektronen aus einem Metall aufgrund von Lichtstrahlung. Die kinetische Energie der Elektronen hängt nur von der Frequenz, nicht aber von der Intensität des einfallenden Lichtes ab.

Photon: Ein Quant elektromagnetischer Strahlung.

Pi-Meson: Ein subatomares Teilchen, das dazu beiträgt, den Kern eines Atoms zusammenzuhalten.

Plancksche Konstante: Eine universelle Konstante, die die Beziehung zwischen Energie und Frequenz eines Teilchens beschreibt. Ihr Wert beträgt $h = 6,6256 \times 10^{-34} \text{ Js}$.

Positron: Das positiv geladene Anti-Elektron.

Potentialbarriere: Eine räumlich begrenzte Potentialstufe. Ein Elektron kann in der Lage sein, durch die Barriere zu tunneln und auf der anderen Seite wieder auszutreten.

Potentialstufe: Ein Gebiet, in dem die potentielle Energie eine stufenförmige Erhöhung aufweist. Ein Teilchen, das auf die Stufe trifft, kann entweder reflektiert oder durchgelassen werden.

Potentialtopf: Ein Gebiet, in dem die potentielle Energie geringer ist als im umgebenden Bereich. Teilchen mit zu geringer Energie bleiben im Topf gefangen und können ihre potentielle

Energie nicht in kinetische umwandeln.

Potentielle Energie: Die Energie eines Objektes aufgrund seiner Lage, wenn beispielsweise eine Kraft auf das Objekt oder seine inneren Bestandteile wirkt.

Quantisierung: Das Auftreten von unteilbaren (diskreten) Einheiten einer Größe.

Quark: Teilchen, die zusammen mit Antiquarks Protonen, Neutronen usw. bilden.

Radiant: Die MKS-Einheit von Winkeln. 2π bilden einen Vollkreis.

Schrödinger-Gleichung: Liefert eine Wellenfunktion, die beschreibt, wie sich die Energie und der wahrscheinliche Aufenthaltsort von Elektronen mit der Zeit ändern.

Schwarzer Körper: Ein Körper, der alle Strahlung absorbiert und dann wieder abstrahlt.

Schwellfrequenz: Licht mit geringerer Frequenz ist nicht in der Lage, Elektronen aus Metallen auszulösen. Dies ist nur oberhalb der Schwellfrequenz möglich.

Schwerpunktsystem: In der Streutheorie das Bezugssystem, in dem der Massenschwerpunkt stationär ist und sich die Teilchen aufeinander zu bewegen und zusammenstoßen. Siehe auch Laborsystem.

Schwingung: Eine regelmäßige periodische Bewegung.

Schwingungsdauer: Die Dauer eines Zyklus einer sich wiederholenden Bewegung.

Skalar: Eine einfache Zahl (im Gegensatz zum Vektor ohne Richtung).

Spin: Der intrinsische Drehimpuls eines Elektrons. Er kann entweder auf- oder abwärts gerichtet sein.

Strahlung: Der Transport von Wärme und Energie als elektromagnetische Welle.

Störung: Eine Anregung, die schwach genug ist, dass man die sich ergebenden Energieniveaus und Wellenfunktionen als Berichtigung der fundamentalen Niveaus und Wellenfunktionen des ungestörten Systems berechnen kann.

Stromdichte: Siehe Teilchenstromdichte

Synchrotron: Ein spezieller Typ eines Teilchenbeschleunigers.

Teilchen: Eine diskrete Materieeinheit.

Totaler Wirkungsquerschnitt: In der Streutheorie der Gesamtwirkungsquerschnitt für jede Art von Streuung unabhängig vom Streuwinkel.

Tunneleffekt: Das Phänomen, dass Teilchen Gebiete durchdringen können, die klassisch

verboten sind.

Ultraviolett-Katastrophe: Das Versagen des Raleigh-Jeans-Gesetzes, die Strahlung eines schwarzen Körpers für hohe Frequenzen zu beschreiben.

