

Physik IV (Atomphysik)

Vorlesung SS 2003

Prof. Ch. Berger

Zusammenfassung

Das Skript gibt eine gedrängte Zusammenfassung meiner Vorlesung an der RWTH Aachen im SS 2003. Verglichen mit vielen, auch neueren Lehrbüchern wird versucht, alte Zöpfe abzuschneiden. Sie werden also keine Diskussion des Bohrschen Atom-Modells finden, die Behandlung des Zeeman-Effekts ist auf das nötigste zusammengedrängt, der Stark-Effekt fehlt, etc.etc. Bitte weisen Sie eventuell Ihre Prüfer im Vordiplom darauf hin.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Atome und Kerne	5
2.1	Die atomare Struktur der Materie	5
2.1.1	Daltons chemische Gesetze	5
2.1.2	Gasgesetze	6
2.2	Elektronen	7
2.2.1	Nachweis von freien Elektronen	7
2.2.2	Ladung und Masse des Elektrons	9
2.2.3	Der Radius des Elektrons	10
2.3	Bestimmung der Atommassen	12
2.3.1	Massenspektrometer	12
2.3.2	Ionenfallen	18
2.4	Radien der Atome	22
2.5	Atomkerne	27
2.5.1	Radien der Atomkerne	27
2.5.2	Massen und Bindungsenergien	29
3	Welle und Teilchen	32
3.1	Photonen	32
3.1.1	Röntgenstrahlung	32
3.1.2	Photoeffekt	36
3.1.3	Compton Effekt	37
3.1.4	Photonen und Gravitation	38
3.2	Materiewellen	40
3.2.1	Elektronenbeugung	40
3.2.2	Die Heisenbergschen Unschärferelationen	41
3.2.3	Prinzipien der Quantenmechanik	44
3.2.4	Die Schrödingergleichung	46
3.2.5	Eigenwerte und Eigenfunktionen	48

4	Atombau und Spektrallinien I, das <i>H</i>-Atom	53
4.1	Linienpektren der Atome	53
4.2	Das Elektron im Coulombfeld	55
4.3	Spin und magnetisches Moment des Elektrons	60
4.4	Die Feinstruktur	64
4.5	Die Lambshift	67
4.6	Die Hyperfeinstruktur	71
5	Atombau und Spektrallinien II, Atome mit mehreren Elektronen	75
5.1	Die Alkali-Atome	75
5.2	Das Helium	77
5.2.1	Das Termschema	77
5.2.2	Das Pauli-Prinzip	79
5.2.3	Anschauliche Bedeutung des Pauli-Prinzips	80
5.2.4	Konstruktion der Wellenfunktionen	81
5.2.5	Die niedrigsten Helium-Zustände	83
5.3	Das Periodensystem der Elemente	85
5.4	Atome im Magnetfeld	89
6	Strahlungsprozesse	94
6.1	Auswahlregeln	94
6.2	Die Linienform	96
6.3	Der schwarze Strahler	98
6.3.1	Strahlung fester Körper und Hohlraumstrahlung	98
6.3.2	Atome im Strahlungsfeld	99
6.3.3	Das Strahlungsgesetz von Planck	100
6.3.4	Die Einstein Koeffizienten	104
6.4	Der Drei-Niveau-Laser	104

1 Einleitung

Leitbild der exakten Naturwissenschaften ist der Reduktionismus, d.h. die Zurückführung komplexer Sachverhalte auf wenige Prinzipien. Eines der besten Beispiele: die Chemie hat erkannt, daß die ungeheure Fülle der Stoffe aus 92 Elementen aufgebaut ist. Der Atomismus ist ein weiteres Paradebeispiel des Reduktionismus. Er ist die vielleicht wichtigste wissenschaftliche Erkenntnis überhaupt. Jede Probe eines Elements besteht aus einer Ansammlung identischer kleiner Teilchen, die mit chemischen Mitteln nicht verändert werden können. Diese *Atome* bauen die Verbindungen auf.

Von hier aus gibt es zwei Wege der Physik:

1. Der Weg nach außen. Verbindungen der Chemie (Molekülphysik), \rightarrow Cluster \rightarrow Aggregatzuständen der Materie (Gase, Flüssigkeiten, Festkörper) \rightarrow Planeten, Sterne \rightarrow Galaxien (Gas von Sternen) \rightarrow Kosmos (Gas von Galaxien).
2. Der Weg nach innen: Es sind weitere Ebenen des Atomismus gefunden worden.
 - Radien und Anregungszustände der Atome zeigen, daß diese nicht wirklich elementar sind. Atome bestehen aus dem Kern und einer Hülle von Elektronen. Die Elektronen sind nach heutigem Wissen punktförmig. Sie tragen eine negative Elementarladung e . Je nach der Ordnungszahl Z des Elements im Periodensystem besteht die Hülle aus Z Elektronen. Der Kern hat eine positive Ladung Ze .
 - Radien und Anregungszustände der Kerne zeigen, daß auch sie zusammengesetzt sind. Die Kernbausteine (Nukleonen) sind das Proton (p) und das Neutron (n). Das Proton trägt eine positive Elementarladung e , das Neutron ist neutral.
 - Radien und Anregungszustände der Nukleonen zeigen, daß auch sie zusammengesetzt sind. Die Bausteine sind die Quarks u, d . Die Ladung ist drittelzahlig, $Q_u = 2/3e$, $Q_d = -1/3e$ und es gilt $p = uud$, $n = udd$. Von zusammengesetzten Systemen wird erwartet, daß sie sich in die Einzelteile zerlegen lassen. Dies ist bei Atomen und Kernen auch der Fall. Die Nukleonen lassen sich aber nicht in die einzelnen Quarks zerlegen

Jedes Teilgebiet der Physik hat ein besonders angepaßtes Maßsystem. Die Energieeinheit der Atomphysik ist das eV. Ein Teilchen mit einer Elementarladung e gewinnt beim Durchlaufen eines Feldes mit einer Potentialdifferenz von 1 V die Energie

$$\Delta W = 1\text{eV} = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{Ws} \quad (1)$$

Anstelle von Massen benutzen wir die Ruheenergien

$$W_0 = mc^2 \quad (2)$$

mit $c = 2.9979 \cdot 10^8$ m/s, (Phasengeschwindigkeit des Lichts). Anstelle der Elementarladung $e = 1.6022 \cdot 10^{-19}$ C benutzen wir möglichst die dimensionslose Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.04} \quad (3)$$

mit der elektrischen Feldkonstanten ε_0 und

$$\hbar c = 197.33 \text{ eVnm} \quad (4)$$

worin \hbar über $\hbar = h/2\pi$ mit der Planckschen Konstanten h verknüpft ist¹.

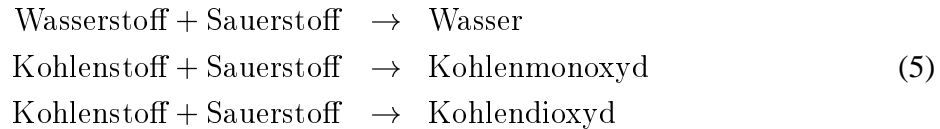
¹Wir geben hier Konstanten mit einer Genauigkeit von 5 Stellen an, um die Lesbarkeit des Textes zu erhöhen. Genauere Werte finden sich z.B. im Internet http://pdg.web.cern.ch/pdg/2002/contents_sports.html Zur Nomenklatur: Vektoren werden mit fetten Buchstaben gekennzeichnet, ihre Beträge aber mit normalen Buchstaben

2 Atome und Kerne

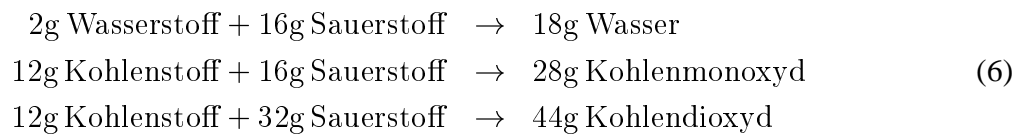
2.1 Die atomare Struktur der Materie

2.1.1 Daltons chemische Gesetze

Chemische Reaktionen verlaufen in festen Massenverhältnissen ab. Beispiele:



Links stehen Elemente, d.h. Stoffe, die sich chemisch nicht weiter zerlegen lassen, rechts Verbindungen, hier Oxyde. Für die Massenumsätze gilt mit einer Genauigkeit von einigen Promille:



Einfache Erklärung dieser Tatsachen durch Zusammensetzung harter „Bälle“, der Atome.



Da Wasserstoff- und Sauerstoffatome Moleküle bilden (H_2 , O_2), schreiben die Chemiker diese Gleichungen ein wenig anders, z.B.



Durch die chemischen Massenverhältnisse wird die relative Atommasse (Molekülmasse) definiert,

$$M_r = \frac{M_{\text{Atom}}}{M_{\text{H}}} . \quad (9)$$

Damit wird $M_r(\text{H}) = 1$, es gibt kein leichteres Element. Moderne Bestimmungen von M_r nehmen als Bezug 1/12 der Masse des ^{12}C Isotops (s.u.). Damit wird $M_r(\text{H}) \neq 1$.

Im Periodensystem der Elemente wächst M_r kontinuierlich an. Schon sehr früh ist M_r nicht mehr durch ganze Zahlen gegeben. Die Atomtheorie besagt, daß in M_r kg eines Elementes oder einer Verbindung die gleiche Anzahl Atome oder Moleküle enthalten ist. Daher Definition der Stoffmenge ν (Einheit kmol)

$$\nu = \frac{m}{M_r} \frac{\text{kmol}}{\text{kg}} . \quad (10)$$

Bei Benutzung der Masseneinheit kg hat ν also die Einheit kmol. Die Anzahl der Atome in einer Stoffprobe ist dann durch

$$N = N_A \nu \quad (11)$$

gegeben, wodurch die zentrale Konstante der Atomphysik die Avogadrokonstante N_A definiert ist. Die Atomtheorie überzeugt nur, wenn verschiedene Meßverfahren den gleichen Wert für N_A ergeben. Das ist nur noch historisch interessant. Mit Massenspektrometern (s.u.) kann man sehr genaue absolute Atommassen oder Ruheenergien bestimmen, die als Vielfache der atomaren Masseneinheit

$$u = 1.6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (12)$$

bzw.

$$uc^2 = 931.49 \text{ MeV} \quad (13)$$

angegeben werden. Mit $m = N M_r u$ folgt daher

$$N_A = \frac{1 \text{ kg}}{u \text{ kmol}} = 6.0221 \cdot 10^{26} \text{ kmol}^{-1} . \quad (14)$$

2.1.2 Gasgesetze

Der Zusammenhang zwischen Druck p und Volumen V ist bei sog. idealen Gasen (Edelgase) durch

$$pV = \nu RT \quad (15)$$

gegeben. Hierin ist T die absolute Temperatur (Einheit Kelvin, K). Diese ist durch

$$T = T_n + \vartheta \frac{\text{K}}{^\circ\text{C}} \quad (16)$$

an die Celsius-Temperatur ϑ angebunden. Die Normtemperatur T_n beträgt 273.15 K. Die allgemeine Gaskonstante wurde zu $R = 8314.5 \text{ WsK}^{-1} \text{ kmol}^{-1}$ gemessen. Normaldruck (Normdruck) $p_n = 1.0133 \cdot 10^5 \text{ Pa}$. Das Gasgesetz besagt, daß das molare Volumen V_m eines Gases und daher die Anzahl der Atome in einem Gasvolumen bei konstantem p und T nicht von der Atomsorte abhängt. Das Normvolumen V_n ist gleich dem Molvolumen V_m bei Normalbedingungen, $V_n = 22.414 \text{ m}^3 \text{ kmol}^{-1}$.

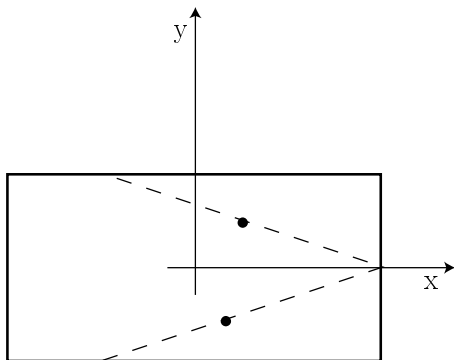


Abbildung 1: Zur Ableitung des Gasgesetzes.

Die kinetische Gastheorie erklärt (15). In einem Volumen V haben die Atome der Masse m die Geschwindigkeitskomponente v_x auf die rechte Wand der Abb. 1. Für den einzelnen Kraftstoß $\int F dt$ gilt angenähert

$$F_x \Delta t = m \Delta v_x . \quad (17)$$

Bei der Reflexion an der Wand gilt $\Delta v_x = 2v_x$ und mit $\Delta t = 2l/v_x$ folgt

$$F_x = \frac{2mv_x}{\Delta t} \quad (18)$$

also für den allseitig gleichen Druck p

$$p = p_x = N \frac{m}{V} v_x^2 \quad (19)$$

Im statistischen Mittel gilt $\overline{v_x^2} = \overline{v^2}/3$, also

$$pV = \frac{2}{3} N \overline{W}_{\text{kin}} \quad (20)$$

Hiermit wird klar, daß die Wärmeenergie Q durch die kinetische Energie der Atome festgelegt wird (in einem Gas aus harten Kugeln). Für jede Änderung der Wärmeenergie folgt

$$\Delta Q = N \Delta \overline{W}_{\text{kin}} \quad (21)$$

Mit $N = N_A \nu$ folgt schließlich

$$pV = NkT = \nu RT \quad (22)$$

und

$$\overline{W}_{\text{kin}} = \frac{3}{2} kT \quad (23)$$

worin $k = R/N_A$ die Boltzmannkonstante (mit dem Zahlenwert $1.3806 \cdot 10^{-23} \text{ WsK}^{-1}$ bzw. $8.6173 \cdot 10^{-5} \text{ eVK}^{-1}$) ist. Die Gleichung (23) enthält die allgemeinste Definition der Temperatur unabhängig vom Aggregatzustand des Stoffes.

2.2 Elektronen

2.2.1 Nachweis von freien Elektronen

Der Zusammenhang von Elektromagnetismus und Atomaufbau war schon früh klar. In der Elektrolyse werden Verbindungen in Elemente zerlegt, z.B. wird beim Durchleiten von Strom durch eine Salzlösung (NaCl) an der Kathode (– Pol) Natrium und an der Anode (+ Pol) Chlor abgeschieden. Beim Durchleiten von Strom durch Gase (Gasentladungen) werden Atome ionisiert, d.h. es werden Strahlen („Kanalstrahlen“) positiv geladener Atome hergestellt, die durch ein Loch in der Kathode in den Experimentierraum gelangen.

Erklärung dieser Effekte durch Theorie des Atomaufbaus. Atome bestehen aus einem Kern und der Elektronenhülle. Das Elektron trägt die negative Elementarladung e . Der Kern des Wasserstoffatoms ist das Proton (p). Bei der Ionenbindung (z.B. NaCl) gibt das Natrium ein Elektron an das Chlor Atom ab, es wird zum Na^+ -Ion, das Cl zum Cl^- -Ion. Bindung aufgrund der elektrischen Anziehung. In der Elektrolyse wird diese Bindung aufgebrochen. Aus der Atomtheorie folgt das Grundgesetz der Elektrolyse: Zum Abscheiden einer bestimmten Stoffmenge ist immer die gleiche Elektrizitätsmenge nötig (Faraday). Für einfach geladene Ionen gilt

$$Q_F = N_A e \quad (24)$$

mit $Q_F = 9.6485 \cdot 10^7 \text{ C kmol}^{-1}$. Damit folgt

$$e = \frac{Q_F}{N_A} = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (25)$$

Der direkte Nachweis des Elektrons gelingt durch die Kathodenstrahlen (Abb. 2) der Gasentladung (Loch in der Anode). Die Ablenkung dieser Strahlen in elektrischen und magnetischen Feldern (Abschnitt 2.3) beweist die negative Ladung und zeigt, daß die spezifische Ladung e/m das 1836-fache des Wertes für Protonen beträgt.

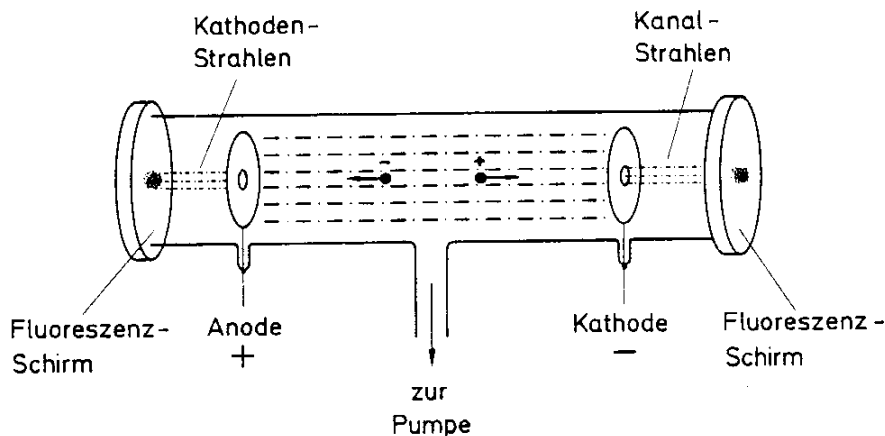


Abbildung 2: Gasentladungsröhre zur Erzeugung von Kathoden- und Kanalstrahlen. Zwischen Anode und Kathode liegt eine Spannung von einigen 1000 Volt. Die im Rohr auftretenden Leuchterscheinungen und die Ausbildung von Kathoden- und Kanalstrahlen hängen stark vom Druck ab. Im feldfreien Raum zwischen Kathode und Fluoreszenzschirm sieht man den Kanalstrahl, der aus positiven Ionen besteht. In dieser Weise erzeugte Kanal- und Kathodenstrahlen waren in der Frühzeit der Atomphysik von besonderer Bedeutung für die Untersuchung von Ladung, Masse und Streuquerschnitt von Elektronen und Ionen. Abb. entnommen aus Haken, Wolf Atom und Quantenphysik.

Sehr einfach lassen sich freie Elektronen durch Glühen eines Metalldrahtes herstellen (wird millionenfach in den Kathodenstrahlröhren der Fernsehgeräte und Oszillographen benutzt). In einem Metall gibt es mindestens ein freies Elektron/Atom, es existiert also eine Elektronengas mit einer Dichte

$$n_e = \frac{N_e}{V} = \frac{N_A \varrho \text{ kmol}}{M_r \text{ kg}} \quad (26)$$

Für Kupfer ergibt sich z.B. $0.85 \cdot 10^{29} \text{ m}^{-3}$, also etwa 3000mal mehr als bei einem idealen Gas unter Normalbedingungen.

Der Nachweis der korpuskularen Natur der Elektronen kann z.B. durch Zählen in einem Geigerzählrohr (Abb. 3) erfolgen. Es besteht aus einem gasgefüllten Metallrohr, zwischen dessen isolierenden Endkappen auf der Mittelachse des Rohres ein dünner Draht gespannt ist. Zwischen Draht und Metallwand wird eine Spannung U_0 angelegt, so daß der Draht als Anode und das Rohr als Kathode wirkt.

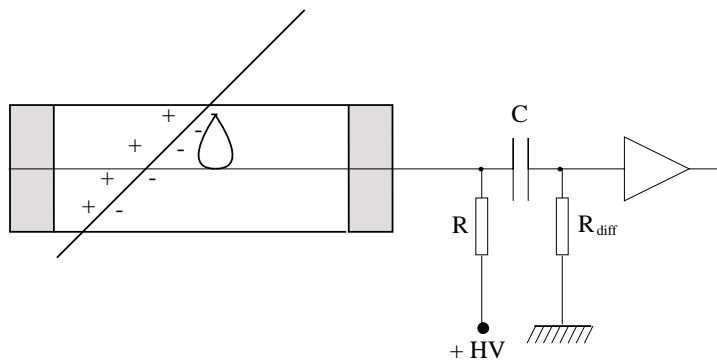


Abbildung 3: Prinzip eines Proportionalzählrohrs. Von den primär erzeugten Elektronen breiten sich tropfenförmige Elektronenlawinen aus.

Ionisierende Strahlung, die von außen in das Zählrohr eindringt, bewirkt im Zählgas (meist Argon) die Bildung von Elektron-Ionen-Paaren. Die Ionen driften zur Kathode, die Elektronen zur Anode. Das elektrische Feld in diesem Zählrohr steigt in Richtung zur Achse gemäß

$$E(r) = \frac{U_0}{r \ln r_a/r_i} \quad (27)$$

an, wobei r_a der Radius des Rohres, r_i der Radius des Drahtes und r der Abstand eines Teilchens von der Mittelachse ist. In der Nähe eines dünnen Drahtes können daher die primär erzeugten Elektronen so beschleunigt werden, daß ihre kinetische Energie zur Bildung neuer Elektron-Ionen-Paare ausreicht. Die Durchrechnung des Problems zeigt, daß die Zahl der auf diese Art erzeugten Sekundärelektronen exponentiell ansteigt, es entsteht in unmittelbarer Nähe des Drahtes ($\approx 20\mu\text{m}$) eine Lawine aus Elektron-Ionen-Paaren. Dieser Mechanismus wird als Gasverstärkung bezeichnet. Sie läßt sich durch die geeignete Wahl von U_0 so einstellen, daß die Anzahl der sekundären Ladungen proportional zur Zahl der durch das einfallende Teilchen primär erzeugten Elektron-Ionen-Paare bleibt. Diese Eigenschaft ist besonders wichtig, wenn der Energieverlust der einfallenden Teilchen im Zählgas gemessen werden soll.

Da die Spannung U_0 über einen Ladewiderstand angeschlossen wird, erzeugt der Strom im Zählrohr einen Spannungsabfall am Widerstand, der über einen Verstärker an die nachfolgende Ausleselektronik weitergeleitet wird. Ein Elektron bewegt sich im Feld des Zählrohrs aufgrund seiner höheren Driftgeschwindigkeit etwa tausendmal schneller als ein Ion. Mit $r_a = 1\text{ cm}$ und einer Driftgeschwindigkeit von $5\text{ cm}/\mu\text{s}$ dauert das gesamte von den Elektronen erzeugte Signal etwa 200 ns . Die Anstiegszeit ist noch wesentlich geringer. Das Signal wird mit dem Differenzglied aus Kondensator und Widerstand R_{diff} (Abb. 3), dessen Zeitkonstante der Anstiegszeit angepaßt ist, von dem viel langsameren Ionensignal abgetrennt. Das Prinzip des Geiger-Zählers wird in verschiedenen Varianten in modernen Detektoren verwendet. Es ist vor allem gelungen, viele Drähte in einem einzigen Gasvolumen gleichzeitig zu betreiben.

2.2.2 Ladung und Masse des Elektrons

Aus der Ableitung von (25) geht nicht hervor, daß diese Ladung quantisiert ist, d.h. daß jede Ladung nur in Vielfachen dieser Einheit auftreten kann. Dieser Beweis wurde im Millikanschen Öltropfenversuch (1913) geführt. Das Prinzip ist in Abb. 4 gezeigt, die technische

Durchführung in Abb. 5. Beim Erzeugen der Öltröpfchen werden diese aufgeladen (Reibung), die Ladung kann durch Bestrahlen mit Röntgenstrahlen geändert werden. Im Kondensator wirken Gravitationskraft, elektrische Kraft und geschwindigkeitsabhängige Reibung (Gesetz von Stokes, Viskosität η), also

$$F_y = -mg + qE - 6\pi a\eta v_E \quad (28)$$

Beobachtet wird die konstante Steig-oder Sinkgeschwindigkeit bei Kräftegleichgewicht ($F_y = 0$). Der Radius a der Tröpfchen wird in einem Vorversuch aus der Sinkgeschwindigkeit v_S ohne Feld ermittelt,

$$\frac{4\pi}{3}\rho a^3 g = 6\pi a\eta v_S \quad (29)$$

Das Ergebnis des Versuchs war, daß alle gemessenen Ladungen nur als ganzzahlige ($n = 1, 2, 3, \dots$) Vielfache von e auftraten, $q = ne$. Moderne Varianten haben erfolglos versucht, freie drittelzahlige Ladungen (Quarks) nachzuweisen.

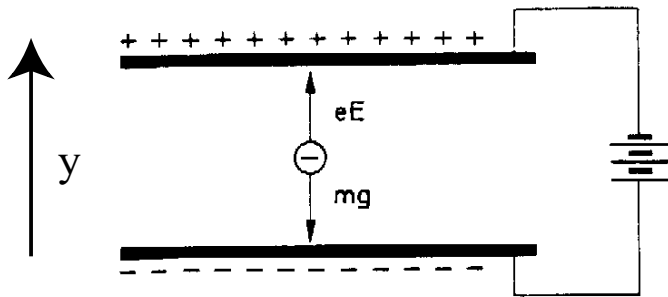


Abbildung 4: Prinzip des Versuchs von Millikan (aus Haken, Wolf).

Im nächsten Abschnitt werden Verfahren diskutiert, die Massen von Atomen zu messen. Mit diesen Apparaten wurde auch die Masse der Elektronen zu $9.1094 \cdot 10^{-31}$ kg bzw.

$$W_{0,e} = 0.51100\text{MeV} \quad (30)$$

bestimmt.

2.2.3 Der Radius des Elektrons

Besonders interessant ist die Frage nach dem Radius des Elektrons. Streuversuche ähnlich zu denen, die bei der Bestimmung der Kernradien benutzt werden (Abschn. 2.5.1), führen nur zu oberen Grenzen $r_e < 10^{-18}$ m. Das Elektron ist also elementar im Sinne der Definition Euklids „Ein Punkt ist, was keine Teile hat“. In der klassischen Physik bedeutet ein Radius $< 10^{-15}$ m ein ernstes Problem. Die Energiedichte ρ_E des elektrischen Feldes einer Punktladung ist durch

$$\rho_E = \frac{\alpha \hbar c}{4\pi r^4} \quad (31)$$

gegeben. Die Integration von einem minimalen Radius r_{\min} bis ∞ ergibt für die im Feld gespeicherte Energie

$$W_E = \frac{\alpha \hbar c}{r_{\min}} \quad (32)$$

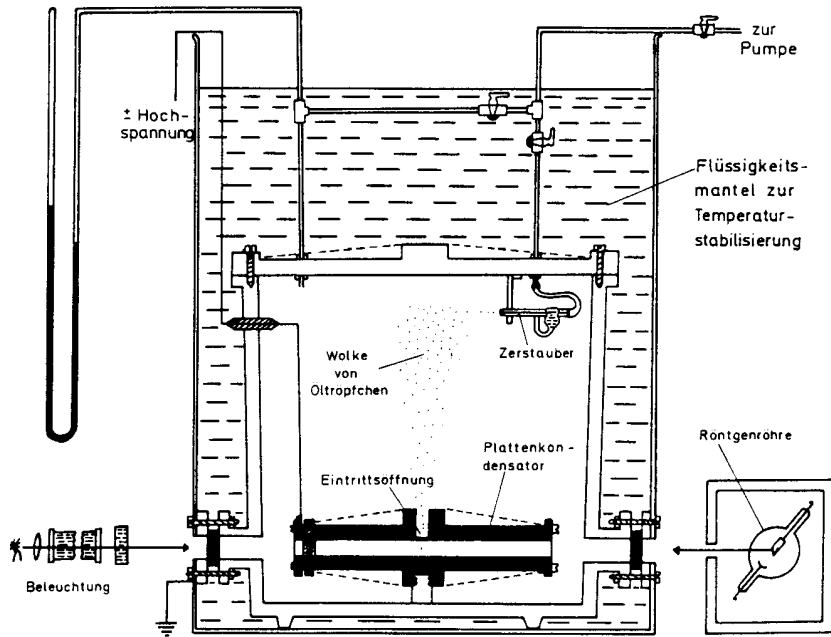


Abbildung 5: Versuchsaufbau von Millikan (aus Haken, Wolf) .

Gleichsetzung mit der Ruheenergie des Elektrons liefert den sog. klassischen Elektronenradius

$$r_e = \frac{\alpha \hbar c}{W_{0,e}} \quad (33)$$

mit dem Zahlenwert $2.8179 \cdot 10^{-15}$ m. Umgekehrt gehört zu einem Radius von 10^{-18} m also eine Ruheenergie von 0.5 GeV !

Die Anwendung solcher Rechnungen ist aber im Mikrokosmos, wo die Gesetze der Quantenmechanik herrschen, verboten. Eigentlich wird dieses Problem erst im Rahmen der Quantenfeldtheorie gelöst. Diese mildert die lineare Divergenz der Feldenergie

$$W_E = W_{0,e} \frac{r_e}{r_{\min}} \quad (34)$$

zu einer logarithmischen

$$W_E = W_{0,e} \left(1 + \frac{3\alpha}{2\pi} \ln \frac{r_0}{r_{\min}} \right) \quad (35)$$

mit $r_0 = \hbar c / W_{0,e}$ ab. Die beobachtete Größe ist die Ruhemasse $W_{0,e}$, die nicht von dem „cutoff Radius“ r_{\min} abhängen darf. Daher renormieren wir die letzte Gleichung zu

$$W_{0,e} = W_0 \left(1 + \frac{3\alpha}{2\pi} \ln \frac{r_0}{r_{\min}} \right) , \quad (36)$$

worin W_0 ein unbeobachtbarer Parameter ist, der sich in der hier gezeigten Näherung mit dem jeweils gemessenen Wert von r_{\min} ändert.

2.3 Bestimmung der Atommassen

2.3.1 Massenspektrometer

Zur absoluten (und relativen) Bestimmung von Atommassen dienen Massenspektrometer. In ihnen wird die Bahn von Ionen in elektrischen und magnetischen Feldern gemessen. Die Masse des Atoms ergibt sich dann aus

$$M_{\text{Atom}} = M_{\text{Ion}} + m_e - W_B/c^2 \quad (37)$$

Die Korrektur auf die Bindungsenergie W_B des äußeren Elektrons ist vernachlässigbar klein (vergl. 10 eV mit einigen GeV).

Ionen lassen sich einfach in einer Gasentladung herstellen. In einem Magnetfeld B beschreibt ein geladenes Teilchen, das senkrecht zu den Feldlinien eintritt, aufgrund der Lorentzkraft $F_L = qvB$ wegen

$$\frac{mv^2}{R} = qvB \quad (38)$$

einen Kreis mit dem Radius

$$R = \frac{mv}{qB} = \frac{p}{qB} . \quad (39)$$

(Die letzte Umformung bleibt auch für relativistische Teilchen gültig.) Bei Kenntnis von v kann also m , oder besser e/m bestimmt werden. Zur Messung von v werden elektrische Felder benutzt. Dort ist die Ablenkung umgekehrt proportional zur kinetischen Energie $mv^2/2$. Ein einfaches Geschwindigkeitsfilter kann aus gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern gebaut werden (Abb. 6. Der Ionenstrahl fliegt ohne Ablenkung durch, falls $F_{\text{el}} = F_{\text{magn}}$ gilt, also für

$$v = \frac{E}{B} . \quad (40)$$

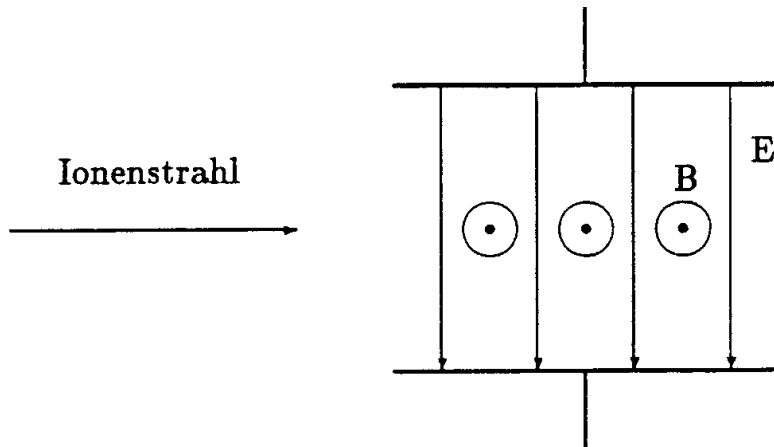


Abbildung 6: Prinzip eines Geschwindigkeitsfilters.

Zur Erzielung einer hohen Genauigkeit und (kurzer Messzeit) müssen alle von einer punktförmigen Quelle (Spalt) mit gleicher Geschwindigkeit ausgehenden Ionen in einen Punkt abgebildet werden (Richtungsfokussierung). In einer Koordinate ist dies durch Sektormagnete

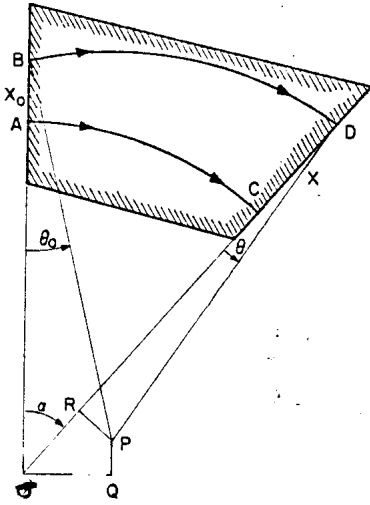


Abbildung 7: Prinzip des Sektormagneten. (Aus S. Penner, Rev. of Sc. Instruments 32)

möglich (Abb. 7). Die senkrecht ein- und austretenden Strahlen definieren eine Sollbahn mit dem Radius (39). In einem mitbewegten Koordinatensystem (z -Koordinate entlang der Bahn) gilt bei Vernachlässigung von Termen 2. Ordnung

$$x = x_0 \cos \alpha + x'_0 R \sin \alpha \quad (41)$$

wobei x_0, x'_0 Ort und Steigung der Teilchenbahn am Eintritt in den Magneten sind. Wenn man noch die Gleichung für x' mitnimmt läßt sich das Ergebnis in der Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} x \\ x' \end{pmatrix} = M_S \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \quad (42)$$

anschreiben, wobei die Matrix M_S für einen Sektormagneten durch

$$M_S = \begin{pmatrix} \cos \alpha & R \sin \alpha \\ \frac{-\sin \alpha}{R} & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (43)$$

gegeben ist.

Diese Beziehung kann man entweder durch geometrische Konstruktion unter Benutzung der Abb. 7 oder dynamisch beweisen. Wir skizzieren kurz den zweiten Weg. In der Bahnebene lautet die Bewegungsgleichung in Polarkoordinaten (Abb. 8)

$$m\ddot{r} - mr\dot{\theta}^2 = eB_0 r \dot{\theta} \quad (44)$$

für ein positiv geladenes Teilchen in einem homogenen Feld der Stärke B_0 entlang der Y -Achse. Die Geschwindigkeit $v = r\dot{\theta}$ ist konstant und kann durch den Wert $v = \omega R$ auf der Sollbahn ersetzt werden. Damit erhalten wir

$$m\ddot{r} - m \frac{\omega^2 R^2}{r} = eB_0 \omega R . \quad (45)$$

Auf der Sollbahn gilt $\ddot{r} = 0$ und deshalb $\omega = -eB_0/m$. Dies entspricht (38), wenn man beachtet, daß es dort nur auf die Beträge ankam. Damit kann nun eB_0 auf der rechten Seite der

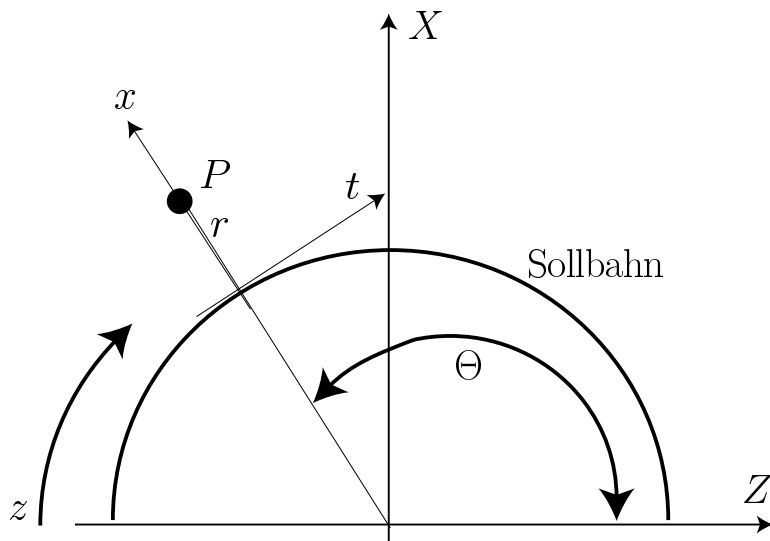


Abbildung 8: Die Koordinatensysteme zur Diskussion der Bahngleichung (47).

letzten Gleichung ersetzt werden. In einem auf der Sollbahn mitbewegten Koordinatensystem (x, t) setzen wir noch $r = R + x$ an und erhalten mit $x \ll R$

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (46)$$

und schließlich mit $v = z/t$ und $x' = dx/dz$ die Bahngleichung

$$x'' + \frac{1}{R^2} x = 0 \quad (47)$$

Diese Gleichung, die ebenfalls in der relativistischen Rechnung gültig bleibt, hat (43) mit $\alpha = z/R$ als Lösung.

Bei einem 180° -Magneten reduziert sich diese Matrix auf

$$M_{180} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (48)$$

d.h. er wirkt fokussierend, da der Ort am Austritt nicht vom Winkel am Eintritt abhängt. Die Kombination eines Geschwindigkeitsfilters mit einem 180° -Magneten ergibt das Massenspektrometer von Bainbridge.

Eine andere beliebte Spektrometerform ist das in Abb. 9 gezeigte 60° -Spektrometer. In der gezeigten symmetrischen Kombination mit 2 freien Strecken $a = R\sqrt{3}$ ist es fokussierend. Zum Beweis multipliziert man (43) von rechts und links mit der Matrix

$$M_L = \begin{pmatrix} 1 & L \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (49)$$

einer freien Strecke L und zeigt, daß das Element M_{12} verschwindet.

Das Massenspektrometer von Aston (Abb. 10) ist geschwindigkeitsfokussierend. Ionen gleicher Masse aber verschiedener Geschwindigkeit werden auf einen Punkt (Linie) fokussiert. Das

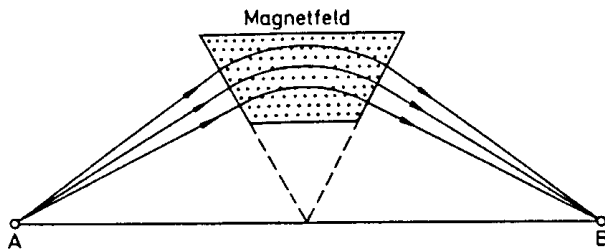


Abbildung 9: Ein 60° -Sektormagnet in symmetrischer Anordnung. Abb. aus Haken, Wolf Atom- und Quantenphysik.

Spektrometer besteht aus einem Zylinderkondensator (el. Feld) und einem Sektormagneten. Die theoretische Behandlung ist verwickelt, aber die prinzipielle Idee ist klar. Der Ablenkwinkel im Kondensator ist $\sim 1/W_{\text{kin}}$, während der Ablenkwinkel im Magneten $\sim 1/p$ ist. Es findet also in der gezeigten Anordnung eine Kompensation statt. Moderne Spektrometer benutzen eine Kombination von Geschwindigkeits- und Richtungsfokussierung. Es sind ionenoptisch komplizierte Geräte.

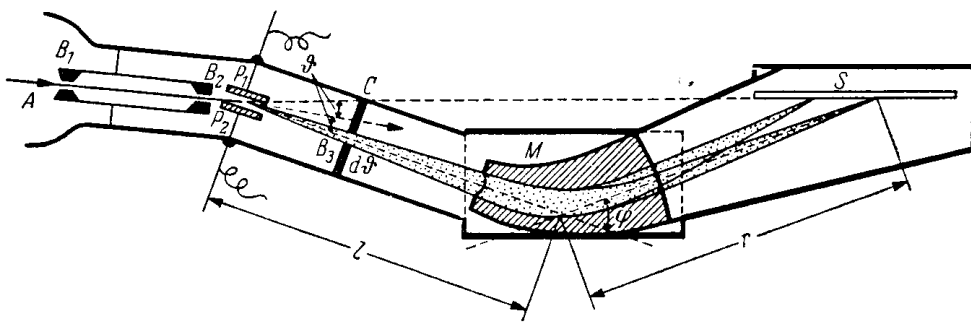


Abbildung 10: Das Astonsche Massenspektrometer. (Abb. aus Schpolski, Atomphysik).

Die magnetische Fokussierung in einem Sektorfeld ist relativ schwach. Die sog. starke Fokussierung beruht auf der Verwendung von Gradientenfeldern. Als Beispiel behandeln wird den magnetischen Quadrupol. Das Feld wird zwischen den vier Polen eines Eisenmagneten mit hyperbelförmiger Oberfläche der Pole (Abb. 11) erzeugt. Da bei nicht zu großen Feldstärken die Oberfläche des Eisens eine magnetische Äquipotentialfläche darstellt, steigen die Feldkomponenten in x - und y -Richtung linear mit einem Gradienten g an,

$$\begin{aligned} B_x &= gy \\ B_y &= gx \end{aligned} \quad (50)$$

während das Feld in z -Richtung verschwindet, $B_z = 0$; Teilchen auf der Strahlachse (der z -Achse der Abb. 11) sehen also kein Magnetfeld.

Um die fokussierende Wirkung dieses Feldes zu beweisen, betrachten wir die Bahn eines Teilchens in der xz -Ebene (Abb. 12). Die x -Komponente der Lorentz-Kraft $\mathbf{F} = e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ ist

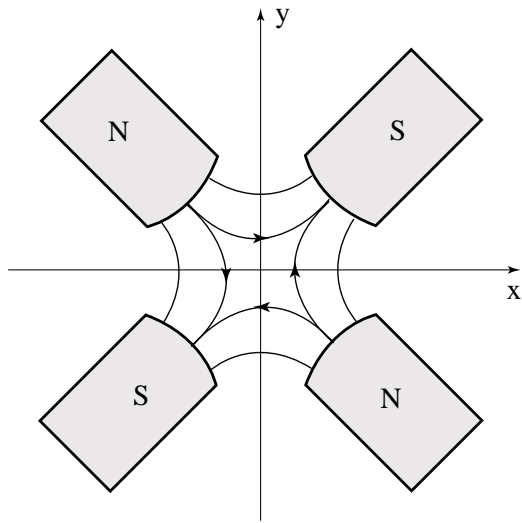


Abbildung 11: Ansicht eines Quadrupols aus Eisen mit einer Skizze seiner Feldverteilung. Die Polung ist so gewählt, daß g in (50) positiv wird.

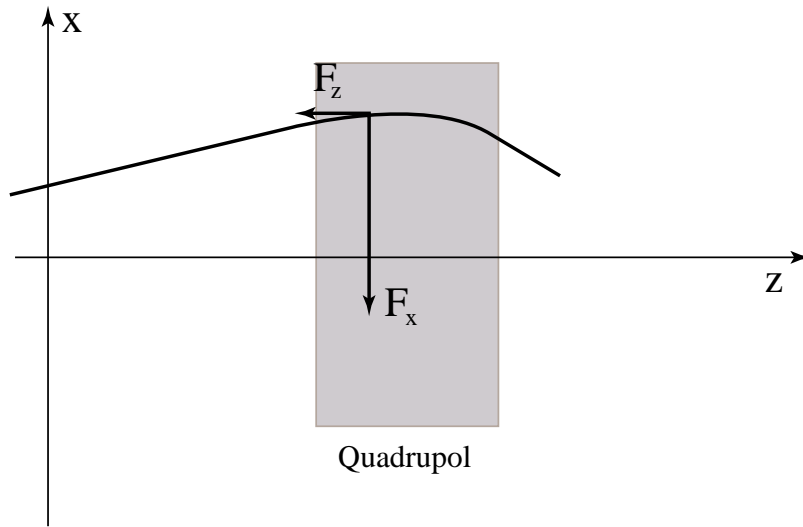


Abbildung 12: Wirkung des Quadrupolfeldes auf ein geladenes Teilchen.

durch

$$F_x = -evB_y \tag{51}$$

gegeben, da nach Voraussetzung $B_z = 0$ ist und wir für Teilchen mit kleiner Neigung zur Strahlachse v_z durch v ersetzen können. Aufgrund der Beziehung $B_y = gx$ wirkt auf Protonen eine rücktreibende Kraft in x -Richtung, falls der Gradient g des Feldes positiv ist (wie im Beispiel der Abb. 11). Wegen $F_y = ecB_x$ sieht man aber sofort ein, daß mit einer Fokussierung in der x -Richtung eine Defokussierung in der y -Richtung (und umgekehrt) verknüpft ist.