Unelastischer Stoß: Ein Stoß, bei dem die kinetische Energie der Stoßpartner nicht erhalten bleibt.

Unschärferelation: Die Unschärferelation besagt, dass es unmöglich ist, gleichzeitig Ort und Impuls eines Objektes genau zu kennen.

Vektor: Eine Größe, die sowohl einen Betrag als auch eine Richtung besitzt.

Vernichtungsoperator: Ein Operator, der die Energie eines Eigenzustandes um ein Niveau erniedrigt.

Volt: Im MKS-System die Einheit des elektrostatischen Potentials (1 J/C).

Wahrscheinlichkeitsamplitude: Die Wurzel aus der Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen einen bestimmten Zustand einnimmt.

Wahrscheinlichkeitsdichte: Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen eine bestimmte Position einnimmt oder einen bestimmten Impuls besitzt.

Welle: Eine sich räumlich fortpflanzende energetische Störung.

Wellenlänge: Der Abstand zwischen zwei Wellenbergen oder zwei Wellentälern.

Welle-Teilchen-Dualismus: Die Beobachtung, dass Licht je nach Experiment sowohl Wellen- als auch Teilchencharakter aufweisen kann.

Wellenpaket: Eine Anzahl von Wellenfunktionen, die an einem Ort positiv interferieren, aber negativ an allen anderen Orten (sich dort also auslöschen).

Zentralpotential: Ein kugelsymmetrisches Potential.

Zustandsvektor: Ein Vektor, der die Wahrscheinlichkeitsamplitude angibt, mit der sich Teilchen in den verschiedenen, ihnen möglichen Zuständen befinden.

Stichwortverzeichnis

A

3D-Harmonischer Oszillator

3D-Schrödinger-Gleichung

Adjungiert

Alpha-Teilchen

Amplitude

Anti-hermitescher Operator

Antisymmetrische Wellenfunktion

Antiteilchen

Atom

Diskrete Spektren

Pauli-Prinzip

Periodensystem

Vielelektronen-Atome

Zusammengesetzte Teilchen

Zweiatomiges Molekül

Austauchoperator

Austauschoperator

Austausch-Symmetrie

Austauschoperator

B

Bahndrehimpuls

Bahndrehimpulsquantenzahl
Basisfreie Vektoren
Begrenztes Potential
Nichtnull-Lösung
Reflektionskoeffizient
Teilchen mit genügend Energie
Teilchen mit geringer Energie
Transmissionskoeffizient
Beschleunigung
Besetzungszahloperator
Bessel-Funktionen
Bohr, Niels
Bohrscher Radius
Bohr-Sommerfeldsches Atommodell
Bornsche Näherung, *siehe* Streuung
Boson
Bosonen
Bracket-Schreibweise
Bra-Ket-Schreibweise
Bra-Vektor