Aus (51) folgt unmittelbar die Bewegungsgleichung

$$\frac{dp_x}{dt} = -evgx \tag{52}$$

Die Steigung $x' = dx/dz$ der Bahn ist durch v_x/v_z gegeben und kann für kleine Werte von x' durch p_x/p angenähert werden. Ebenso kann dt durch dz/v ersetzt werden, da die kleine Kraft in z -Richtung die Geschwindigkeit relativistischer Teilchen kaum ändert. Aus der Bewegungsgleichung (52) wird also die Bahngleichung

$$x'' \equiv \frac{dx'}{dz} = -kx \quad , \quad (53)$$

wobei noch die als Quadrupolstärke bezeichnete Abkürzung

$$k = \frac{eg}{p} \quad (54)$$

benutzt wurde. Der Quadrupol wirkt in der xz -Ebene fokussierend für $k > 0$ und defokussierend für $k < 0$. Das Umgekehrte gilt in der yz -Ebene. Mit $y'' = ky$ erhalten wir Defokussierung für $k > 0$ und Fokussierung für $k < 0$. Das Vorzeichen von k wird offensichtlich durch die Vorzeichen der Ladung und des Feldgradienten g festgelegt.

Wir untersuchen nun vereinfachend einen Quadrupol, dessen Feldgradient im Inneren unabhängig von der z -Koordinate ist, während er außen abrupt verschwindet (sog. Rechteckverteilung des Feldes). Die Lösungen der Bahngleichung sind für einen solchen Quadrupol der Länge L elementar. Für $k > 0$ ist (53) eine Schwingungsgleichung, also sind Ortskoordinate und Steigung der Teilchenbahn am Ende des Quadrupols durch

$$\begin{aligned} x &= x_0 \cos \Omega + \frac{x'_0}{\sqrt{|k|}} \sin \Omega \\ x' &= -x_0 \sqrt{|k|} \sin \Omega + x'_0 \cos \Omega \end{aligned} \quad (55)$$

gegeben. Das Symbol Ω steht für $\sqrt{|k|}L$. Für $k < 0$ erhält man hingegen

$$\begin{aligned} x &= x_0 \cosh \Omega + \frac{x'_0}{\sqrt{|k|}} \sinh \Omega \\ x' &= x_0 \sqrt{|k|} \sinh \Omega + x'_0 \cosh \Omega \quad . \end{aligned} \quad (56)$$

Daher gelten die Matrizen:

$$\mathbf{M}_F = \begin{pmatrix} \cos \Omega & \frac{1}{\sqrt{|k|}} \sin \Omega \\ -\sqrt{|k|} \sin \Omega & \cos \Omega \end{pmatrix} \quad (57)$$

und

$$\mathbf{M}_D = \begin{pmatrix} \cosh \Omega & \frac{1}{\sqrt{|k|}} \sinh \Omega \\ \sqrt{|k|} \sinh \Omega & \cosh \Omega \end{pmatrix} \quad (58)$$

für einen fokussierenden bzw. defokussierenden Quadrupol.

Mit Massenspektrometern kann eine Auflösung bis $\Delta M/M \approx 10^{-8}$ erreicht werden. Als Detektor wird z.B. eine Fotoplatte verwendet, die durch die auftreffenden Ionen geschwärzt wird. Abb. 13 zeigt ein Beispiel für die erreichte optische Qualität und Auflösung.

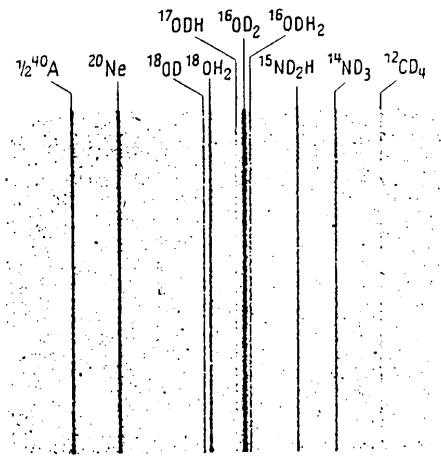


Abbildung 13: Trennung von 10 verschiedenen Ionen deren relative Atommasse zwischen 19.9878 und 20.0628 liegt. (Aus Haken, Wolf, Atom- und Quantenphysik) .

2.3.2 Ionenfallen

Alle bisher besprochenen Geräte benutzen eine Kombination von statischen elektrischen und magnetischen Feldern. Insbesondere der Magnet macht daher diese Apparate schwer und groß. Das von W. Paul entwickelte Massenfilter (Nobelpreis 1989) benutzt elektrische Wechselfelder. Es ist klein und leicht. Es besteht aus 4 metallischen Hyperbeln, experimentell reichen runde Stangen (Abb. 14). Für das Potential gilt

$$V = \frac{U}{r_0^2}(x^2 - y^2) \quad (59)$$

und daher

$$\begin{aligned} E_y &= -\frac{\partial V}{\partial y} = \frac{2Uy}{r_0^2} \\ E_x &= -\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{-2Ux}{r_0^2} \\ E_z &= 0 \end{aligned} \quad (60)$$

Es liegt also ein elektrisches Quadrupolfeld vor.

Die Bewegungsgleichungen für ein Teilchen der Ladung e lauten:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} + \frac{2eUx}{r_0^2} &= 0 \\ m\ddot{y} - \frac{2eUy}{r_0^2} &= 0 \\ m\ddot{z} &= 0 \end{aligned} \quad (61)$$

Wie beim magnetischen Quadrupol ist eine fokussierende Lösung (stabile Bahn) nur entweder in der x - oder y Koordinate möglich. Falls anstelle der statischen Spannungen U Wechselfelder

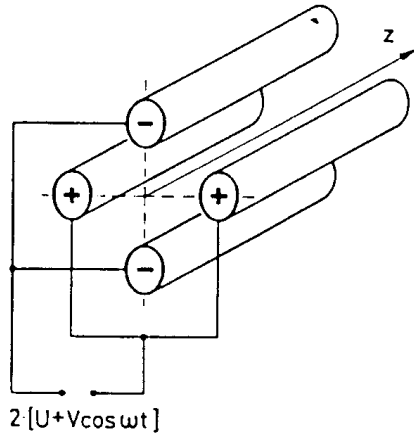


Abbildung 14: Schema des Massenfilters nach W. Paul.

$U = U_0 \cos \omega t$ verwendet werden lauten die Bahngleichungen

$$\begin{aligned} m\ddot{x} + \frac{2eU_0}{r_0^2}x \cos \omega t &= 0 \\ m\ddot{y} - \frac{2eU_0}{r_0^2}y \cos \omega t &= 0 \end{aligned} \quad (62)$$

Diese Differentialgleichungen sind vom Matthieuschen Typ (periodische Koeffizienten). Ihre allgemeine Form lautet

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + (a \pm 2q \cos 2\xi)\chi = 0 \quad (63)$$

mit Koeffizienten a, q , die in unserem Beispiel die Werte $a = 0$

$$q = \frac{4eU_0}{r_0^2 m \omega^2} \quad (64)$$

annehmen, während die Variable ξ durch $\omega t/2$ gegeben ist. Die Gleichung hat für bestimmte a, q Bereiche stabile Lösungen, d.h. Fokussierung in beiden Richtungen (Abb. 15,16).

Für $a = 0$ legt das q -Band den Massenbereich $\Delta m/m$ der Ionen fest, die im Empfänger nachgewiesen werden können.

Eine Variante des Massenfilters ist der Paulsche Ionenkäfig. Hier sind die Pole zu einem Kreis aufgewickelt. Eine andere Art von Ionen- oder Elektronenkäfig bildet die sog. Penning-Falle (Abb. 17). Sie arbeitet mit statischen B - und E -Feldern. Ohne E -Feld laufen die Teilchen auf einem Kreis in der Ebene senkrecht zur z -Ache. Aus (38) wird die Umlauffrequenz (Zyklotronfrequenz) zu

$$f = \frac{eB}{2\pi m} \quad (65)$$

berechnet. In z -Richtung sind die Bahnen nicht fokussiert. Mit E -Feld gibt es stabile Bahnen, deren Berechnung etwas komplizierter ist. Mit diesem Käfig lassen sich die genauesten

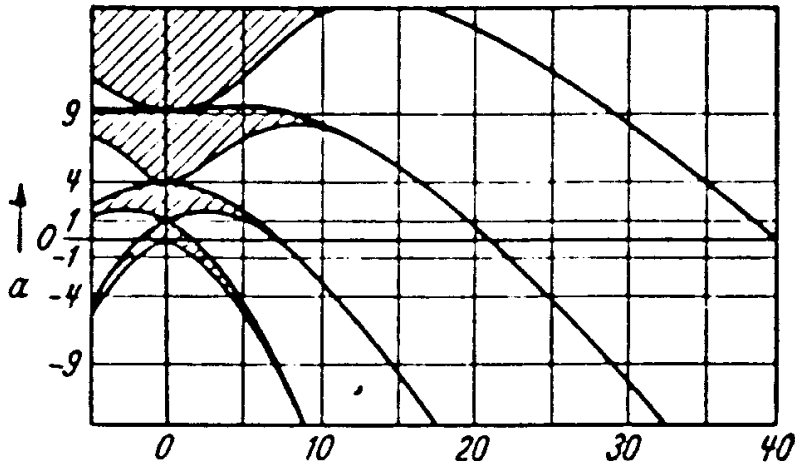


Abbildung 15: Stabilitätsdiagramm des Massenfilters. Ionen, deren a - und q -Werte innerhalb des schraffierten Bereiche liegen, durchlaufen stabile Bahnen. (aus W. Paul, Raether Z. Physik 140)

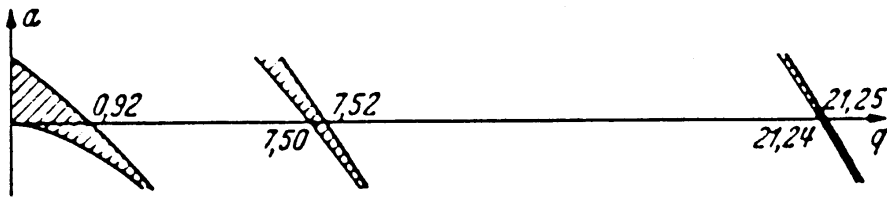


Abbildung 16: Stabilitätsdiagramm für das Beispiel des Textes mit reiner Wechselspannung, d.h. $a = 0$. (aus W. Paul, Raether Z. Physik 140)

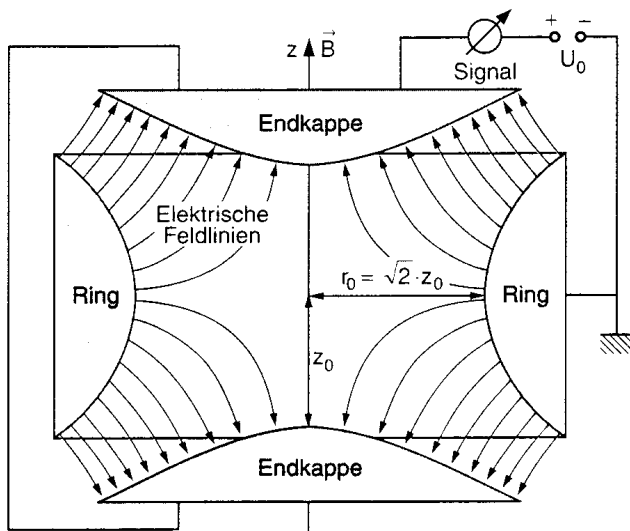


Abbildung 17: Prinzip der Penningfalle (Aus Demtröder, Physik III).

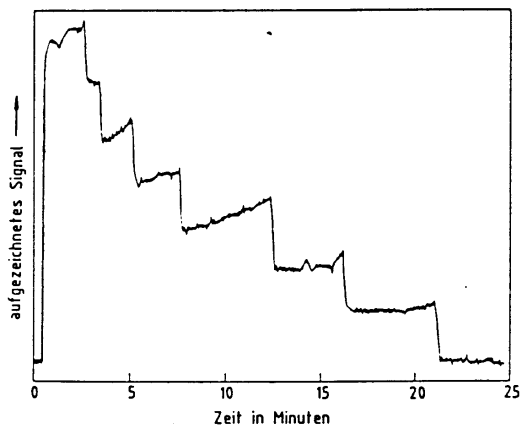


Abbildung 18: Spannungssignal der in einer Penningfalle gefangenen Elektronen. Das Spannungssignal, das axial schwingende Elektronen an der Deckelektrode induzieren, gestattet es, die Elektronen abzuzählen. Die Anregung der Schwingung war so stark, daß die Elektronen nacheinander aus dem Käfig fielen. Wird die Anregung verkleinert, sobald nur noch ein Elektron im Käfig ist, läßt sich dieses Elektron wochenlang speichern. Nobelpreis 1989 für H.G. Dehmelt. (aus Physikalische Blätter 45 1989,Nr.12)

Bestimmungen der Masse und Ladung von Teilchen durchführen (Auflösung $< 10^{-8}$). Es ist gelungen, einzelne Elektronen lange Zeit zu speichern (Abb. 18).

2.4 Radien der Atome

Genauere Informationen werden aus der Kristallstruktur fester Körper gewonnen. Diese Struktur kann mit Hilfe der Röntgenbeugung gut bestimmt werden (Abschnitt 3.1.1). Im einfachsten Fall liegt eine kubische Gitter mit primitiver Kugelpackung vor. In einen Kubus der Kantenlänge $a = 4r$ passen 8 Atome. Jedes Atom des Volumens

$$V_0 = \frac{4\pi}{3}r^3 \quad (66)$$

beansprucht im Kristall das Volumen V_0/ε , worin sich der Füllfaktor ε aus

$$8V_0 = \varepsilon a^3 \quad (67)$$

berechnen lässt. Für primitiv gepackte kubische Kristalle gilt offenbar $\varepsilon = 0.52$. Auch bei anderen Kristallstrukturen ist die Berechnung ebenfalls elementar. Da die Anzahldichte der Atome $n_0 = N/V$ über

$$\frac{N}{V} = \frac{N}{N(V_0/\varepsilon)} = \frac{\varepsilon}{V_0} \quad (68)$$

mit dem Atomradius verknüpft ist, wird dieser aus

$$r^3 = \frac{3\varepsilon}{4\pi n_0} \quad (69)$$

bestimmt. n_0 wird wie in (26) aus der gemessenen Dichte ρ mit Hilfe von

$$n_0 = \frac{N_A \rho \text{ kmol}}{M_r \text{ kg}} \quad (70)$$

berechnet.

Ein in der gesamten Mikrophysik benutztes Verfahren zur Messung von Radien besteht in der Durchführung von Streuversuchen. Die grundlegenden Begriffe werden hier anhand der Atom-Atom-Streuung eingeführt (Abb. 19).

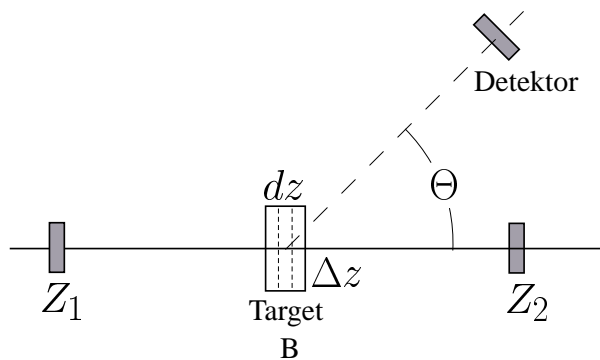


Abbildung 19: Schematische Darstellung eines Streuexperimentes.

Die Zahl N_{in} der einfallenden Atome wird im Zähler Z_1 gemessen und die Zahl N_{out} der ungestreut durchlaufenden Atome im Zähler Z_2 . Die Atome des Materials bilden das sog.

Target der Streureaktion. Durch die Streureaktionen im Target werden Atome des einfallenden Strahls abgelenkt, und es erreichen weniger Teilchen den Zähler Z_2 . In eine dünne Schicht im Inneren des Targets treten $N(z)$ Atome ein. Die Abnahme dN der Zahl der austretenden Atome ist proportional zur Schichtdicke dz und daher gilt die Beziehung

$$dN = -N(z)\kappa dz \quad . \quad (71)$$

Hierin ist κ der Streukoeffizient mit der Dimension einer reziproken Länge. Sein Kehrwert trägt den Namen Streulänge oder freie Weglänge und wird oft mit dem Symbol λ bezeichnet. Es leuchtet ein, daß der Streukoeffizient proportional zur Anzahldichte n_0 der Atome im Material sein muß. Damit haben wir also

$$\kappa = n_0\sigma \quad . \quad (72)$$

Die Größe σ hat die Dimension einer Fläche und wird daher Wirkungsquerschnitt oder besser totaler Wirkungsquerschnitt genannt. Die gebräuchliche Maßeinheit ist

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad (73)$$

mit der Abkürzung „b“ für barn. Typische Querschnitte der Kernphysik liegen in diesem Bereich.

Für ein Target der Dicke Δz ergibt sich mit

$$dN = -N(z)n_0\sigma dz \quad (74)$$

durch Integration

$$N_{\text{out}} = N_{\text{in}}e^{-n_0\sigma\Delta z} \quad , \quad (75)$$

der totale Querschnitt beschreibt also die Abschwächung eines Strahls einlaufender Teilchen. Nach einer Streulänge $\lambda = 1/(n_0\sigma)$ ist die Intensität auf $1/e$ abgefallen. Für die Zahl N_f der gestreuten Atome² gilt mit $N_f = N_{\text{in}} - N_{\text{out}}$ und $\Delta z/\lambda \ll 1$ durch Reihenentwicklung der Exponentialfunktion in (75)

$$N_f = N_{\text{in}}n_0\Delta z\sigma \quad . \quad (76)$$

Man erhält detailliertere Informationen durch das Messen von Winkelverteilungen. Diese beschreibt man durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$, wobei $d\Omega$ das Raumwinkelement ist. In Kugelkoordinaten kann $d\Omega$ durch

$$d\Omega = d\cos\Theta d\phi = -\sin\Theta d\Theta d\phi \quad (77)$$

ausgedrückt werden. Für einen Zähler der Fläche dA in weitem Abstand R vom Mittelpunkt des Targets gilt

$$|d\Omega| = \frac{dA}{R^2} \quad . \quad (78)$$

In unserem Beispiexperiment mißt man die Zahl dN_f der gestreuten Atome als Funktion des Streuwinkels Θ (Abb. 19). Es ist dann

$$\frac{dN_f}{d\Omega} = N_{\text{in}}n_0\Delta z\frac{d\sigma}{d\Omega} \quad . \quad (79)$$

²Der Endzustand bekommt bei uns immer den Index f vom englischen *final*.

Bei gegebener Einfallenergie kann bei kugelsymmetrischen Wechselwirkungen der Wirkungsquerschnitt nur von Θ und nicht von ϕ abhängen. Bei der Messung eines totalen Wirkungsquerschnitts über die Abschwächung eines Strahls taucht natürlich das Problem auf, ungestreut durchlaufende Teilchen von solchen zu unterscheiden, die nur um sehr kleine Winkel (Breite der Zähler!) abgelenkt wurden. Eine systematische Korrektur besteht z.B. darin, die Breite b des zweiten Zählers beginnend mit $b = B$ zu verringern und die Rate

$$N' = N_{\text{out}}(b) \frac{B}{b} \quad (80)$$

nach $b = 0$ zu extrapolieren. Der so gefundene Wert von N' kann als die Zahl der durchlaufenden Atome gewählt werden. Eine andere Möglichkeit zur Messung von σ besteht darin, den differentiellen Wirkungsquerschnitt in einem möglichst großen Winkelbereich zu messen, in die ungemessenen Bereiche zu extrapolieren und zu integrieren.

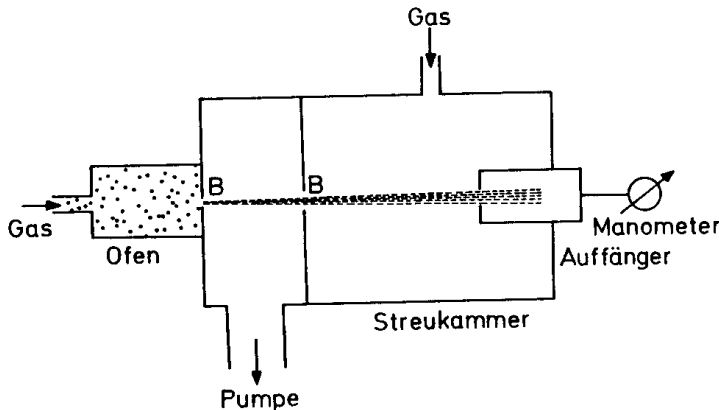


Abbildung 20: Eine Atomstrahlapparatur zur Messung von Streuquerschnitten. Aus Haken Wolf, Atom- und Quantenphysik.

Das Prinzip einer Apparatur zur Messung der Atom-Atom-Streuung mit einem gasförmigen Target ist in Abb. 20 gezeigt. Natürlich werden nicht unbedingt Zähler zur Messung der ein- und auslaufenden Teilchenströme benötigt. In der gezeigten Anordnung wird zunächst der einfallende Strom ohne Streugas, dann die Abschwächung dieses Stroms durch das Gas in der Kammer gemessen. Als Detektor wird häufig ein Wolframblech benutzt (Langmuir Taylor). Da Wolfram eine hohe Austrittsarbeit (Abschn. 3.1.2) besitzt, werden Atome, die sich an die Oberfläche anlagern ionisiert. Der resultierende Strom wird gemessen.

Der Wirkungsquerschnitt der Atom-Atom-Streuung ist in einem Modell harter Kugeln mit den Radien r_1, r_2 durch

$$\sigma = \pi(r_1 + r_2)^2 \quad (81)$$

gegeben. Eine Streuung findet nämlich nur für $b < r_1 + r_2$ statt, wobei der Stoßparameter b gleich dem Abstand der Mittelpunkte der streuenden Kugeln ist. Der einfallende Strahl hat eine Fläche A . In der durch ihn definierten Röhre im Target befinden sich N_Z Streuzentren. Die Wahrscheinlichkeit für eine Streuung ist dann richtigerweise durch

$$\frac{N_f}{N_{\text{in}}} = \frac{N_Z \sigma}{A} \quad (82)$$

also das Verhältnis der durch die Targetatome abgedeckten Fläche zur Fläche des Strahls festgelegt.

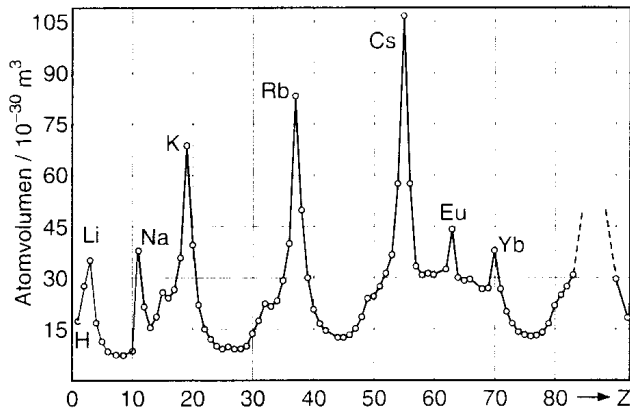


Abbildung 21: Die gemessenen Atomvolumina in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z . Aus Demtröder, Experimentalphysik, Bd 3.

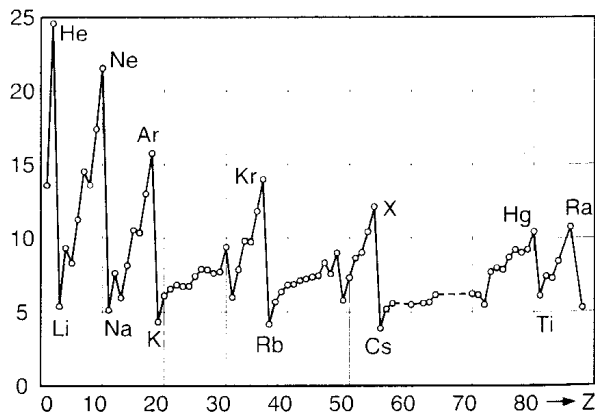


Abbildung 22: Die Ionisierungsenergie der Atome in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z . Aus Demtröder, Experimentalphysik, Bd 3.

Die gemessenen Atomvolumina sind in Abb. 21 gezeigt. Es besteht eine klare Korrelation zur Stellung der Elemente im Periodensystem. Die Alkaliatome haben die größten Volumina. Auf der anderen Seite liegen die Volumina fast aller Atome zwischen 0.01 und 0.03 nm^3 . $r = 0.17 \text{ nm}$ ist eine gute Abschätzung für den Radius der Atome.

Sehr interessant ist der Vergleich mit dem Verlauf der Ionisierungsenergie in Abb. 22. Eine Apparatur zur Messung dieser Atomeigenschaft ist in Abb. 23 gezeigt. Die Ionisierungsenergie ist antikorreliert mit den Radien. Hier zeigt sich die Schalenstruktur der Atome. Edelgase haben kompakte abgeschlossene Schalen und lassen sich schlecht ionisieren. Bei den Alkaliatomen kommt ein lose gebundenes, äußeres Elektron hinzu.

Moderne Mikroskope (Feldemissions- Tunnel- und Rasterkraftmikroskop) machen einzelnen Atome einer Oberfläche sichtbar. Im Raster-Tunnelmikroskop (Abb. 24) wird der sog.

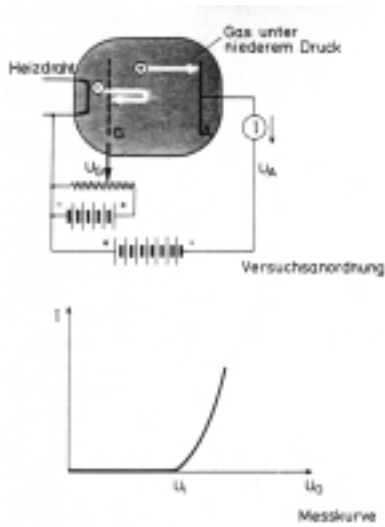


Abbildung 23: Apparatur zur Messung der Ionisierungsenergie von Gasen. Falls $U_G > W_{\text{ion}}/e$ erhöht sich der Strom I sprunghaft. Aus Haken Wolf, Atom- und Quantenphysik.

Tunnel-Strom (aufgrund des quantenmechanischen Tunnel-Effekts) zwischen einer feinen Spitze und den Atomen einer Oberfläche gemessen. G. Binnig und H. Rohrer erhielten hierfür 1986 den Nobelpreis. Im Rasterkraftmikroskop wird die Kraft zwischen den Atomen einer untersuchten Oberfläche und einer sehr feinen Spitze über die Bewegung der Spitze gemessen. Die Auslenkung wird durch gespiegelte Laserstrahlen vergrößert. Die website http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/STM_Gallery/chemical_resolution.html enthält schöne Aufnahmen von Oberflächen.

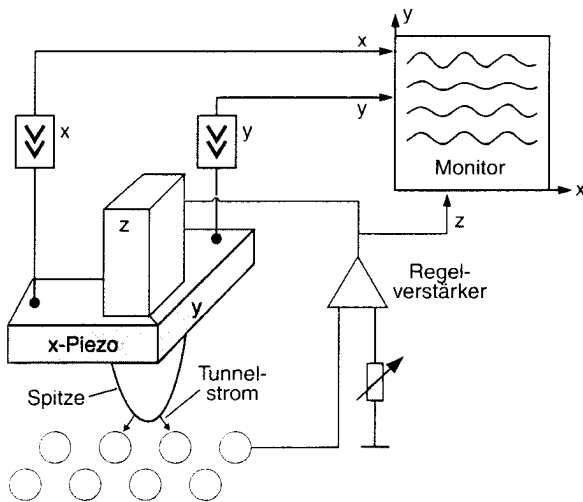


Abbildung 24: Das Raster-Tunnelmikroskop. Aus Demtröder, Experimentalphysik, Bd 3.

2.5 Atomkerne

2.5.1 Radien der Atomkerne

Atome bestehen aus einem Kern mit der Kernladungszahl Z und einer Elektronenhülle mit Z Elektronen. Der Kernradius ist verglichen mit dem Atomradius sehr klein (O) fm, $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$. In ihm ist fast die gesamte Masse des Atoms vereint. Alle diese (historisch außerordentlich überraschenden) Tatsachen wurden durch Streuexperimente bewiesen. In der klassischen Anordnung von Rutherford wurden α -Teilchen (Helium-Ionen) als Sonde benutzt, später verwendete Hofstadter hochenergetische Elektronen. Um die Beweisführung zu verstehen, betrachten wir die klassische Bahn eines niederenergetischen, geladenen Teilchens der Ladungszahl z , der Anfangsgeschwindigkeit v_0 und der Masse m im Coulomb-Feld einer Punktladung mit der Ladungszahl Z (Abb. 25). Es fliegt mit dem Stoßparameter b am Ladungszentrum vorbei. Die ablenkende Kraft ist

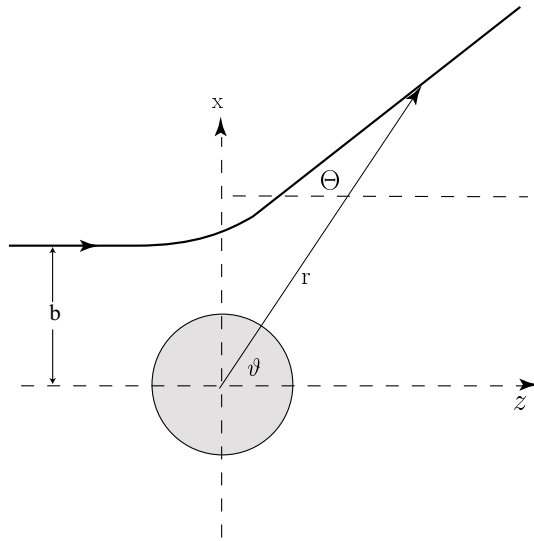


Abbildung 25: Zur Ableitung der Rutherford'schen Streuformel

$$F_x = -\frac{k_0 \sin \vartheta}{r^2} \quad (83)$$

mit

$$k_0 = zZ\alpha\hbar c \quad (84)$$

Für den Drehimpuls L_y mit dem konstanten Wert $-mbv_0$ gilt in Polarkoordinaten

$$L_y = -mr^2\dot{\vartheta}, \quad (85)$$

also erhalten wir mit $r^2 = bv_0/\dot{\vartheta}$

$$F_x = -\frac{zZ\alpha\hbar c}{bv_0} \sin \vartheta \dot{\vartheta} \quad (86)$$

Die Geschwindigkeit v_x nach der Streuung wird dann über

$$v_x = \int_0^{v_0 \sin \Theta} dv_x = -\frac{zZ\alpha\hbar c}{mbv_0} \int_{\pi}^{\Theta} \sin \vartheta d\vartheta \quad (87)$$

berechnet und daraus folgt die Beziehung

$$b = \frac{k_0 \cot(\Theta/2)}{2W_{\text{kin}}} . \quad (88)$$

Alle Teilchen, die einen Kreis mit dem Radius zwischen b und $b + db$ durchqueren, werden in ein Winkelintervall um Θ abgelenkt. Der Beitrag zum differentiellen Wirkungsquerschnitt beträgt daher

$$d\sigma = 2\pi b db = 2\pi b \frac{db}{d\Theta} d\Theta . \quad (89)$$

Mit $d\Omega = -2\pi \sin \Theta d\Theta$ folgt schließlich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{zZ\alpha\hbar c}{4W_{\text{kin}}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)} . \quad (90)$$

Falls der Rückstoß des untersuchten Kerns der Masse M nicht vernachlässigt werden kann, sind Ω und Θ in (90) Raumwinkel und Winkel im Schwerpunktsystem der Reaktion und für die kinetische Energie gilt $W_{\text{kin}} = \mu v_0^2/2$ mit der reduzierten Masse μ

$$\mu = \frac{mM}{m + M} . \quad (91)$$

Die Abb. 26c zeigt die sehr gute Übereinstimmung bei der Streuung niederenergetischer α -Teilchen über einen großen Winkelbereich. Die Grundannahmen des Modells werden also bestätigt und die Kernladung Z kann aus dem Wirkungsquerschnitt bestimmt werden. Bei großen Winkeln treten aber deutliche Abweichungen auf, die sich bei höheren Energien zu kleineren Winkeln hin verschieben. Der Grund ist der endliche Radius R des Kerns. Für $b_{\text{min}} < R_1 + R_2$ wird das Modell der Streuung im Coulombfeld sicherlich falsch. Aus dem scharfen Knick der Abb. 26b) kann mit Hilfe von (88) dieser Grenzwert zu $b_{\text{min}} = 7.3$ fm berechnet werden.

Von Hofstadter (Nobelpreis 1961) und Mitarbeitern wurden umfangreiche Untersuchungen der Elektron-Kern-Streuung durchgeführt. Die Auswertung der quantenmechanischen Streuformeln ergab als gute Näherung für die Kernradien

$$R = r_0 A^{1/3} , \quad (92)$$

worin A die im nächsten Abschnitt behandelte Massenzahl ist und der Parameter r_0 den Wert 1.3 fm hat.

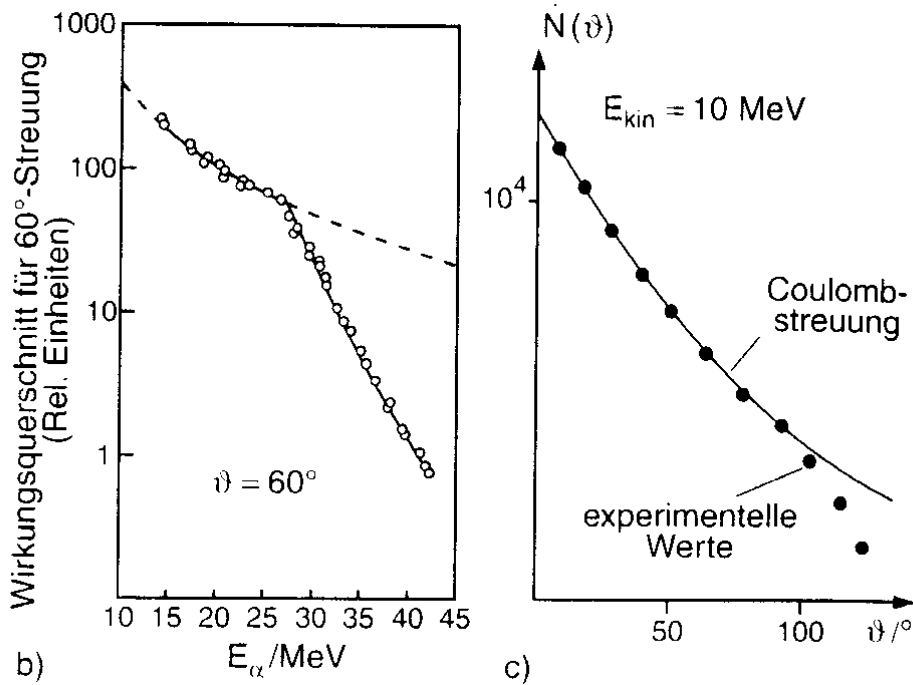


Abbildung 26: Ergebnisse der Rutherfordstreuung von α -Teilchen an Goldkernen. Aus Demtröder, Experimentalphysik, Bd. 3. Der Winkel ϑ ist in unserem Text Θ .

2.5.2 Massen und Bindungsenergien

Die Rutherford'schen Streuversuche beweisen, daß die Masse des Atoms im Kern konzentriert ist. Anstelle der Massen betrachten wir die Ruheenergien. Für die massenspektrometrisch bestimmte Ruheenergie eines Atoms gilt

$$W_{0,A} = M_r u c^2, \quad (93)$$

daraus ergibt sich für den Kern

$$W_{0,K} = W_{0,A} - ZW_{0,e} + W_{B,e}. \quad (94)$$

Der entscheidende Punkt ist hier, daß die Masse gebundener Systeme geringer ist als die Masse der Summe der Komponenten. Die Bestimmung der Bindungsenergie $W_{B,e}$ der Elektronenhülle ist schwierig. Rechnungen im Thomas-Fermi-Atommodell ergeben $W_{B,e} = 15.73 Z^{7/3} \text{ eV}$. Da dieser Wert auch für die schwersten Elemente unter 1 MeV bleibt wird $W_{B,e}$ hier vernachlässigt.

Das Periodensystem der Elemente ordnet die Elemente in Gruppen, innerhalb derer sich die chemischen Eigenschaften wiederholen. Die Rutherford'schen Streuversuche beweisen, daß der aufsteigende Ordnungsparameter Z des Systems mit der Kernladungszahl identisch ist. Die Messungen der Atommassen zeigen, daß bei den leichten Kernen ($Z = 2..8$) die Relation $M_r = 2Z$ relativ gut erfüllt ist, für höhere Z wird das Verhältnis M_r/Z deutlich > 2 . Wegen $M_r/Z \geq 2$ müssen im Kern weitere Teilchen enthalten sein. Der Kern ist aus den Nukleonen Neutron und Proton zusammengesetzt. Das Neutron hat keine Ladung. Es wurde von J. Chadwick direkt

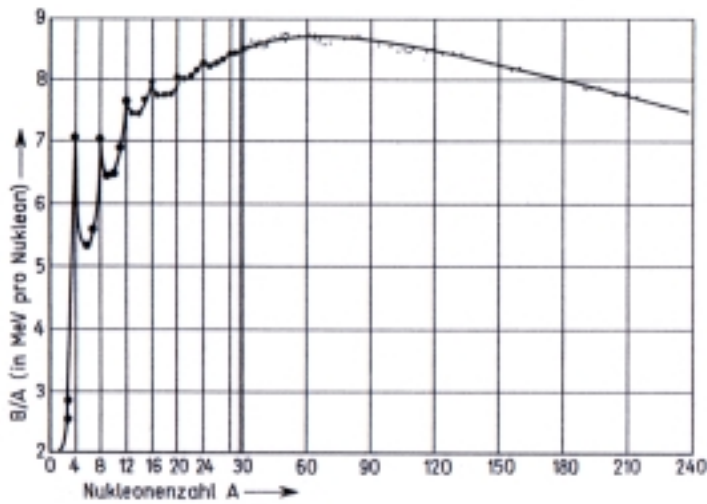


Fig.10 Bindungsenergie pro Nukleon als Funktion von A für stabile Kerne; nach [Eva 55]. Abszisse bis A = 30 gespreizt

Abbildung 27: Verlauf der Bindungsenergie von Kernen.

uc^2	931.49 MeV
$W_{0,p}$	938.27 MeV
$W_{0,n}$	939.56 MeV
$W_{0,e}$	0.511 MeV

Tabelle 1: Die wichtigsten Ruheenergien der Atomphysik

nachgewiesen. (Nobelpreis 1935). Die Tabelle 1 zeigt, daß das Neutron schwerer als das Proton ist, $m_n > m_p$.

Die Anzahl (Massenzahl) A der Nukleonen ist offensichtlich durch

$$A = N + Z \quad , \quad (95)$$

gegeben, wobei hier N die Anzahl der Neutronen im Kern bezeichnet. Die meisten Elemente haben mehrere Isotope, d.h. Kerne mit gleichem Z (gleichen chemischen Eigenschaften!) aber verschiedenem N . Kennzeichnung: ${}^A_Z\text{Symbol}_N$. Beispiele Wasserstoff ${}^1_1\text{H}_0$, Deuterium ${}^2_1\text{H}_1$, ${}^{12}_6\text{C}_6$, ${}^{238}_{92}\text{U}_{146}$. Das Symbol N wird oft weggelassen. Die in den Tabellen des Periodensystems angegebenen relativen Massen beziehen sich auf das auf der Erde vorkommende Isotopengemisch. Die Gesamtenergie (Masse) eines Isotops wird durch

$$W_{0,K} = ZW_{0,p} + NW_{0,n} - W_{B,A} \quad (96)$$

festgelegt, worin $W_{B,A}$ die Bindungsenergie der Nukleonen im Kern ist. Für ${}^{12}_6\text{C}$ gilt nach Definition $W = 12uc^2$, also $W_{B,A} = 92,3$ MeV. Die Bindungsenergie/Nukleon im Kern beträgt etwa 8 MeV und ist weitgehend unabhängig von A , Abb. 27. Numerisch sind damit die relativen Massen der Isotope innerhalb von 0.1% durch ganze Zahlen gegeben. An der Kurve erkennt man, daß es für schwere Kerne (Uran) energetisch günstiger ist, in zwei leichte überzugehen

(Kernspaltung). Für 2 Deuteriumkerne ist es günstig, zu Helium zu verschmelzen (Fusion). Beide Prozesse erfolgen nicht spontan, sondern erst nach Überwindung einer Potentialbarriere.

Die hohen Bindungsenergien können nicht elektromagnetischen Ursprungs sein. Die Kernkraft ist stark (Bindungsenergie) und kann so die elektrische Abstoßung der Protonen kompensieren. Ohne Neutronen wären die meisten Kerne instabil. Die Bindungsenergie/Elektron in der Atomhülle steigt mit Z an, dies ist eine Eigenschaft der langen Reichweite des Coulombpotentials. Im Gegensatz dazu bedeutet die Konstanz von $W_{B,A}/A$, daß die Kernkraft kurzreichweitig ist. Sie kann immer nur die nächsten Nachbarn binden. Das Volumen eines Kerns wird damit

$$V_K = AV_p \quad (97)$$

und daher in Übereinstimmung mit (92)

$$R_K = r_0 A^{1/3} \quad (98)$$

mit einem Protonradius von $r_0 = 1.3$ fm, der durch die Hofstadterschen Streuversuche bestimmt wurde. Implizit wurde noch $r_p = r_n$ angenommen. Im Gegensatz zu (98) ist der Atomradius in etwa konstant. Dies ist wieder eine Folge der Form des Coulombpotentials.

3 Welle und Teilchen

3.1 Photonen

3.1.1 Röntgenstrahlung

C.W. Röntgen entdeckte 1895 eine neue Form von Strahlung, die beim Beschuß einer Metallplatte mit hochenergetischen Elektronen ($W > 1\text{keV}$) entsteht. Er erhielt 1901 den ersten Nobelpreis für Physik. Den prinzipiellen Aufbau einer Röntgenröhre zeigt Abb. 28. Durch Beugungsversuche wird bewiesen, daß die Wellenlänge $< 1\text{ nm}$ ist. Die Untersuchung der Polarisation zeigt, daß die Voraussagen der elektromagnetischen Theorie erfüllt werden (C.G. Barkla, Nobelpreis 1917 für die Entdeckung der charakteristischen Röntgenstrahlung der Elemente). Es handelt sich bei der Röntgenstrahlung also um elektromagnetische Wellen kleiner Wellenlänge. Die technische und medizinische Bedeutung besteht in der stark materialabhängigen Absorption der Röntgenstrahlung, $\sigma_{\text{abs}} \sim \lambda^3 Z^4$, deren Wellenlängenbereich sich grob zwischen 1 und 0.01 nm einengen läßt. Zur Erinnerung: Die Wellenlänge von Licht liegt zwischen 400 und 800 nm. Der allgemeine Name für kurzwellige elm. Strahlung ist γ -Strahlung (ohne Beschränkung des Wellenlängenbereichs). Die Absorption beruht auf den Prozessen der Ionisation und Anregung der Atome des Materials. Diese Prozesse werden daher auch zum Nachweis der Strahlung benutzt (Filme, Ionisationskammern, Szintillationszähler etc.).