C

Compton, Artur
Compton-Effekt
Compton-Wellenlänge

D

De Broglie, Louis

Diagonalisierung

Die allgemeine Form der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

Differentialoperator

Differentieller Wirkungsquerschnitt

Bornsche Näherung

Definition

Laborsystem

Schwerpunktsystem

Spinlose Teilchen

Streutheorie

Dirac, Paul

Dirac-Schreibweise

Bra-Vektor

Ket-Vektoren

Überblick

Diskrete Atomspektren

Doppelspaltanordnung

Drehimpuls

Eigenfunktionen

Eigenwerte

Eigenzustände

einer rotierenden Scheibe

Erhöhungsoperator

Erniedrigungsoperator

Impulsoperatoren

Kommutatoren

Kugelkoordinaten

Matrix-Darstellung

Orbital

Quantenzahl

Quantenzahl

Rotationsenergie

Spinoperator

Überblick

Zustandsgleichungen

Drehimpulsoperator

Drehimpulsquantenzahl

d-Zustand

E

Eigendrehimpuls

Eigenfunktion

Antisymmetrische

Freie Teilchen

Symmetrische

von L^2 in Kugelkoordinaten

von L_z in Kugelkoordinaten

Eigenvektor

Bestimmung

Definition

eines Operator

Entarteter Hamilton-Operator

und Eigenwerte

Eigenwert

Bestimmung

Erhöhungsoperator

Erniedrigungsoperator

und Eigenvektoren

Eigenwertgleichung

Eigenzustand

Erster angeregter Zustand

Grundzustand

Ortsraum

Zweiter angeregter Zustand

Eigenzustand

Energie von $a|n\rangle$

Eigenzustand

Energie von $a^\dagger|n\rangle$

Einfallende Stromdichte

Einfallender Fluss

Einfallendes Licht

Einfallendes Teilchens

Kinetische Energie

Einfallendes Teilchens, Kinetische Energie

Einfallendes Teilchens, Wellenfunktion

Einheitsmatrix

Einheitsoperator

Einstein, Albert

Elektrisches Feld

Harmonischer Oszillator im

Schwaches Feld

Wasserstoffatom im

Elektron

Antiteilchen

Bohrscher Radius

Compton-Wellenlänge

Emission

Kinetische Energie

Lokalisierung im Wasserstoffatom

Orbital

Periodensystem

Photoelektrischer Effekt

Schalenstruktur

Stöße

Unterschalen

Elektronenstrahl

Elektrostatische potentielle Energie

Energie

kinetische

potentielle

Energie des Grundzustands

Energieeigenwert

Energieeigenwerte

Energie-Entartung

3D-Oszillator

Grundzustand

Stark-Effekt

Wasserstoffatom

Energieniveaus

Bestimmung

Entartung

Harmonische Oszillator im elektrischen Feld

Entartete Hamilton-Operatoren

Entartung

3D-Oszillator

Austausch-Entartung

Grundzustand

Stark-Effekt

Wasserstoffatom

Entartungsgrad

Erhaltungsgröße

Erhöhungsoperator

Erniedrigungsoperator

Drehimpuls

Harmonischer Oszillator

Harmonischer Oszillator

Erniedrigungsoperatoren

Eigenwerte

Erster angeregter Zustand

Erwartungswert

Elektronenabstand

Erwartungswert

eines anti-hermiteschen Operators

eines hermiteschen Operators

Erwartungswert

eines Operators

Erzeugungsoperator

F

Fermion

Fermionen

Freie Teilchen

Schrödinger-Gleichung

Freie Teilchen

Gesamtenergie

Gleichungen für x, y und z

im Dreidimensionalen

Kugelkoordinaten

Wellenpaket

Zeitabhängigkeit

f-Zustand

G

Gamma-Strahlen

Gausssches Wellenpaket

Gebundener Zustand

Geladener Oszillator

Energie

Wellenfunktion

Gerlach, Walther

Gesamtenergie

Geschwindigkeit

Gestreute Wellenfunktion

Gleichbleibender Hamilton-Operator

Goudsmit, Samuel A.