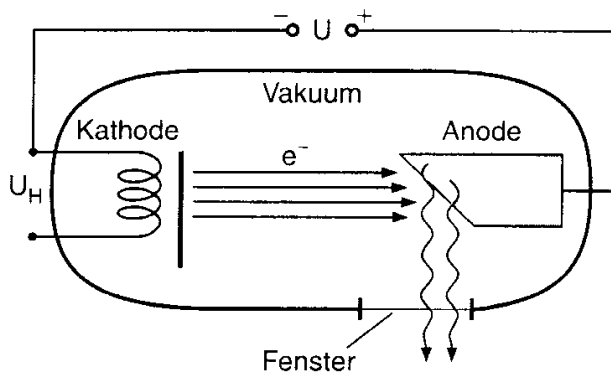


Abbildung 28: Aufbau einer Röntgenröhre. Aus Demtröder, Experimentalphysik Bd 3.

Als Beugungsgitter für Röntgenstrahlung können Kristalle verwendet werden, da der Abstand der Atome in der richtigen Größenordnung liegt. Die Atome des Kristalls werden so die Zentren der Elementarwellen im Sinne des Huygenschen Prinzips. Das Prinzip der Anordnung von Bragg zeigt Abb. 29. Die Reflexion von Wellen an einer Kristalloberfläche kann durch Interferenz der von den Streuzentren der Oberfläche ausgehenden Wellen erklärt werden. Es gilt das Reflexionsgesetz unabhängig von der Wellenlänge. Wenn man jedoch tiefer liegende Netzebenen mitnimmt, werden nur Strahlen reflektiert, die die Bragg-Bedingung

$$2d \sin \vartheta = n\lambda \tag{99}$$

erfüllen. Voraussetzung hierfür ist, daß der Brechungsindex der Röntgenstrahlung nicht von 1 abweicht. Dies ist sehr gut erfüllt. Für Kronglas gilt $n = 1 - 5 \cdot 10^{-6}$ bei $\lambda = 0.13\text{ nm}$. (Beachten Sie die Definition des Winkels ϑ im Unterschied zum Reflexionsgesetz.) Einen typischen experimentellen Aufbau zeigt Abb. 30.

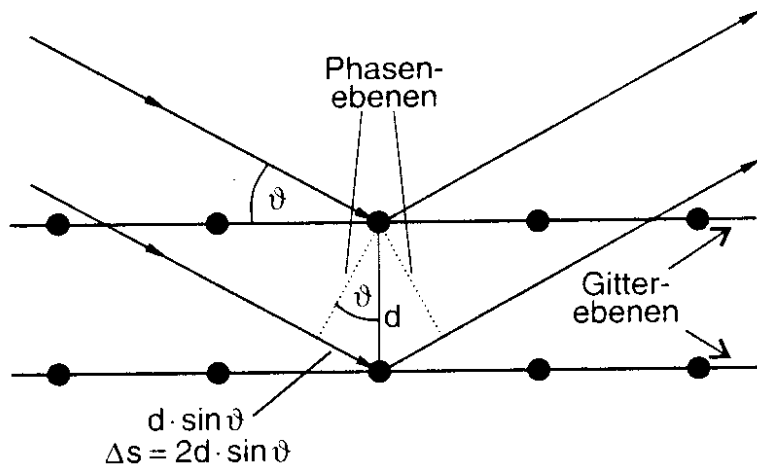


Abbildung 29: Zur Ableitung der Bragg'schen Reflexionsbedingung. Aus Demtröder, Experimentalphysik Bd 3.

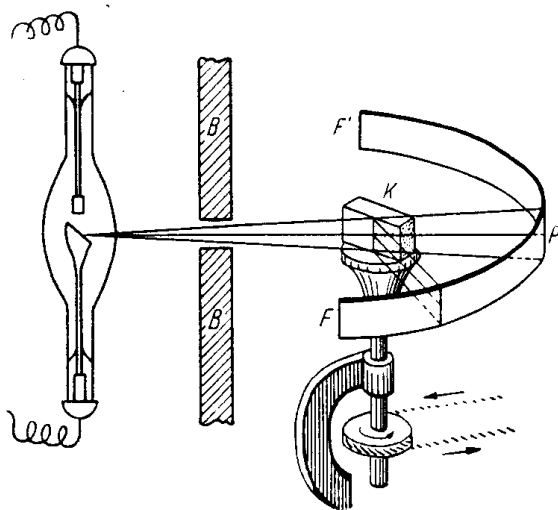


Abbildung 30: Ein Spektrograph zur Untersuchung der Röntgenstrahlung in der Anordnung von Bragg. Vater und Sohn Bragg erhielten den Nobelpreis 1915. Aus Schpolksi, Atomphysik.

Die bisher betrachteten Netzebenen waren den Kristallgrenzen parallel. Neben diesen gibt es aber noch viele andere Ebenen (z.B. 4,4' in Abb. 31). Für einen feinen auftreffenden Strahl (Abb. 32) wird die Bragg-Bedingung nur in einer ganz bestimmten Richtung des Raumes erfüllt sein. Man erhält ein Laue-Diagramm (Abb. 33). Die vielen Punkte zeigen, daß die Interferenzbedingung häufig erfüllt wird. Dies ist nur bei der Verwendung einer Strahlung mit kontinuierlichem Spektrum möglich.

In der Anordnung von Debye und Scherrer wird anstelle eines Kristalls ein Pulver verwendet. Als Folge werden konzentrische Ringe von Beugungsfiguren gesehen.

Mit den diskutierten Verfahren kann bei bekanntem Abstand der Netzebenen das Spektrum der Röntgenquellen studiert werden. Umgekehrt kann nach Eichung einer Röhre der Aufbau

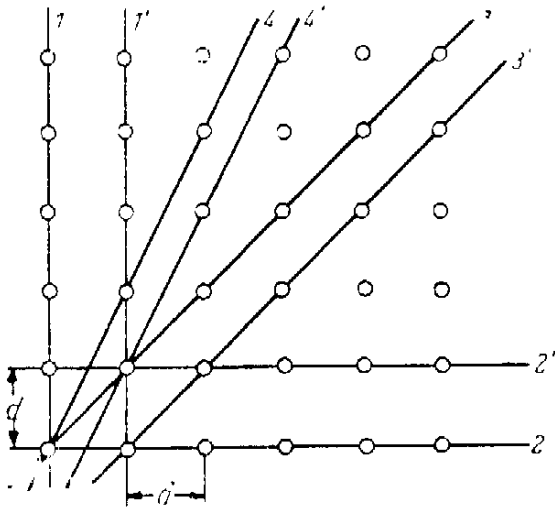


Abbildung 31: Verschiedene Netzebenen in einem Kristall. Aus Schpolski, Atomphysik.

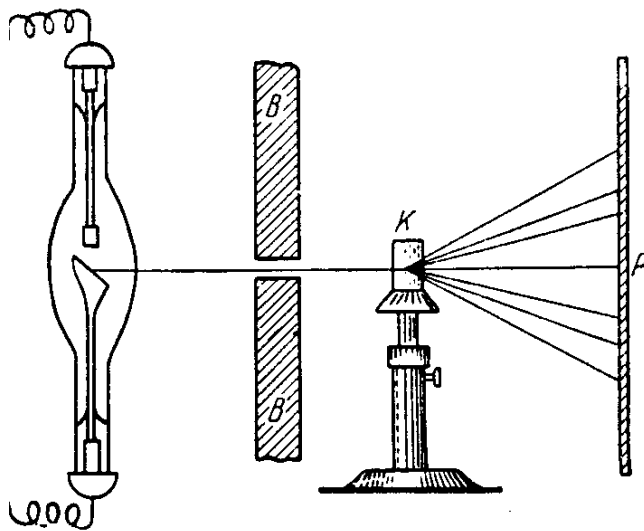


Abbildung 32: Röntgenspektrograph nach v. Laue. Aus Schpolski, Atomphysik.

der Kristalle untersucht werden. Diese Variante wird auch heute noch in der Materialforschung häufig benutzt. Das Spektrum der Strahlung ist kontinuierlich mit scharfen Linien, die vom Material der Anode abhängen (Abb. 34). Das kontinuierliche Spektrum wird als Spektrum der Bremsstrahlung bezeichnet, Elektronen strahlen bei der Abbremsung elm. Wellen ab. Auffällig ist die scharfe Kante am kurzwelligen Ende, für sie gilt mit großer Genauigkeit

$$f_{\max} = \frac{eU}{2\pi\hbar} \quad (100)$$

oder

$$\lambda_{\min} = \frac{1239.9\text{nmV}}{U} \quad (101)$$

worin U die Beschleunigungsspannung der Elektronen ist. Dies läßt sich nur erklären, wenn man der γ -Strahlung Korpuskeleigenschaften zuordnet. γ -Quanten (Photonen) haben eine Ener-

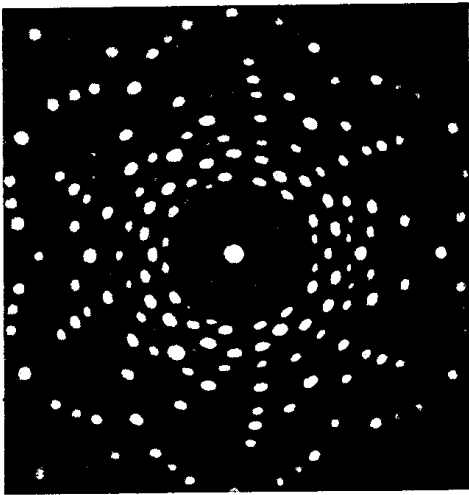


Abbildung 33: Laue-Diagramm der Röntgenbeugung in einem Quarzkristall. Aus Schpolski, Atomphysik.

gie

$$W_\gamma = hf = \hbar\omega \quad (102)$$

Jetzt findet auch das Linienspektrum eine einfache Erklärung. Die Elektronen des Materials der Antikathode können nur ganz bestimmte Energiezustände W_n einnehmen. Beim Beschuß mit den Elektronen werden die Besetzungszahlen geändert und Übergänge ermöglicht, bei denen ein Photon mit der Energie

$$W_\gamma = W_m - W_n \quad (103)$$

abgestrahlt wird.

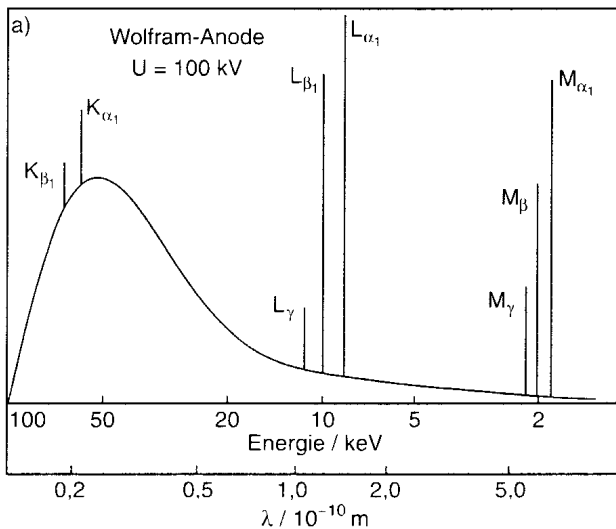


Abbildung 34: Spektrum der Röntgenstrahlung. Neben dem kontinuierlichen Spektrum (Bremsstrahlung), dessen Form universell ist, gibt es scharfe Linien, die vom Material der Anode abhängen. Aus Demtröder, Experimentalphysik Bd 3.

In der speziellen Relativitätstheorie wird für die Energie eines freien Teilchens der Geschwindigkeit v

$$W = m\gamma c^2 \quad (104)$$

mit

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (105)$$

bewiesen. Daraus folgt für die Ruheenergie $W_0 = mc^2$. Die kinetische Energie eines freien Teilchens ist als

$$W_{\text{kin}} = W - W_0 \quad (106)$$

definiert. Dieser Ausdruck geht für $v \rightarrow 0$ in die bekannte Newtonsche Formel über. Die sieht man sofort ein, wenn man (105) für kleine v entwickelt. Für den Impuls gilt

$$p = W \frac{v}{c^2} . \quad (107)$$

Da Photonen die Geschwindigkeit c haben, folgt

$$p = \frac{W}{c} = \frac{h}{\lambda} . \quad (108)$$

Mit der Definition der Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$ folgt daraus $p = \hbar k$. Energie und Impuls bilden einen Vierervektor $(W/c, \mathbf{p})$. Die Masse eines relativistischen Teilchens wird aus der Formel für die „Länge“ eines Vierervektors

$$(mc^2)^2 = W^2 - (pc)^2 \quad (109)$$

berechnet. Für ein Photon gilt also $m_\gamma = 0$, es ist masselos. Dies ist kein Widerspruch zu (104) und (107), da mit $v \rightarrow c$ auch $\gamma \rightarrow \infty$ gilt.

3.1.2 Photoeffekt

Ein klarer Beweis für die korpuskulare Natur der kurzwelligem elm. Strahlung liegt auch im sog. Photoeffekt vor. Er kann schon mit UV-Licht demonstriert werden. Bei Bestrahlung einer Metallplatte werden aus ihr Elektronen ausgelöst. Im Gegensatz zu den Erwartungen der klassischen Physik ist die kinetische Energie der Elektronen nicht proportional zur Intensität (I) des Lichts sondern zur Frequenz. Quantitativ gilt (Energiesatz!)

$$W_{\text{kin}} = \hbar\omega - W_0 , \quad (110)$$

worin W_0 die Bindungsenergie (oder Austrittsarbeit) der Elektronen im Metall ist. Für Wolfram gilt $W_0 = 4.5$ eV. In Übereinstimmung mit der korpuskularen Interpretation ist der Strom der ausgelösten Elektronen $\sim I$. Für die Lichtquantenhypothese von 1905 erhielt Einstein 1921 den Nobelpreis.

3.1.3 Compton Effekt

Wenn man die Röntgenbeugung als Streuung interpretiert, handelt es sich um eine gleichzeitige, phasengleiche Streuung an vielen Atomen, also eine kohärente Streuung. Bei einer Wellenlänge, die klein gegenüber dem Atomabstand wird, müssen sich in zunehmendem Maß Einzelstreuungsprozesse an Atomen beobachten lassen. Dies ist insbesondere bei großen Streuwinkeln der Fall, da die Beugung in Vorwärtsrichtung auftritt, $\sin \vartheta \sim \lambda/d$. In einem typischen Streuexperiment (Abb.19) wird eine dünne Graphitplatte von einem monoenergetischen Röntgenstrahl durchsetzt. Es wird z.B. mit einem Bragg-Spektrographen die $K_{\alpha,1}$ -Linie von Wolfram selektiert. Durch die Wahl eines monoenergetischen Strahls werden Beugungserscheinungen in einem Transmissionsexperiment zusätzlich unterdrückt.

Im Bild der klassischen Physik erwartet man, daß die einfallende Welle die Elektronen des Atoms zu Schwingungen anregt. Dadurch wird eine Kugelwelle gleicher Wellenlänge abgestrahlt. In einem großen Abstand R vom Elektron gilt für die abgestrahlte Intensität

$$I_{\text{out}} = \frac{\alpha \hbar}{4\pi c^2 R^2} a^2 \sin^2 \varphi . \quad (111)$$

Hierin ist a die Beschleunigung des Elektrons und φ der Winkel zwischen der Schwingungsrichtung des Elektrons (also der Richtung des elektrischen Feldes E der einfallenden Welle) und der Beobachtungsrichtung. Mit $dP = I_{\text{out}} dA$ wird die gesamte abgestrahlte Leistung zu

$$P = \frac{2\alpha \hbar a^2}{3c^2} \quad (112)$$

berechnet. Mit $a = eE/m$ und der einfallenden Intensität $I_{\text{in}} = c\varepsilon_0 E^2$ folgt wegen $\sigma = P/I_{\text{in}}$ schließlich

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\alpha \hbar c}{W_{0,e}} \right)^2 . \quad (113)$$

Für unser Beispiel entspricht der gemessene Wirkungsquerschnitt relativ gut dieser Vorhersage (Thomson-Querschnitt), dies gilt auch für den differentiellen Wirkungsquerschnitt (hier nicht berechnet). Bei zehnmal kleineren Wellenlängen liegen aber grobe Abweichungen vor. Besonders interessant war die Beobachtung von A.H. Compton (Nobelpreis 1927), daß in der gestreuten Welle abhängig vom Streuwinkel Θ eine Linie mit einer größeren Wellenlänge auftrat. Diese in der klassischen Physik nicht erklärable Tatsache, wird im Korpuskelbild sofort durch den Rückstoß des Elektrons erklärt. Wir untersuchen die Kinematik der Streuung von Photonen an ruhenden Elektronen. In der Gleichung

$$\gamma + e = \gamma' + e' \quad (114)$$

bedeuten die Symbole nun die Viererimpulsvektoren der einzelnen Teilchen, also z.B. $\gamma = (W_\gamma/c, \mathbf{p}_\gamma)$ und $e = (W_{0,e}/c, \mathbf{0})$. Mit

$$(\gamma - \gamma' + e)^2 = e'^2 = \frac{W_{0,e}^2}{c^2} \quad (115)$$

wird e' eliminiert und nach Ausmultiplikation der linken Seite ergibt sich

$$-W'_\gamma W_{0,e} + W_\gamma W_{0,e} - W_\gamma W'_\gamma + W_\gamma W'_\gamma \cos \Theta = 0 . \quad (116)$$

Hierbei haben wir die Regel

$$p_1 \cdot p_2 = \frac{W_{0,1}W_{0,2}}{c^2} - \mathbf{p}_1\mathbf{p}_2 \quad (117)$$

für das Skalarprodukt zweier Vierervektoren benutzt. ((109) ist der Spezialfall für $p_1 = p_2$.) Außerdem gilt noch $cp_\gamma = W_\gamma$ (und entsprechend für p'_γ).

Das Resultat

$$W'_\gamma = \frac{W_\gamma W_{0,e}}{W_{0,e} + W_\gamma(1 - \cos \Theta)} \quad (118)$$

läßt sich sofort in die berühmte Beziehung

$$\lambda' - \lambda = \Lambda(1 - \cos \Theta) \quad (119)$$

umrechnen, worin

$$\Lambda = \frac{2\pi\hbar c}{W_{0,e}} \quad (120)$$

die sog. Compton-Wellenlänge des Elektrons (2426.3 fm) ist. Durch (119) werden die experimentellen Befunde der Verschiebung der Wellenlänge glänzend erklärt.

Die abgeleiteten kinematischen Formeln beziehen sich auf die Streuung an freien Elektronen. Dies ist beim Vergleich der Bindungsenergien mit der Energie des einlaufenden Photons für die äußeren Elektronen der Hülle sicherlich eine sehr gute Näherung. Für die inneren Elektronen ist diese Näherung vor allem bei Elementen mit hohem Z nicht erlaubt. Der Rückstoß wird dann vom ganzen Atom aufgenommen und dies erklärt das Auftreten einer verschobenen und einer unverschobenen Linie im Spektrum der gestreuten Photonen. Auch die gemessenen Intensitätsverhältnisse zwischen beiden Linien lassen sich mit diesem Modell qualitativ gut verstehen.

Der differentielle und totale Wirkungsquerschnitt der Compton-Streuung wird durch die quantenmechanisch berechnete Formel von Klein und Nishina (Streuung an ruhenden Elektronen)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2\Lambda^2}{8\pi^2} \left(\frac{W'_\gamma}{W_\gamma}\right)^2 \left(\frac{W'_\gamma}{W_\gamma} + \frac{W_\gamma}{W'_\gamma} - \sin^2 \Theta\right) \quad (121)$$

sehr gut beschrieben.

3.1.4 Photonen und Gravitation

Die allgemeine Relativitätstheorie (A. Einstein) geht von der Feststellung aus, daß es nicht möglich ist, zwischen einer beschleunigten Bewegung und einer Bewegung im Schwerfeld zu unterscheiden. Daraus wird abgeleitet, daß Uhren im Schwerfeld langsamer laufen. Eine einfache „Ableitung“ gelingt mit Hilfe der Photonen. Ein Photon laufe im Schwerfeld der Erde nach oben. Für Kräfte parallel zur Bewegungsrichtung ist W/c^2 das richtige Maß für die gravitative Wirkung einer Energie. Daher gewinnt das Photon beim Erreichen der Höhe H die potentielle Energie

$$\Delta W_{\text{pot}} = \frac{W_\gamma}{c^2} gH \quad , \quad (122)$$

worin g die Erdbeschleunigung ist. Die zugehörige Frequenzänderung lautet

$$\frac{\Delta f}{f} = \frac{gH}{c^2} . \quad (123)$$

Diese Formel wurde hier für Photonen abgeleitet, sie gilt aber für alle Uhren. Mit Hilfe des Mößbauer-Effekts (Kernphysik) können Frequenzen mit einer Genauigkeit von $\Delta f/f \approx 10^{-14}$ gemessen werden. Es gelang, (123) in einem Turm von 100 m Höhe zu verifizieren.

Ein weiterer Effekt der Relativitätstheorie ist die Ablenkung von Lichtstrahlen im Schwerfeld von Sternen, das senkrecht auf der Richtung der Strahlen steht. Zunächst betrachten wir die Ablenkung materieller Teilchen. In der Kleinwinkelnäherung folgt aus (88)

$$\Theta = \frac{2GM}{bv^2} , \quad (124)$$

worin M die Masse des Sterns und G die Gravitationskonstante bedeuten. Wegen der Äquivalenz von Energie und Masse werden auch Photonen im Schwerfeld abgelenkt. Da in der letzten Formel die Masse des vorbeifliegenden Teilchens nicht auftritt, muß nur v durch c ersetzt werden. Das so erhaltene Newtonsche Ergebnis ist falsch. In der allgemeinen Relativitätstheorie ergibt die schwierige Rechnung

$$\Theta = \frac{4GM}{bc^2} . \quad (125)$$

Dieser höchst wichtige Faktor 2 wurde experimentell bestätigt. Numerisch gilt bei streifendem Einfall an der Sonnenoberfläche $\Theta = 1.74''$.

3.2 Materiewellen

3.2.1 Elektronenbeugung

Davisson und Germer untersuchten die Reflexion von Elektronen an einem Nickel-Einkristall. Auch hier wurden bei bestimmten Winkeln (Abb. 35) abhängig von der Energie der Elektronen die für Interferenzen typischen Intensitätsmaxima gefunden (Nobelpreis 1937 für C.J. Davisson). Die Lage der Maxima wird durch die Bragg-Bedingung (99) beschrieben, wenn man nach einem Vorschlag von de Broglie (Nobelpreis 1929) Elektronen mit dem Impuls $p = m\gamma v$ eine Materiewelle der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (126)$$

zuordnet. Diese Gleichung werden wir häufig in der Form

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (127)$$

benutzen, worin \mathbf{k} der Vektor der Wellenzahl ist, $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$. Der Impuls der Elektronen kann wieder einfach aus der Energie, d.h. aus der Beschleunigungsspannung errechnet werden. Für nichtrelativistische Elektronen formen wir daher (126) zu

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2W_{0,e}W_{\text{kin}}}} \quad (128)$$

um. Zu einer Spannung von 1kV gehört also eine Wellenlänge von 0.0388 nm! Die Anwendbarkeit von (99) bedeutet, daß auch der Brechungsindex von Materiewellen vernachlässigt werden kann. Dies ist bei Spannungen um 100 V nicht mehr der Fall.

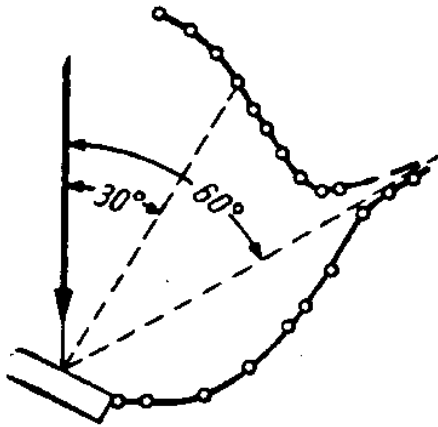


Abbildung 35: Polardiagramm der Intensitätsverteilung bei der Reflexion von Elektronen an einem Ni-Einkristall. Aus Schpolski, Atomphysik.

Für die Frequenz der Materiewellen gilt wie bei den Photonen

$$f = \frac{W}{h} \quad (129)$$

bzw.

$$\omega = \frac{m\gamma c^2}{\hbar} . \quad (130)$$

Damit ergibt sich für die Phasengeschwindigkeit

$$c_m = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v} \quad (131)$$

ein Ergebnis, das nicht im Widerspruch zur Relativitätstheorie steht, da der Signaltransport nicht mit der Phasengeschwindigkeit erfolgt. (Auch in den Hohlleitern der klassischen elektromagnetischen Wellentheorie gilt $c_{ph} > c$.) Im Gegensatz dazu hat die Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = v \quad (132)$$

das anschaulich erwartete Ergebnis.

3.2.2 Die Heisenbergschen Unschärferelationen

Die Zuordnung einer Welle zu einem Teilchen führt unvermeidlich zu Interferenzerscheinungen, wie wir gerade gesehen haben. Dazu gehört auch die Beugung. In einem Gedankenexperiment kann man die Beugung einer Materiewelle an einem einzelnen Spalt der Breite D betrachten (Abb.36). Das erste Minimum der Intensität liegt dann bei $\sin \Theta = \lambda/D$. Der Spalt steht entlang der y -Achse eines Koordinatensystems. Nach dem Spalt hat der Impuls, der vor dem Spalt nur die Richtung der z -Achse hatte, eine Komponente entlang der y -Achse, die durch $p_y = p_z \tan \Theta$ festgelegt ist. In der Kleinwinkelnäherung werden also die Werte des Impulses in der y -Richtung durch

$$p_y \approx \frac{h}{D} \quad (133)$$

oder $p_y D \approx h$ abgeschätzt. Es ist also grundsätzlich nicht möglich, den Impuls in y -Richtung beliebig genau festzulegen. Mit $D = 2\Delta y$ und $\Delta p_y = h/D$ folgt als minimales Produkt der Unsicherheiten

$$\Delta p_y \Delta y = \frac{h}{2} . \quad (134)$$

Unabhängig von der speziellen Herleitung gilt diese grundlegende Relation für alle Paare von Raum- und Impulskoordinaten. Im Beispiel der einfallenden ebenen Welle ist mit dem „scharfen“ Impuls in z -Richtung ein unendlicher Wert von Δz verknüpft. Das Teilchen kann mit gleicher Wahrscheinlichkeit irgendwo in der Welle gefunden werden.

In der Fehlertheorie ist es üblich, als Maß der Unsicherheit die mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert zu benutzen, z.B.

$$\sigma_y^2 = \langle (y - \langle y \rangle)^2 \rangle , \quad (135)$$

wobei $\langle y \rangle$ der Mittelwert von y ist. Für einen gleichmäßig ausgeleuchteten Spalt der Breite D gilt z.B. $\sigma_y = D/\sqrt{12}$. Erwartungswerte physikalischer Observablen werden in der nichtrelativistischen Quantenmechanik mit Hilfe der Schrödingergleichung berechnet. In den

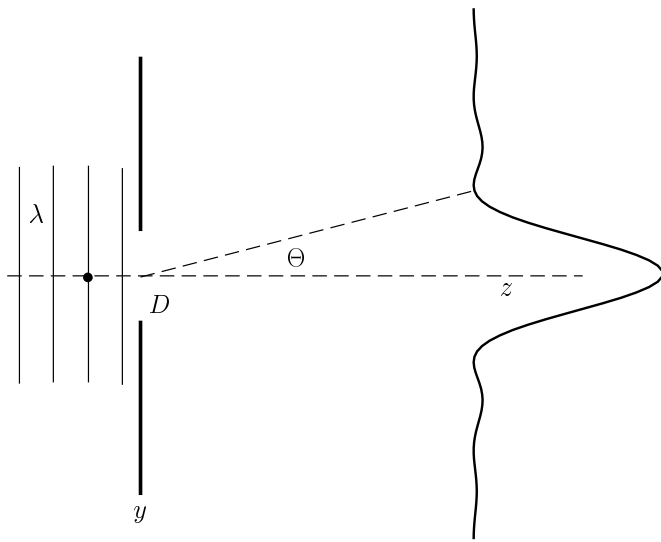


Abbildung 36: Beugung einer Materiewelle an einem Spalt.

Lehrbüchern der Quantenmechanik wird gezeigt, wie dadurch die naive Form (134) der Unschärferelation in die präzise Formulierung

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (136)$$

abgeändert wird. Unschärferelationen gelten für alle konjugierten Variablen der Hamiltonschen Mechanik also natürlich neben (136) auch für die Paare x, p_x und z, p_z . Ebenso sind die Unschärfen von Energie und Zeit über

$$\Delta W \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (137)$$

miteinander verknüpft.

In den Unschärferelationen gibt das Gleichheitszeichen die aufgrund der Quantenmechanik nicht unterschreitbare Grenze. Jede zusätzliche Fehlerquelle führt zu einem größeren Produkt. Die sog. quantenmechanischen Effekte lassen sich alle qualitativ durch richtige Anwendung der Unschärferelationen (und des Pauli-Prinzips) verstehen. Insofern bilden diese die gedankliche Basis der Quantenmechanik. Wir geben zwei Beispiele:

Die Stabilität der Atome: Das klassische Modell des Wasserstoffatoms besteht aus einem Elektron, welches durch die Coulombkraft gebunden auf einer Kreisbahn um den Kern, das Proton, läuft. Aus dem Kräftegleichgewicht

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{\alpha \hbar c}{r^2} \quad (138)$$

folgt für die Summe von kinetischer und potentieller Energie

$$W = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{\alpha \hbar c}{r} = -\frac{\alpha \hbar c}{2r} \quad (139)$$

In dieser Gleichung sind alle Werte von r möglich. Elektronen auf Kreisbahnen strahlen aber elektromagnetische Wellen ab, und so wird das Elektron nach innen spiralen, das H-Atom ist instabil. Die von einem Elektron auf einer Kreisbahn abgestrahlte Leistung kann ebenfalls aus (112) entnommen werden, wenn für a die Kreisbeschleunigung eingesetzt wird. Wir erhalten daher

$$P = \frac{2\alpha \hbar r^2 \omega^4}{3c^2} . \quad (140)$$

Aus (138) wird

$$\omega^2 = \frac{\alpha \hbar c}{mr^3} \quad (141)$$

berechnet. Einsetzen in (140) gibt

$$P = (2\alpha \hbar c)^3 \frac{c}{3W_{0,e}^2 r^4} \quad (142)$$

mit dem numerischen Resultat $P \approx 4 \cdot 10^{11}$ eV/s bei $r = 0.05$ nm. Die diesem Radius entsprechende Energie von ca. 15 eV ist also in $5 \cdot 10^{-11}$ s aufgezehrt. In Wirklichkeit erfolgt der Kollaps eines Wasserstoffatoms in der klassischen Physik noch viel schneller ($\approx 10^{-16}$ s), da beim Spiralen nach innen die abgestrahlte Leistung $\sim r^{-4}$ ansteigt.

Der entscheidende Fehler der klassischen Rechnung ist die Annahme definierter Bahnen mit scharfen Werten von r und p . In der Quantenmechanik gibt es keine definierten Bahnen. Mit der (etwas willkürlichen) Abschätzung $pr = \hbar$ wird (139) durch

$$W = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{\alpha \hbar c}{r} \quad (143)$$

ersetzt. Diese Energie hat ein Minimum bei dem Bohrschen Radius

$$a_B = \frac{\hbar c}{\alpha W_{e,0}} \quad (144)$$

mit dem Zahlenwert 0.052923 nm. Die minimale Energie beträgt

$$W_{\min} = -\frac{1}{2}\alpha^2 W_{e,0} \quad (145)$$

mit dem Zahlenwert -13.606 eV.³ Strahlungsübergänge aus einem energetisch höher gelegenen Zustand in den Grundzustand sind erlaubt.

Der Tunneleffekt: Ein Teilchen laufe entlang der z -Achse auf einen Potentialwall zu, der in Abb. 37 der Einfachheit halber rechteckförmig angenommen wurde. In der klassischen Physik erfolgt immer eine Reflexion am Wall, solange $W_{\text{kin}} < V_0$ gilt. In der Quantenmechanik kommt es auf die Dicke des Potentialwalls an. In der Zeit $\Delta t = d/v$, die das Teilchen zum Durchqueren des Walls braucht sind Energiefuktuationen $\Delta W = \hbar/(2\Delta t)$ möglich. Es werden also Teilchen rechts vom Wall gefunden werden, falls

$$(V_0 - W_{\text{kin}}) \frac{d}{v} \leq \frac{\hbar}{2} \quad (146)$$

erfüllt ist. Dieser Effekt wird häufig beobachtet, z.B. beim „Tunneln“ von Elektronen durch eine Oberfläche, α -Zerfall der Kerne etc.

³Eine typische atomare Energieeinheit ist daher $R_y = 13.606$ eV (Rydberg).

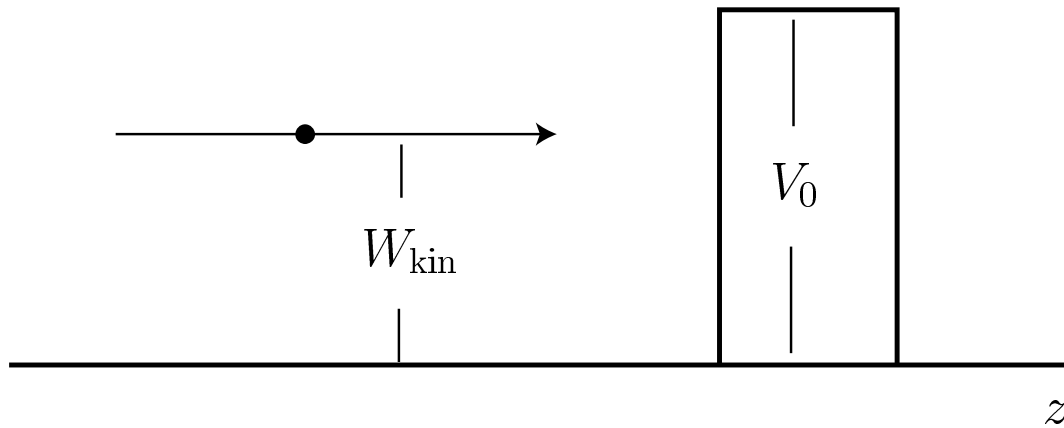


Abbildung 37: Unschärferelation und Tunneleffekt.

3.2.3 Prinzipien der Quantenmechanik

Die in den vorangegangenen Abschnitten dargestellten Phänomene werden oft als „Welle-Teilchen-Dualismus“ bezeichnet und eine Art klassisches Verständnis quantenmechanischer Effekte läßt sich so von Fall zu Fall erreichen. Dies ist aber nicht wirklich sinnvoll. Die Quantenmechanik erlaubt eine einheitliche Beschreibung des Verhaltens von Photonen und Elektronen. Die klassischen Bewegungsgesetze und Gesetze der Wellenausbreitung können aus den Gesetzen der Quantenmechanik abgeleitet werden, falls man in Bereiche des Phasenraums $\Delta p \Delta x$ übergeht, in denen \hbar vernachlässigt werden kann, in denen also die Unschärferelationen keine Rolle mehr spielen. Diesen Beweis führen wir hier nicht durch, sondern geben nur das Grundprinzip der Quantenmechanik in einer möglichst einfachen Form an. Es läßt sich am Beispiel des Doppelspalt-Versuchs für Elektronen formulieren (Abb 38). In diesem Gedankenexperiment treffen Elektronen von links auf zwei dünne Spalte S_1, S_2 im Abstand d und werden in der Ebene des Schirms z.B. über die Schwärzung eines Films nachgewiesen. Zusätzlich gibt es einen oder mehrere Geigerzähler. Dieses Instrument beweist, daß immer einzelne Elektronen auf den Schirm auftreffen. Man kann die Intensität der Quelle so einstellen, daß innerhalb der Zeitauflösung des Zählers immer nur ein Elektron zwischen Quelle und Schirm ist. Wenn jeweils einer der Spalte verschlossen wird, sind die Intensitätsverteilungen auf dem Schirm diffus, etwa in der angedeuteten Art. Wenn beide Spalte offen sind, gibt es jedoch ein klares Interferenzmuster, das (in großer Entfernung) dem gewohnten Bild der Optik

$$I = I_0(1 + \cos(kd \sin \Theta)) \quad (147)$$

mit $k = |\mathbf{k}|$ aus (127) entspricht. Zur quantitativen Beschreibung dieser Interferenz wird einem Elektron, das durch Spalt 1 an eine Stelle y des Schirms gelangt die komplexe Wahrscheinlichkeitsamplitude A_1 zugeordnet. Ein Elektron, das durch Spalt 2 an die gleiche Stelle gelangt, wird durch A_2 beschrieben. Für die Intensität gilt

$$I \sim |A_1 + A_2|^2 \quad (148)$$

Es macht keinen Sinn zu versuchen, zu verstehen, wie ein Elektron, das alleine im Apparat ist, „weiß“, durch welchen Spalt es gehen muß, um das Interferenzmuster zu erzeugen. Jeder

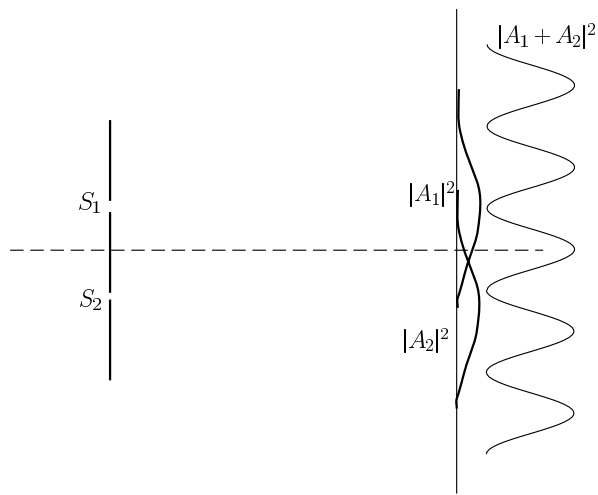


Abbildung 38: Der Doppelspalt-Versuch in der Quantenmechanik.

Versuch, das Wirken der quantenmechanischen Gesetze etwa durch Detektoren im Raum hinter den Spalten aufzuklären, zerstört das Interferenzmuster und es gilt

$$I \sim |A_1|^2 + |A_2|^2 . \quad (149)$$

Dies wird wieder durch Diskussion der Unschärferelation klar. Wir verwenden maximale Fehlerabschätzungen. Um festzustellen, ob eine Elektron durch Spalt 1 oder 2 gegangen ist, muß der Ort des Elektrons mit einer Genauigkeit $\Delta y < d/2$ gemessen werden. Jede Messung erzeugt aber einen Rückstoß auf das Elektron. Dieser Rückstoßimpuls darf das Interferenzmuster nicht zerstören, also z.B. aus einem Maximum ein Minimum machen. Es muß also $\Delta p_y \ll \lambda p/(2d)$ und insgesamt

$$\Delta p_y \Delta y \ll \frac{h}{4} \quad (150)$$

im Widerspruch zur (naiven Form) der Unschärferelation gelten.

3.2.4 Die Schrödingergleichung

Wir untersuchen nun die Wellengleichung für die Materiewellen eines nichtrelativistischen Elektrons (oder anderen Teilchens), die von Erwin Schrödinger (Nobelpreis 1933) gefunden wurde. Zunächst werden freie Teilchen betrachtet. Die Welle sei mit Ψ bezeichnet. Die Wellenlänge ist durch die de Broglie Beziehungen (126) oder (127) festgelegt, die Frequenz wird aber jetzt mit der nichtrelativistischen kinetischen Energie verknüpft

$$W = W_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \hbar\omega \quad . \quad (151)$$

Wie üblich sind als Beschreibung einer auf der x -Achse nach rechts laufenden Welle die vier Alternativen

$$\psi_0 \cos(kx - \omega t) \quad \psi_0 \sin(kx - \omega t) \quad \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \quad \psi_0 e^{-i(kx - \omega t)} \quad (152)$$

mit

$$\frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \hbar\omega \quad (153)$$

denkbar. Die gesuchte Differentialgleichung wird daher *eine* Differentiation nach der Zeit und zwei nach dem Ort enthalten

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad . \quad (154)$$

Damit scheiden die reellen Lösungen aus (!!) und man kann eine, aber nicht beide komplexen Lösungen auswählen. Wir wählen

$$\Psi = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \quad . \quad (155)$$

Damit wird $\alpha = i\hbar/(2m)$ und die Schrödinger-Gleichung lautet für ein freies Teilchen in einer Dimension

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad . \quad (156)$$

Einsetzen der Lösung (155) gibt unter Verwendung von (127) und (151)

$$W\Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi \quad . \quad (157)$$

Die Schrödinger-Gleichung kann also als Energiesatz in Operatorform

$$W_{\text{op}} \Psi = \frac{p_{\text{op}}^2}{2m} \Psi \quad (158)$$

aufgefaßt werden, wobei offenbar

$$W_{\text{op}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (159)$$

und

$$p_{x,\text{op}}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (160)$$

anzusetzen ist.

Eine Erweiterung auf drei Dimensionen ist nun ohne weiteres möglich. Die Einheitsvektoren in x, y, z -Richtung werden mit $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ bezeichnet. Ausgehend von

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k} \right) \quad (161)$$

gilt mit

$$\mathbf{p}_{\text{op}}^2 = -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (162)$$

für die Schrödinger-Gleichung in drei Dimensionen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \quad (163)$$

Für Teilchen in einem äußeren Feld mit der potentiellen Energie $W_{\text{pot}}(\mathbf{r}, t)$ wird auch wieder der Energiesatz

$$W = \frac{p^2}{2m} + W_{\text{pot}} \quad (164)$$

in die Operatorform

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + W_{\text{pot}} \Psi \quad (165)$$

verwandelt. Die Kurzform der Schrödinger-Gleichung lautet nun

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_{\text{op}} \Psi \quad (166)$$

worin der Hamilton-Operator H_{op} durch

$$H_{\text{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W_{\text{pot}} \quad (167)$$

definiert ist. Wir werden fast nur Probleme behandeln, in denen das Potential nicht von der Zeit abhängt, $W_{\text{pot}} = V(x, y, z)$. Mit dem Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iWt/\hbar} \quad (168)$$

wird die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z) + V \psi(x, y, z) = W \psi(x, y, z) \quad (169)$$

abgeleitet, worin W jetzt eine Konstante ist (Erhaltungssatz der Energie).

Mathematisch ist die Schrödinger-Gleichung gerade keine Wellengleichung, sondern vom Typ der Differentialgleichungen für die Wärmeleitung. In Übereinstimmung mit den in Abschnitt 3.2.3 entwickelten Prinzipien sind die Lösungen komplexe Funktionen. In der klassischen Physik benutzt man komplexes Rechnen nur als mathematischen Trick. In der Quantenmechanik haben die komplexen Ψ -Funktionen eine wichtige physikalische Bedeutung. Sie repräsentieren die Wahrscheinlichkeitsamplitude, das Teilchen am Ort \mathbf{r} zu finden. Genauer: die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumenelement dV zu finden, ist durch

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV \quad (170)$$

bestimmt. Daraus folgt die Normierungsbedingung

$$\int_V \Psi^* \Psi dV = 1 . \quad (171)$$

Als erstes Beispiel betrachten wir die ebene Welle

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(kx - \omega t)} . \quad (172)$$

Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen irgendwo auf der x -Achse zu finden, ist in Übereinstimmung mit der Unschärferelation für jeden Ort gleich groß. Jetzt wird auch klar, daß in der Wahl des Zusammenhangs von Frequenz und Energie eine Freiheit besteht. Mit der ursprünglichen Wahl nach de Broglie $W = W_{\text{kin}} + W_0 = hf$ werden die Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit einem Phasenfaktor $\exp(iW_0 t/\hbar)$ multipliziert, der bei der Betragsbildung herausfällt.