Gradientoperator

Graviton

Greensche Funktion

g-Zustand

H

Hamilton-Operator

3D-Schrödinger-Gleichung

Definition

Eigenwerte

Harmonischer Oszillator

Näherung nullter Ordnung

Störungstheorie

Vielteilchensysteme

Harmonischer Oszillator

Isotrop

Matrizen

Ortsraum

Proton

Quantisierung

Harmonischer Oszillator

Energie von $a^\dagger | n \rangle$

Energieniveaus

Erster angeregter Zustand

Klassisch

Zweiter angeregter Zustand

Harmonischer Oszillator

Wellenfunktion des Grundzustands

Harmonischer Oszillator

Hermite-Polynome

Harmonischer Oszillator

3D

Harmonischer Oszillator

Hermite-Polynome

Harmonischer Oszillator

im elektrischen Feld

Hauptquantenzahl

Heisenberg, Werner

Heisenbergsche Unschärferelation

Hermite-Polynome

Hermiteisch Konjugierte

Hermiteischer Operator

Definition

Eigenwerte

Ersetzung von Operatoren Operator

Hermiteisch konjugierte

Kommutator

Unitär Transformierte

Hilbert

Hilbertraum

Erstellung von Vektoren

Ortsvektoren

Zustandsvektor

Hooksches Gesetz

h-Zustand

I

Identische nicht-wechselwirkende Teilchen

Identische Teilchen

Impulsoperator

Impulsvektor

Interferenz von Wellen

Isotroper harmonischer Oszillator

Isotropischer harmonischer Oszillator

K

Kastenpotential

Ket-Vektor

Zustandsvektor als

Ket-Vektoren

Basislose Zustandsvektoren

Normalisiert

Orthogonal

Orthonormal

Schwarzsche Ungleichung

Kinetische Energie

eines Elektrons

eines Protons

Mehrelektronen-Atom

Radial

Rotationsenergie

Klassische Physik

Kommutator

Bestimmung von

von Drehimpulsoperatoren

von Operatoren

Kommutatoren

Unitäre Umformungen

Komplex konjugiert

Bra-Vektoren

Definition

Hermiteisch Adjungierte

Unitäre Operatoren

Komplexe Zahl

Kontinuierliche Darstellung

Korrekturen zweiter Ordnung

Korrekturterm zweiter Ordnung

Kosmische Strahlung

Kreisfrequenz

Kugelflächenfunktion

Kugelfunktionen

Kugelkoordinaten

Eigenfunktion

von L^2

von L_z

Kugelkoordinaten

Definition

Freie Teilchen in 3D

Isotroper harmonischer Oszillator

Radiusvektor

Schrödinger-Gleichung

Sphärische Bessel-Funktionen

Sphärische Neumann-Funktionen

Überblick

Umrechnung

Zentralpotential

L

L^2 -Operator

Laborsystem

Streuwinkel

Teilchen gleicher Masse

Überblick

und Schwerpunktsystem

Wirkungsquerschnitt

Laguerre-Polynome

Laplace-Operator

Leiteroperator

Licht

als Teilchen

Frequenz

Lichtgeschwindigkeit

Photoelektrischer Effekt

Photon

Schwarzkörperstrahlung

Spektrum

Streuung

Wellenlängenshift

Lichtgeschwindigkeit

Lichtwellen

Linearer Operator

M

Magnetische Quantenzahl

Magnetquantenzahl

Masse

Mathematik

Matrix-Darstellung

Matrizen

Drehimpuls

Harmonischer Oszillator

Pauli-Matrizen

Spin $\frac{1}{2}$ -Matrizen

Matrizenmechanik

Messgröße

Mittelwert

Momentanbeschleunigung

N

Näherung nullter Ordnung

Nebelkammer

Nebenquantenzahl

Neumann-Funktionen

Neutron

Newtonsche Gesetze

Nichtentartete Hamilton-Operatoren

Normalisiert

Ket

Normalverteilung

Normierte Funktion

Normierung

O

Operator

Besetzungszahloperator

Hamilton-Operator

Leiteroperatoren

Orbital

Orthogonal

Orthonormal

Ortsdarstellung

Ortsoperator

Ortsoperatoren

Ortsvektor

P

Paarerzeugung

Paarvernichtung

Pauli, Wolfgang

Pauli-Matrizen

Pauli-Prinzip

Periodensystem

Permutationsoperator

Photoelektrischer Effekt

Photon

Pi-Meson

Planck, Max

Plancksche Quantisierung

Plancksches Gesetz

Plancksches Wirkungsquantum

Plancksche Konstante

Potentialbarriere