Neben der in Abschnitt 3.2.3 entwickelten Rolle als Wahrscheinlichkeitsamplitude dienen die Ψ -Funktionen auch zum Berechnen der Erwartungswerte von Observablen. Nach der Wahrscheinlichkeitstheorie gilt für den Mittelwert der Ortskoordinate

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_V \mathbf{r} dP = \int_V \mathbf{r} \Psi^* \Psi dV , \quad (173)$$

was man auch als

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_V \Psi^* \mathbf{r} \Psi dV \quad (174)$$

schreiben kann. Es ist jedoch genau diese Form, für die man zeigen kann, daß sie zur Berechnung des Mittelwerts aller Observablen gilt,

$$\langle M \rangle = \int_V \Psi^* M_{\text{op}} \Psi dV . \quad (175)$$

Der Unterschied wird wichtig, falls M eine Ableitung enthält, also z.B.

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int_V \Psi^* (-i\hbar \nabla) \Psi dV . \quad (176)$$

Die statistische Interpretation der Quantenmechanik wurde auch von vielen bedeutenden Physikern (Einstein, Schrödinger) nicht ohne Widerspruch hingenommen. In der sog. Kausalitätsdebatte wird aber häufig übertrieben. Die Ψ Funktion verhält sich als Lösung einer Differentialgleichung genauso kausal wie alle entsprechenden Größen der klassischen Physik. Es ist aber offenbar ein Naturgesetz, daß die Werte von Ort und Impuls nur im Grenzfall der klassischen Physik einer Differentialgleichung folgen.

3.2.5 Eigenwerte und Eigenfunktionen

Lösungen der Schrödingergleichung $\Psi = \psi \exp(-iWt/\hbar)$ zu zeitunabhängigen Potentialen nennen wir Eigenfunktionen, da die zeitabhängige Gleichung

$$H_{\text{op}} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi e^{-iWt/\hbar}) = W \Psi \quad (177)$$

eine Eigenwertsgleichung ist. Dies gilt natürlich auch für die zeitunabhängige Gleichung

$$H_{\text{op}}\psi = W\psi \quad (178)$$

Der Erwartungswert der Energie ist gleich dem Eigenwert

$$\langle W \rangle = \int_V \Psi^* H_{\text{op}} \Psi dV = W \quad (179)$$

wie es auch sein muß. Die Ψ -Funktionen werden den erlaubten Zuständen des Systems zugeordnet. Diese Zustände sind Eigenzustände der Energie. Gleichzeitig können die Ψ -Funktionen aber auch noch Eigenfunktionen anderer Operatoren sein. Als einfachstes Beispiel betrachten wir wieder die ebene Welle (172) eines Teilchens mit dem Impuls $p_x = \hbar k$ als Lösung der freien Schrödinger-Gleichung. Sie ist natürlich eine Eigenwertslösung zum Hamiltonoperator mit dem Eigenwert $W = p^2/(2m)$. Gleichzeitig ist sie aber auch eine Eigenfunktion zum Impulsoperator

$$p_{x,\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (180)$$

mit

$$p_{x,\text{op}}\Psi = \hbar k\Psi \quad (181)$$

Der Impulsoperator hat den Erwartungswert

$$\langle p_{x,\text{op}} \rangle = p_x = \hbar k \quad (182)$$

mit der (quadratischen) Streuung $\sigma_p^2 = \langle p_{x,\text{op}} - \hbar k \rangle^2 = 0$ da

$$\int_V \Psi (p_{x,\text{op}} - \hbar k)^2 \Psi^* dV = 0 \quad (183)$$

ergibt. Eigenfunktionen haben also „scharfe“ Erwartungswerte. Andererseits folgt aus der gleichen Rechnung für den Ortsoperator $\langle x \rangle = 0$ mit unendlicher Streuung, wie es wieder nach der Unschärferelation sein muß.

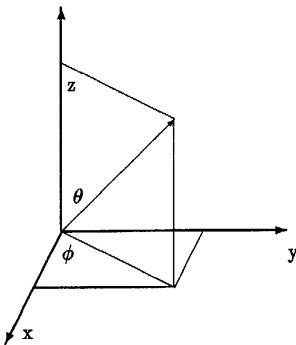


Abbildung 39: Polarkoordinaten und kartesische Koordinaten. Beachten Sie, daß im Text die Symbole Θ und ϕ zur Bezeichnung der Winkel verwendet werden.

Eine besonders wichtige Klasse von Eigenzuständen sind die Eigenzustände des Drehimpulsoperators. Der Bahndrehimpuls ist in der klassischen Mechanik durch das Vektorprodukt

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (184)$$

definiert. In der Quantenmechanik wird diese Definition in die Operatorform

$$\mathbf{L}_{\text{op}} = \mathbf{r}_{\text{op}} \times \mathbf{p}_{\text{op}} \quad (185)$$

mit den Komponenten⁴

$$\begin{aligned} L_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ L_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ L_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (186)$$

übersetzt. Beim Übergang von einem kartesischen zu einem Polarkoordinatensystem (Abb. 39) gelten die Transformationen

$$\begin{aligned} x &= r \sin \Theta \cos \phi \\ y &= r \sin \Theta \sin \phi \\ z &= r \cos \Theta \end{aligned} \quad (187)$$

und daher erhalten wir

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \cot \Theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ L_y &= i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \cot \Theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} . \end{aligned} \quad (188)$$

Zum Nachrechnen benutzt man Relationen der Art

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \phi} &= \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \phi} \\ &= \frac{\partial F}{\partial x} (-r \sin \Theta \sin \phi) + \frac{\partial F}{\partial y} (r \sin \Theta \cos \phi) \\ &= x \frac{\partial F}{\partial y} - y \frac{\partial F}{\partial x} \end{aligned} \quad (189)$$

und hat damit schon den Beweis für L_z geführt. Zu den drei Operatoren des Drehimpulses lassen sich keine gemeinsamen Eigenfunktionen finden! Es gibt aber Funktionen, die gemeinsame Eigenfunktionen zur quadratischen Form $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, oder

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (190)$$

⁴das op Subskript wird der Einfachheit halber weggelassen.

l	m	$Y_{l,m}$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \Theta$
1	1	$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \Theta e^{i\phi}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \Theta - \frac{1}{2}\right)$
2	1	$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \Theta \cos \Theta e^{i\phi}$
2	2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \Theta e^{i2\phi}$

Tabelle 2: Tabelle der Kugelflächenfunktionen.

und zu L_z sind. Das heißt, in der Quantenmechanik können nur das Quadrat des Betrags des Drehimpulses und eine seiner Komponenten gleichzeitig scharfe Werte annehmen. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind die Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\Theta, \phi)$. Sie sind definiert als

$$Y_{l,m}(\Theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{l,m}(\cos \Theta) e^{im\phi}, \quad (191)$$

worin die $P_{l,m}$ die orthonormierten assoziierten Legendre Funktionen sind. Diese sind wiederum (mit $z = \cos \Theta$) definiert als

$$P_{l,m} = (1-z^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}} P_l(z) \quad (192)$$

mit den diskreten Werten $l = 0, 1, 2, \dots$, wobei zu jedem l die $2l+1$ Werte $m = -l, -l+1, \dots, l$ von m erlaubt sind. Die $P_l(z)$ sind die Legendre Polynome, die für $l = 0, 1, 2, 3$ die Gestalt $1, z, (3z^2/2 - 1/2), (5z^3/2 - 3z/2)$ annehmen.

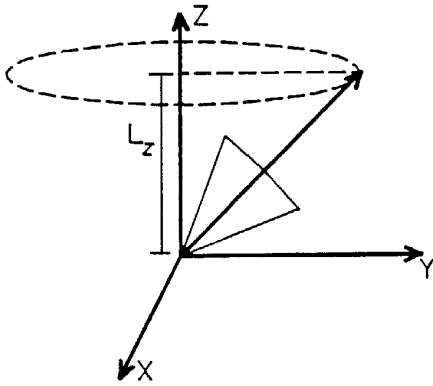


Abbildung 40: Kreiselmotors des Drehimpulses in der Quantenmechanik.

Die Eigenwertgleichungen lauten

$$L^2 Y_{l,m} = l(l+1) \hbar^2 Y_{l,m} \quad (193)$$

und

$$L_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} . \quad (194)$$

In der Quantenmechanik kann also der Betrag des Bahndrehimpulses nur diskrete Werte

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (195)$$

haben! Bei gegebenem L gibt es für L_z die Einstellmöglichkeiten

$$L_z = m\hbar \quad m = -l, -l+1, \dots, l , \quad (196)$$

während die Komponenten L_x und L_y unbestimmt bleiben. Dies ist wiederum eine Folge der Unschärferelationen, da auch L_z und ϕ kanonisch konjugierte Variablen sind. Eine maximale Streuung von ϕ bedeutet, daß L_x und L_y unbestimmbar sind. Diese Zusammenhänge kann man sich am Modell des rotierenden Kreisels (Abb. 40) klar machen.

Die Tabelle 2 enthält die Kugelflächenfunktionen bis $l = 2$. Sie kann mit Hilfe der auf der *website* der Vorlesung zu findenden MAPLE-Routine leicht nachgerechnet werden. Ebenso erlaubt dieses Programm, die Normierung dieser Funktionen zu verifizieren. Die Normierungsbedingung ist als Spezialfall ($l' = l, m' = m$) in den Orthogonalitätsrelationen

$$\int Y_{l',m'}^* Y_{l,m} d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (197)$$

enthalten. Außerdem genügen die Kugelflächenfunktionen den wichtigen Symmetriebeziehungen

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{l,m}^* . \quad (198)$$

4 Atombau und Spektrallinien I, das H -Atom

4.1 Linienspektren der Atome

Mit Hilfe von Spektralapparaten kann das Spektrum leuchtender Körper analysiert werden. Zur Verwendung kommen Prismen und Gitter. Mit Gitterspektrographen kann eine sehr hohe Auflösung erzielt werden. Sie sind außerdem zur Analyse im ultravioletten und infraroten Bereich geeignet. Bei einem Gitter mit N beleuchteten Strichen und einer Beobachtung des Spektrums in der Ordnung m gilt (Physik III)

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda} = \frac{1}{Nm} . \quad (199)$$

Die Akzeptanz, d.h. der gleichzeitig beobachtbare Wellenlängenbereich ist durch

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda}{m} \quad (200)$$

bestimmt, also ist die Wahl einer möglichst hohen Ordnung nicht unbedingt zu empfehlen. Für sehr hohe Auflösungen bei kleiner Akzeptanz werden Interferometer (Fabry-Perot) benutzt.

Feste Körper zeigen ein kontinuierliches Spektrum, leuchtende Gase dagegen ein für jedes Element verschiedenes Linienspektrum. In der Spektralanalyse macht man sich diese charakteristische Eigenschaft der Elemente zu Nutze. Da in Gasen der Abstand der einzelnen Atome sehr groß ist, muß das Auftreten von Linien aus dem Aufbau der einzelnen Atome erklärt werden. Die natürliche Erklärung für das Auftreten von Linien haben wir schon bei der Behandlung der Röntgenstrahlung eingeführt. Jedes Atom kann sich nur in ganz bestimmten angeregten Zuständen mit den Energien W_m, W_n befinden. Beim Übergang von einem höheren zu einem niedrigeren Niveau ($m > n$) wird Licht mit der Frequenz

$$f = \frac{W_m - W_n}{h} \quad (201)$$

erzeugt, da bei Vernachlässigung des Rückstoßimpulses das ausgestrahlte Photon die Energie $W_\gamma = hf = \hbar\omega$ hat. Der Energiesatz gilt natürlich auch in Absorption, experimentell wird dies auf zwei Arten demonstriert bzw. nutzbar gemacht.

a) Resonanzfluoreszenz. Das Licht einer Quelle durchquert ein kühles Gas desselben Elements. Die emittierten Photonen können absorbiert und re-emittiert werden. Das durchgehende Licht wird also geschwächt und das fluoreszierende Gas strahlt in alle Richtungen.

b) Absorptionsspektren. Licht aus einer Quelle mit kontinuierlichem Spektrum durchstrahlt gasförmige Materie. Dann werden die zu dem Material gehörigen Linien aus dem Dampf absorbiert. Da die Wahrscheinlichkeit der Emission in eine ganz bestimmte Richtung relativ gering ist, beobachtet man beim Aufblick auf die Quelle ein kontinuierliches Spektrum, dem ganz bestimmte Linien fehlen. Die Beobachtung der Absorptionsspektren diente zur Aufklärung der chemischen Beschaffenheit der Sternatmosphären (Fraunhofer-Spektren).

Im Franck-Hertz- Versuch wird demonstriert, daß die diskreten Energiezustände eines Atoms auch durch Elektronenstoß angeregt werden können, d.h. daß die Zustände unabhängig

von der Absorption bzw. Emission von Photonen existieren. In einer Elektronenröhre (Abb. 41) wird die Abhängigkeit des Stromes von der Anodenspannung U_A gemessen. Die Röhre ist mit Quecksilberdampf geringen Druckes (100 Pa) gefüllt. Die Kennlinie zeigt nun charakteristische Maxima, deren Abstand hier 4.9 V beträgt. Die Interpretation ist klar. Elektronen können bei ihrem Weg durch das Gas ihre Energie teilweise (Teilchen 1) oder ganz (Teilchen 2) auf Gasatome übertragen. Elektronen mit kinetischen Energien, die kleiner sind als die für Quecksilber charakteristische Anregungsenergie $W_1 = 4.9 \text{ eV}$ werden elastisch gestreut, ändern also nur ihre Richtung und können im elektrischen Feld weiter Energie aufnehmen (Teilchen 1). Beim Erreichen und Überschreiten der Resonanzenergie W_1 geben sie ihre Energie an das Quecksilberatom ab. Der Strom sinkt ab, da die Elektronen geringer Energie nicht die Anode erreichen können, sondern von dem Gitter (mit dem Potential 0.5 V) abgesaugt werden (Teilchen 2). Bei genügender Spannung der Anode wiederholt sich dieser Vorgang mehrmals. Mit verbesserten Methoden gelang es, auch mehr als eine Anregungsstufe nachzuweisen.

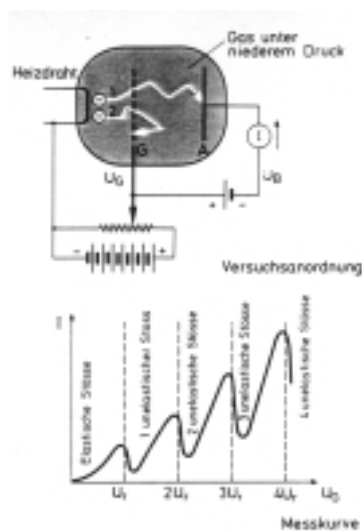


Abbildung 41: Versuch von Franck und Hertz zum Nachweis der diskreten Anregungsstufen im Elektronenstoß.

Das Spektrum des Wasserstoffs. Das Spektrum des Wasserstoffs ist besonders interessant, weil Wasserstoff das einfachste Atom ist. Balmer erkannte 1885, daß es im Spektrum Linien gibt, deren Wellenlänge der empirisch gefundenen Formel

$$\lambda = B \frac{m^2}{m^2 - 4} \quad (202)$$

folgen, worin B eine Konstante ist ($B = 364.56 \text{ nm}$) und m die Werte 3, 4... durchläuft. Die Erklärung ist die folgende: Im Wasserstoff gibt es Anregungszustände

$$W_n = \frac{-R_y}{n^2} \quad (203)$$

also werden Photonen der Frequenz

$$f = \frac{W_m - W_n}{h} \quad (204)$$

mit $n = 2$ und $m = 3, 4, \dots$ für die Balmer Serie ausgestrahlt. Auch die Serien zu $n = 1$ (Lyman), $n = 3$ (Paschen) und $n = 4$ (Bracket) wurden experimentell verifiziert. Die Festlegung eines negativen Vorzeichens in (203) entspricht der Konvention, Bindungszustände mit negativen Energien zu charakterisieren. Gleichzeitig wird die Balmersche Konstante B direkt auf (145) zurückgeführt.

Es liegt nahe, die Anregungszustände eines Atoms mit den Zuständen der Elektronenhülle, beim Wasserstoff also mit den möglichen Zuständen des Elektrons zu verknüpfen. Auch bei den anderen Elementen erwarten wir, daß die Spektren durch die am schwächsten gebundenen äußeren Elektronen bzw. das äußerste Elektron (Leuchtelektron) dominiert werden.

In der klassischen Physik werden die Schwingungen ausgedehnter Körper durch die Überlagerung von Wellen interpretiert. Für diese Schwingungen sind nur ganz bestimmte Frequenzen erlaubt, die bei dreidimensionalen Problemen durch 3 Quantenzahlen charakterisiert werden. Wenn man diese Ideen auf die Materiewelle des Leuchtelektrons überträgt, wird wegen des Zusammenhangs von Frequenz und Energie dieser Wellen sofort klar, daß die energetisch erlaubten Zustände eines Atoms durch 3 Quantenzahlen – wir nennen sie n, l, m – beschrieben werden. Jede weitergehende anschauliche Diskussion von stehenden Materiewellen (z.B. Wellen auf Kreisbahn) führt aber zu falschen Folgerungen und sollte nicht benutzt werden. Das liegt auch daran, daß die Schrödingergleichung keine Wellengleichung ist.

4.2 Das Elektron im Coulombfeld

Wir suchen nun nach Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (169) für ein Teilchen in einem Kraftfeld mit einer potentiellen Energie $V(r)$.

Der Laplace-Operator hat in Polarkoordinaten die Form

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (205)$$

und deshalb gilt

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{L}_{\text{op}}^2}{\hbar^2 r^2} . \quad (206)$$

Daher machen wir den Produktansatz⁵ $\psi(r, \Theta, \phi) = R(r)Y_{l,m}(\Theta, \phi)$, der zur Differentialgleichung

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = WR \quad (207)$$

führt. Den Term $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ nennt man Zentrifugalbarriere. Er taucht irgendwie überraschend auf, ist aber nötig, da die Energie W auf der rechten Seite auch Anteile enthält, die mit der Kinematik der Kreisbewegung verknüpft sind. Klassisch gilt

$$W_{\text{Bahn}} = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = \frac{L^2}{2mr^2} . \quad (208)$$

⁵In diesem Abschnitt bezeichnet m die Elektronenmasse, die Quantenzahl der Komponente L_z des Drehimpulses und eine laufende Hauptquantenzahl. Dies sollte nicht zu Missverständnissen führen, da der Kontext jeweils völlig unterschiedlich ist.

Daher fällt der Zentrifugalterm weg, wenn man auf der rechten Seite die Energie in $W = W_{\text{Bahn}} + W(r)$ zerlegt. Mit dem Ansatz

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (209)$$

ist nur noch die relativ einfach aussehende Differentialgleichung

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{2W_0}{\hbar^2 c^2} (W - V) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0 \quad (210)$$

zu lösen. Diese Gleichung hat aber nur für das Coulombpotential

$$V = \frac{-\alpha \hbar c Z}{r} \quad (211)$$

und das Oszillatorpotential $V = kr^2/2$ analytische Lösungen⁶. Für alle anderen Potentiale muß sie numerisch integriert werden, was aber heute kein Problem mehr darstellt. Die analytischen Lösungen für das Coulomb-Potential sehen ziemlich kompliziert aus. Wie immer, ist es sinnvoll mit einer dimensionslosen Variablen anstelle von r zu arbeiten. Die geeignete Skala in einem Atom ist der verallgemeinerte Bohrsche Radius $a_Z = a_B/Z$ in einem Coulombfeld der Kernladung Z . Mit der Definition

$$\rho = \frac{r}{a_Z} \quad (212)$$

lauten die Lösungen für $R(r)$ mit

$$N = \left(\frac{1}{a_Z} \right)^{3/2} \quad (213)$$

nun

$$R_{n,l} = N \left(\frac{2^{2l+2} (n-l-1)!}{n^{4+2l} (n+l)!} \right)^{1/2} e^{-\rho/n} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho/n) . \quad (214)$$

Hierin werden mit $L_q^p(\rho)$ die sog. assoziierten Laguerre-Polynome bezeichnet, die tabelliert sind oder z.B. in MAPLE mit dem Befehl `expand(LaguerreL(q, p, rho))` aufgerufen werden können. Das alles sieht viel komplizierter aus, als es ist. Zunächst einmal halten wir fest, daß die $R_{n,l}$ durch die Hauptquantenzahl

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (215)$$

und für jedes n durch die Drehimpulsquantenzahl

$$l = 0, 1, \dots, n-1 \quad (216)$$

charakterisiert werden. Die zu einer Lösung

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l} Y_{l,m} \quad (217)$$

gehörigen Energie-Eigenwerte des Hamilton-Operators lauten

$$W_n = -\frac{Z^2 R_y}{n^2} . \quad (218)$$

⁶Angegeben wird hier die potentielle Energie.

Damit ist (203) bewiesen. Die Eigenwerte h 'angen nur von der Hauptquantenzahl n ab. Zu jedem n gibt also es wegen der möglichen Werte von l und m

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (219)$$

Eigenzustände mit gleichem Wert von W_n . Diese sog. „Entartung“ ist für m unmittelbar klar. Bei reinen Zentralkräften ist keine Richtung ausgezeichnet, daher kann W nicht von der Quantenzahl m abhängen. Die Entartung in l ist jedoch ein zufällige Eigenschaft des Coulombpotentials. Sie gilt nur für $V \sim 1/r$, aber nicht für andere Zentralpotentiale.

Um zu verifizieren, daß (218) der richtige Eigenwert ist, formen wir (210) zur Differentialgleichung

$$\rho \frac{d^2 R}{d\rho^2} + 2 \frac{dR}{d\rho} + R \left(2 - \frac{\rho}{n^2} - \frac{l(l+1)}{\rho} \right) \quad (220)$$

für $R(\rho)$ um. Mit MAPLE läßt sich wieder einfach verifizieren, daß die Funktionen der Tabelle 3 diese Gleichung erfüllen.