Reflexionskoeffizient

Schrödinger-Gleichung

Überblick

Wentzel-Kramers-Brillouin-Methode

Potentialbarriere

$E > V_0$

Potentialbarriere

$E < V_0$

Potentialstufe

Potentialtopf

Teilchen einschließen

Überblick

und quantisierte Energie

Potentielle Energie

Potenzreihenansatz

Produktansatz

Proton

Proton/Elektron-System

Schwerpunkt

p-Zustand

Q

Quantentunneln

Quantenmechanik

Quantenphysik

Quanten-Schwingung

Quantenzahl

Drehimpuls

Gesamtenergie eines Teilchens

Hauptquantenzahl

i-tes

i-tes Teilchen

Orbitale

Periodensystem

Quantenzustand des Wasserstoffatoms

Quantisierte Zustände

Radiale Quantenzahl

Spin

und Pauliprinzip

Quantisierungsbedingung

Quark

R

Radiale kinetische Energie

Radiale Quantenzahl

Radiale Schrödinger-Gleichung

Erlaubte Energien

Hauptquantenzahl

Lösung

Lösung für große r

Lösung für kleine r

Radiale Quantenzahl

Radialgleichung

Radiusvektor

Randbedingung

Rayleigh-Jeans-Gesetz

Rechteckpotential

Rechtwinklige Koordinaten

3D-Harmonischer Oszillator

3D-Schrödinger-Gleichung

Energieniveaus

Freie Teilchen in 3D

Gesamtenergie

Gleichungen für x , y und z

Kastenpotential

Wellenfunktion

Würfelpotential

Zeitabhängigkeit

Reduzierte Masse

Reflexionskoeffizient

Reihen-Entwicklung

Relativitätstheorie

Rotationsenergie

Rotationssymmetrie

Rückstellkraft

Rydberg-Konstante

S

S^2 -Operator

Schrödinger-Gleichung

Potentialstufe

Schrödinger, Erwin

Schrödinger-Gleichung

3D

3D-Oszillator

Freie Teilchen

Lösung der Radialgleichung

Lösung für $\psi(r)$

Lösung für $\psi(R)$

Lösung für große r

Lösung für kleine r)

Potentialbarriere

Radiale Quantenzahl

Radialgleichung

Teilchenenergie
Teilung für Wasserstoffatom
Vereinfachung für Wasserstoffatom
Wasserstoffatom
Wellenmechanik
Zeitabhängig
zeitunabhängig
Zentralpotential
Schrödingers Katze
Schwarzkörperstrahlung
Schwarzsche Ungleichung
Schwellfrequenz
Schwerpunktsystem
Definition
und Laborsystem
und Streuwinkel
und Wirkungsquerschnitt
Separationsansatz
Separierung
Spaltenvektor
Sphärische Bessel-Funktionen
Sphärische Neumann-Funktionen
Sphärischen Neumann-Funktion
Sphärischer Laplace-Operator

Sphärisches Kastenpotential

sPIN

Quantenzahlen

Spin

Bosonen

Definition

down

Eigenzustände

Entdeckung

Fermionen

Pauli-Spinmatrizen

und Bahndrehimpuls

up

Spin $1/2$ -Matrizen

Spinlose Teilchen

Spinquantenzahl

Stark-Effekt

Stern, Otto

Stern-Gerlach-Versuch

Stetigkeit

Störung

Energie des ungestörten Systems

Energieniveaus

Entartete Hamilton-Operatoren

Gleichungen

Hamilton-Operator

Koeffizienten von λ

Korrekturen erster Ordnung

Korrekturen zweiter Ordnung

Nichtentartete Hamilton-Operatoren

Oszillator im elektrischen Feld

Wasserstoff in elektrischen Feldern

Wellenfunktion

Zeitunabhängige Störungstheorie

Störungstheorie

Streutheorie

Streuung

Bornsche Näherung

Differentieller Wirkungsquerschnitt

Einfallender Fluss

Laborsystem

Schwerpunktsystem

Spinlose Teilchen

Teilchen gleicher Masse

Totaler Wirkungsquerschnitt

Überblick

Wirkungsquerschnitt

Wirkungsquerschnitte Umrechnen

Streuwinkel

Bezugssysteme

Compton-Effekt

Schwerpunktsystem

Winkelelement

Wirkungsquerschnitt

Stromdichte

Symmetriecharakter

Symmetrische Wellenfunktion

Symmetrischer rechteckiger Potentialtopf

Symmetrisierungspostulat

Synchrotron

S_z -Operator

s-Zustand

T

Teilchen

Totaler Wirkungsquerschnitt

Trägheitsmoment

Transmissionskoeffizient

Tunneleffekt

U

Uhlenbeck, George E.

Ultraviolett-Katastrophe

Unendliche rechteckige Potentialtöpfe

Berechnung der Wellenfunktionen
Energieniveaus
Normierung der Wellenfunktionen
Symmetrische Töpfe
Teilchen einfangen
Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen
Ungestörte Energie
Ungestörtes System
Unitäre Operatoren
Unschäferelation
Unschärferelation
Unterschalen
Unterscheidbare Teilchen

V

Vektor
als Ket
Basisfrei
im Hilbertraum
Ortsvektor
Schrödingers Gleichung
von Wahrscheinlichkeiten
Vernichtungsoperator
Verteilung

Normalverteilung
Viel-Teilchen-System
Vielteilchensysteme
Antisymmetrie
Antisymmetrische Wellenfunktionen
Austausch-Entartung
Austausch-Operator
Austausch-Symmetrie
Gesamtenergie
Gleichbleibender Hamiltonoperator
Identische nicht-wechselwirkende Teilchen
Identitätsverlust
Pauliprinzip
Periodensystem
Symmetrie
Symmetrische Wellenfunktionen
Überblick
Wellenfunktion
Zweiteilchensystem

W

Wahrscheinlichkeit
Wahrscheinlichkeitsamplitude
Wahrscheinlichkeitsdichte
Wasserstoffatom

Elektron im
Energie-Entartung
Erlaubte Energien
Orbitale
Proton im
Quantenzustände
Radiale Schrödinger-Gleichung
Schrödinger-Gleichung
Schwerpunkt
Spin
Wasserstoff-Wellenfunktionen
Welle
Wellenfunktion
Antisymmetrisch
Bornsche Näherung
eines oszillierenden Protons
eines Zustandsvektors
Elektronenspin
Geladener Oszillator
Grundzustand
Hamilton-Operator
in Kugelkoordinaten
Intensität
Normalisierung

Radialteil

Störungstheorie

Symmetrisch

Vielteilchensystem

Vielteilchensysteme

Wasserstoffatom

Wellenfunktion

Würfelpotential

Zeitabhängigkeit

Zeitunabhängig

Zweiteilchensystem

Wellenfunktionen

Vielteilchensystem

Wellenlänge

Wellenlängenshift

Wellenmechanik

Wellenpaket

Wellenvektor

Welle-Teilchen-Dualismus

Wentzel-Kramers-Brillouin-Methode

Wien, Wilhelm

Wiensches Verschiebungsgesetz

Würfel

Würfelförmiges Potential

Energie des Grundzustands

Energieentartung

Wellenfunktion

Würfeloperator

Z

Zeilenvektor

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

Zeitabhängigkeit

Zentralpotential

Definition

Radialer Teil der Wellenfunktion

Schrödinger-Gleichung

Zielscheiben-Analogie

Zusammengesetzte Teilchen

Zustand

Zustandsgleichung

$\beta_{\max}$

$\beta_{\min}$

Drehimpuls

Zustandsvektor

Adjungierte

Anti-hermitesche Operatoren

Basislos

Bra-Hermiteische Operatoren

Bra-Vektor

Dirac-Schreibweise

Eigenvektoren

Eigenwerte

Erwartungswert

im Hilbert-Raum

Ket-Vektor

Kommutator

Komplex konjugierte als Bra-Vektor

kontinuierliche Darstellung

Lineare Vektoren

Matrixdarstellung

Multiplikation von Bras und Kets

Operatoren

Schwarzsche Ungleichung

Unitäre Operatoren

Unschärferelation

Wellenfunktion

Zweiatomiges Molekül

Rotationsenergie

ZweiteilchenSysteme

Zweiter angeregter Zustand