Wir diskutieren nun die Lösungen $\psi_{n,l,m}$ noch etwas genauer. Mit den in (214) angegebenen Vorfaktoren sind die $R_{n,l}$ entsprechend

$$\int |R_{n,l}|^2 r^2 dr = 1 \quad (221)$$

normiert und damit wird die richtige Normierung

$$\int \psi^* \psi dV = \int |R_{n,l}|^2 r^2 dr \int |Y_{l,m}|^2 d\Omega = 1 \quad (222)$$

sichergestellt. Die Definitionsgleichung (214) der radialen Funktionen sieht kompliziert aus. Die Funktionen selbst werden aber für die niedrigsten Werte von n und l recht einfach. Sie sind in Tabelle 3 zusammengestellt. In Abb.42 sind zwei in Abhängigkeit von ρ graphisch dargestellt. Alle Funktionen mit $l \neq 0$ verschwinden bei $r = 0$.

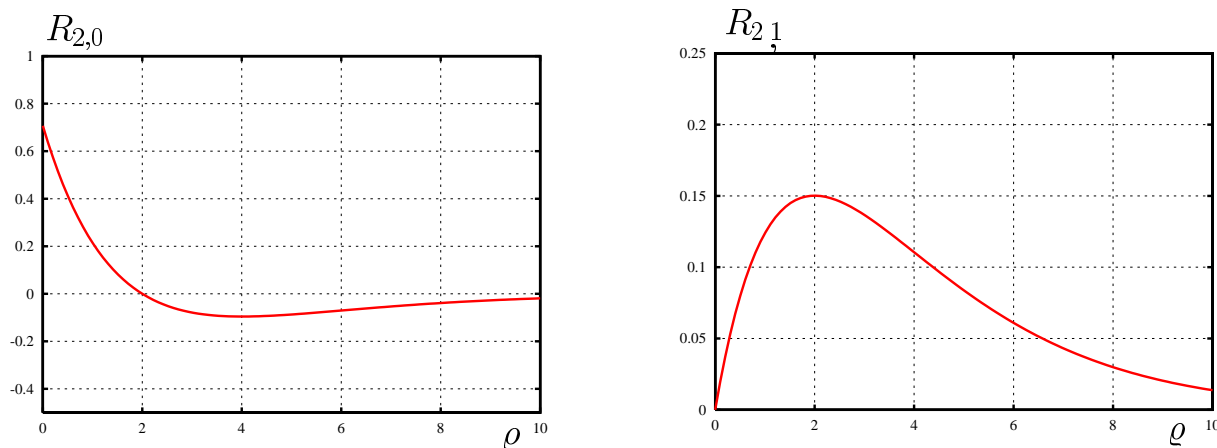


Abbildung 42: Die normierten Radialfunktionen $R_{2,0}$ und $R_{2,1}$ als Funktion von ρ .

n	l	$R_{n,l}(\rho)/N$
1	0	$2e^{-\rho}$
2	0	$(1/\sqrt{2})(1 - \rho/2)e^{-\rho/2}$
2	1	$(1/\sqrt{24})\rho e^{-\rho/2}$
3	0	$(2/\sqrt{27})(1 - \frac{2}{3}\rho + \frac{2}{27}\rho^2)e^{-\rho/3}$
3	1	$(4\sqrt{2}/(27\sqrt{3}))\rho(1 - \rho/6)e^{-\rho/3}$
3	2	$(\sqrt{8}/\sqrt{5 \cdot 27^3})\rho^2 e^{-\rho/3}$
4	0	$(1/4)(1 - \frac{3}{4}\rho + \frac{1}{2}\rho^2 - \frac{1}{192}\rho^3)e^{-\rho/4}$

Tabelle 3: Tabelle der radialen Funktion im Coulombpotential.

Die Wahrscheinlichkeit ein Elektron zwischen r und $r + dr$ anzutreffen ist mit $dP = \psi^* \psi dV$ nach Integration über die Winkel durch

$$dP = r^2 |R_{n,l}|^2 dr \quad (223)$$

gegeben. Mit der Variablen ρ wird daraus

$$\frac{dP}{d\rho} = \frac{1}{N^2} \rho^2 |R_{n,l}|^2 \quad (224)$$

Besonders wichtig ist natürlich die Eigenfunktion des Grundzustandes des Wasserstoffatoms. Die differentielle Wahrscheinlichkeitsverteilung lautet

$$\frac{dP}{d\rho} = 4\rho^2 e^{-2\rho} \quad (225)$$

Sie ist in Abb. 43 dargestellt. Sie verschwindet am Kernort ($\rho = 0$) und hat ein Maximum bei $\rho = 1$, wie man durch Differenzieren sofort sieht. Das Elektron im Wasserstoffatom ist also am häufigsten beim Bohrschen Radius a_B zu finden. Für $l \neq 0$ hängen die Dichteverteilungen auch von Θ und ϕ ab. Es ist interessant, diese Verteilungen numerisch zu studieren. Dies geht besonders anschaulich, wenn man dreidimensionale Grafiken mit einer Punktdichte proportional zu $|\psi|^2$ erzeugt. In Abb. 44 ist dies für $\psi_{2,1,0}$ durchgeführt. Auf der Webseite der Vorlesung findet sich eine MAPLE-Routine, mit der man diese Grafiken erzeugen kann. Interessant ist dabei auch das mathematische Verfahren, die sog. Monte-Carlo-Methode.

Die gemessenen Frequenzen (204) der Spektrallinien werden sehr genau durch die Theorie beschrieben, wenn man noch berücksichtigt, daß es sich wegen der endlichen Masse des Protons eigentlich nicht um ein Potentialproblem handelt. Auch in der Schrödinger-Theorie besteht die Korrektur auf die Mitbewegung des Kerns im Ersetzen der Elektronenmasse m durch die reduzierte Masse

$$m_{\text{red}} = \frac{mM_K}{m + M_K} \quad (226)$$

Für Wasserstoff wird die Korrektur am größten und beträgt dort offenbar $\approx (1 - 1/1836)$. Erst wenn man das Spektrum mit einer Genauigkeit von $> 10^{-5}$ untersucht, treten Abweichungen von der hier besprochenen Theorie auf, die wir im Abschnitt 4.4 behandeln werden.

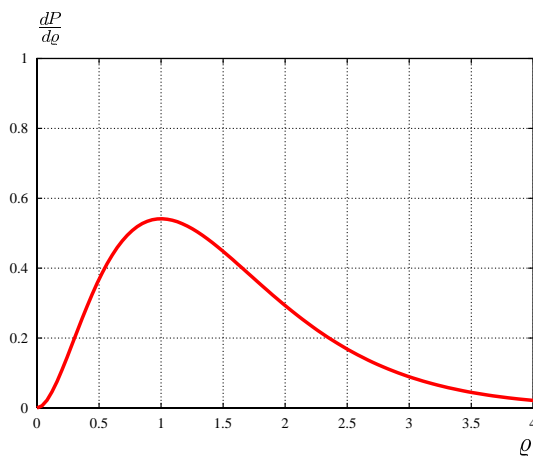


Abbildung 43: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Elektrons im Grundzustand des H -Atoms, bzw. eines Z -fach geladenen Ions mit einem Elektron. $\rho = r/a_Z$.

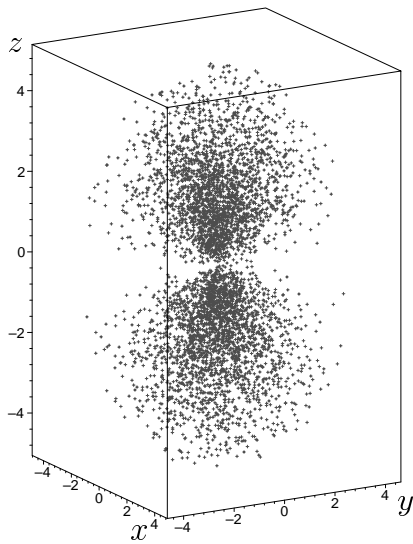


Abbildung 44: Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ des Elektrons im Zustand $\psi_{2,1,0}$ des H -Atoms Die Skala der Achsen ist in Einheiten des Bohrschen Radius angegeben.

Die theoretische Behandlung der Strahlungsprozesse (Wahrscheinlichkeit, Form der Spektrallinien) geht über die Schrödinger-Theorie hinaus, da diese nur Einteilchen-Zustände diskutiert. Dieses Problem wird eigentlich erst in der Quantenelektrodynamik gelöst. Trotzdem kann es auch in der nichtrelativistischen Quantenmechanik näherungsweise behandelt werden. Wir werden darauf in Kap. 6 zurückkommen.

4.3 Spin und magnetisches Moment des Elektrons

In der klassischen Elektrodynamik ist das magnetische Moment μ einer von einem Strom I umflossenen Fläche A definiert als

$$\mu = IA \quad . \quad (227)$$

In einem homogenen magnetischen Feld (Induktion B) wirkt auf diesen Dipol ein Drehmoment

$$T = \mu \times B \quad , \quad (228)$$

das versucht A parallel zu B auszurichten. Dann hat die potentielle Energie

$$W_{\text{pot}} = -\mu B \quad (229)$$

ein Minimum. In inhomogenen Magnetfeldern tritt zusätzlich eine Kraft

$$F_x = \mu \nabla B_x \quad (230)$$

(und entsprechend für die anderen Komponenten) auf.

Im klassischen Atommodell beschreibt das Elektron eine Kreisbahn. Der zugehörige Strom ist durch $I = ef$ gegeben, also gilt für den Betrag des magnetischen Moments $\mu = ef\pi r^2$ bzw. mit⁷ $L = m_e r^2 \omega$

$$\mu = \frac{e}{2m_e} L \quad . \quad (231)$$

In Vektorform lautet diese Beziehung

$$\mu = -\frac{e}{2m_e} L \quad . \quad (232)$$

Der Vektor des magnetischen Moments steht wegen der negativen Ladung des Elektrons antiparallel zum Drehimpulsvektor. In der Quantenmechanik wird entsprechend der Quantisierung des Drehimpulses (232) in

$$\mu = -\frac{\mu_B}{\hbar} L \quad (233)$$

mit

$$\mu = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad (234)$$

und

$$\mu_z = -\mu_B m \quad (235)$$

umgeformt, wobei das Bohrsche Magneton μ_B durch

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (236)$$

mit dem Zahlenwert $\mu_B = 5.7884 \cdot 10^{-5}$ eV/T definiert ist. Für die Energie im im Magnetfeld gilt entsprechend

$$W_{\text{pot}} = m\mu_B B \quad , \quad (237)$$

⁷In diesem Abschnitt müssen wir die Elektronenmasse durch einen Index kennzeichnen, da m auch als Quantenzahl gebraucht wird.

d.h. die Energien und die dazugehörigen Einstellmöglichkeiten des magnetischen Moments sind quantisiert. Die magnetischen Energien sind allerdings klein. Selbst in dem sehr hohen Magnetfeld von 10 T gilt $\Delta W_{\text{pot}} \approx 6 \cdot 10^{-4}$ eV. Die beobachteten Spektren der Atome liefern jedoch eine glänzende Bestätigung dieser Zusammenhänge.

Bisher wurden nur die magnetischen Effekte des Bahndrehimpulses behandelt. Das berühmte Experiment von Stern und Gerlach bewies aber, daß Elektronen auch im Zustand $l = 0$ ein magnetisches Moment und damit einen Drehimpuls haben. Dieser wird *Spin* genannt. Im Experiment wird ein Strahl von Wasserstoffatomen durch ein inhomogenes Magnetfeld (Abb. 45) geschickt. Das ursprüngliche Experiment wurde mit Silberatomen durchgeführt. Das macht aber keinen Unterschied, da auch der Grundzustand des Silbers $l = 0$ hat. Falls das Elektron ein magnetisches Moment besitzt, richtet sich dieses auf der Strahlachse ($z, y = 0$) entlang der z -Achse aus. Zusätzlich wirkt die Kraft

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} , \quad (238)$$

welche den Strahl entsprechend der Einstellmöglichkeiten von μ_z in verschiedene Strahlen aufspaltet. Das ungeheuer überraschende Ergebnis des Versuchs war nun, daß hinter dem Magneten zwei Teilstrahlen gefunden wurden. Unter der Annahme, daß die Quantisierung des magnetischen Moments wieder durch die Quantisierung des Drehimpulses erfolgt, ergibt sich für die Spinquantenzahl s in

$$S_e = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (239)$$

zwingend $s = 1/2$ und $s_z = \pm 1/2$, also

$$S_e = \frac{1}{2}\sqrt{3}\hbar \quad (240)$$

mit den z -Komponenten

$$S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar . \quad (241)$$

Die Untersuchung der Spektren von Atomen im Magnetfeld zeigte nun, daß die magnetische Energie durch

$$W_{\text{pot}} = \pm \mu_B B \quad (242)$$

gegeben ist. Der Zusammenhang (237) muß also zu

$$W_{\text{pot}} = g s_z \mu_B B \quad (243)$$

mit $g = 2$ modifiziert werden. Gewarnt durch dieses Ergebnis wird man also (233) folgend den allgemeinen Zusammenhang zwischen einem Drehimpuls \mathbf{J} im Atom und dem dazugehörigen magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}$ durch

$$\boldsymbol{\mu} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \quad (244)$$

festlegen. Der Anomaliefaktor g hat die speziellen Werte $g = 1$ für den Bahndrehimpuls und $g = 2$ für den Spin der Elektronen. Dies führt zu komplizierten g -Faktoren, falls der Drehimpuls der Elektronenhülle aus Bahn- und Spinanteilen zusammengesetzt werden muß. Darauf werden wir noch näher eingehen.

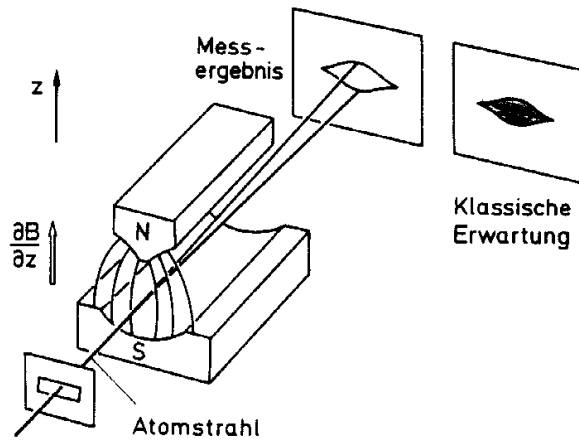


Abbildung 45: Der Versuch von Stern und Gerlach zum Nachweis von Spin und magnetischem Moment des Elektrons. Aus Haken, Wolf Atom- und Quantenphysik.

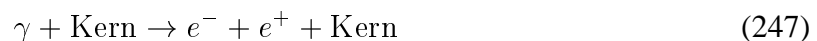
Spin und Magnetismus der Elektronen haben ihre vollständige Aufklärung in Diracs Theorie relativistischer Elektronen gefunden. Paul A.M. Dirac suchte nach einer Differentialgleichung für die ψ -Funktion, die sowohl in den den Ableitungen nach der Zeit als auch nach dem Ort nur von 1. Ordnung war und gleichzeitig den relativistischen Energiesatz

$$\left(\sqrt{\mathbf{p}_{\text{op}}^2 c^2 + m_e^2 c^4} \right) \psi = W_{\text{op}} \psi \quad (245)$$

erfüllte. Er fand, daß dies möglich war, wenn anstelle der einfachen Ψ -Funktion vier 4-komponentige Spaltenvektoren

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (246)$$

als Lösung zugelassen wurden (Nobelpreis 1933). Er konnte zeigen, daß die Lösungen Ψ_i mit $i = 1, 2$ zu den zwei Zuständen eines relativistischen Elektrons mit Spin $1/2$ gehören. Die beiden anderen Lösungen gehören zu einem Spin $1/2$ Teilchen mit positiver Ladung! Die Positronen, die Antimaterie der Elektronen, waren zu dieser Zeit noch nicht entdeckt und wurden später von Carl D. Anderson (Nobelpreis 1936) in der Reaktion



unter Verwendung hochenergetischer Photonen aus der Höhenstrahlung gefunden. Die Existenz von Antimaterie, d.h. von Teilchen, deren Masse exakt gleich der Teilchenmasse ist, die aber in Quantenzahlen wie der Ladung sich im Vorzeichen von den Teilchen unterscheiden, ist eine der wichtigsten Entdeckungen der Atomphysik.

Ähnlich wie im Fall der Schrödingergleichung wird die Dirac-Gleichung auf Teilchen in äußeren Feldern erweitert. Besonders wichtig ist die Untersuchung der Lösungen in einem

statischen Magnetfeld. Die zu den Spinkomponenten $s_z = \pm 1/2$ gehörigen Eigenwerte der potentiellen Energie lauten

$$W_{\text{pot}} = \pm \mu_B B \quad (248)$$

wie in (242). Das sog. anomale magnetische Moment der Elektronen hat damit eine fundamentale Erklärung gefunden.

Für die späteren Anwendungen ist es wichtig, daß im Grenzfall $v \rightarrow 0$ die Lösungen der Dirac-Gleichung in die Lösungen Ψ_S der Schrödingergleichung übergehen, die mit zweikomponentigen Spaltenvektoren zur Bezeichnung der Spinzustände ($m_s = \pm 1/2$) multipliziert werden, also

$$\Psi_1 \rightarrow \Psi_S \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (249)$$

für „Spin auf“ und

$$\Psi_2 \rightarrow \Psi_S \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (250)$$

für „Spin ab“.

Zum Abschluß soll noch die Frage behandelt werden, warum der Stern-Gerlach-Versuch mit Atomen und nicht direkt mit freien Elektronen durchgeführt werden muß. Man könnte zunächst meinen, daß die Ablenkung der Elektronen im Magnetfeld unterdrückt werden muß. Es ist zwar wesentlich einfacher einen geraden Magneten mit starkem Gradientenfeld zu bauen, aber prinzipiell ist durchaus denkbar, die x -Achse des Magneten in Abb. 45 entlang der Sollbahn der Elektronen zu krümmen. Auf der anderen Seite hat jedoch jeder Strahl, dessen Zentrum sich im Ursprung der Abb. 45 befindet, eine endliche Ausdehnung $2\Delta y$. Ein Teilchen mit den Koordinaten $y = \Delta y, z = 0$ erfährt die Lorentzkraft

$$F_z = evB_y = ev \frac{\partial B_y}{\partial y} \Delta y = -ev \frac{\partial B_z}{\partial z} \Delta y \quad , \quad (251)$$

wobei die letzte Umformung wegen $\nabla \mathbf{B} = 0$ und $B_x=0$ gilt. Damit eine Aufspaltung des Strahls beobachtet werden kann muß nun die Kraft auf das magnetische Moment groß gegenüber der Lorentzkraft sein, also

$$\mu_B \frac{\partial B_z}{\partial z} \gg ev \frac{\partial B_z}{\partial z} \Delta y \quad . \quad (252)$$

Die letzte Bedingung wird leicht in $p\Delta y \ll \hbar/2$ und wegen $p \geq \Delta p_y$ in

$$\Delta p_y \Delta y \ll \frac{\hbar}{2} \quad (253)$$

umgeformt. Diese Beziehung widerspricht aber der Unschärferelation!

4.4 Die Feinstruktur

Eine genaue Untersuchung des Linienspektrums des Wasserstoffs zeigt eine charakteristische Abweichung von der Schrödingerschen Theorie, die Linie spalten in Multipletts mit nahe beieinander liegenden Wellenlängen auf. Häufig werden Liniendoublets beobachtet, aber es gibt auch kompliziertere Strukturen, in denen es aber immer ein intensiv leuchtendes Doublet gibt. Dies hängt mit den noch zu besprechenden Auswahlregeln zusammen. Am bekanntesten ist das Doublet der Natrium D -Linie. Die gelbe Farbe des Natriumdampfes kommt von der sog. D -Linie. Schon mit relativ einfachen Mitteln kann die Aufspaltung demonstriert werden. Im Wasserstoff sind die Aufspaltungen geringer, die $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma$ -Linien der Balmer Serie zeigen Aufspaltungen von $(1.5, 0.8, 0.9) \cdot 10^{-2}$ nm, zum Nachweis sind also Spektralapparate mit einer Auflösung von $\approx 10^{-5}$ nötig.

Der Grund für das Auftreten der Feinstruktur ist die Wechselwirkung der magnetischen Momente des Spins und des Bahndrehimpulses des Elektrons. Die Wechselwirkungsenergie zweier klassischer Dipole ist proportional zum Produkt der magnetischen Momente, also

$$W_{FS} = a \mu_L \mu_S, \quad (254)$$

worin a eine (berechenbare) Konstante ist. Da die magnetischen Momente proportional zum Drehimpuls sind formen wir die letzte Gleichung zu

$$W_{FS} = a' \mathbf{L} \mathbf{S} \quad (255)$$

um. Hier ist die Spin-Bahn-Kopplung unmittelbar sichtbar. In der Quantenmechanik sind nicht alle Werte von $\mathbf{L} \mathbf{S}$ erlaubt. Der Spin wird sich z.B. im Magnetfeld des Bahndrehimpulses nach den Regeln der Richtungsquantisierung einstellen. In der Quantenmechanik werden die Regeln für die Zusammensetzung zweier Drehimpulse

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (256)$$

abgeleitet. Der Gesamtdrehimpuls habe die Betragsquantenzahl J , für die anderen gilt entsprechend L und S .⁸ Bei gegebenem L und S mit $L \geq S$ sind die erlaubten Werte von J durch die Folge

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (257)$$

gegeben, das sind $2S + 1$ mögliche Werte von J . Für den späteren Gebrauch geben wir noch die Regel

$$J_z = L_z + S_z \quad (258)$$

der Addition der dritten Komponenten zweier Drehimpulse in der Quantenmechanik an.

Nach den Gesetzen der Quantenmechanik wird die Korrektur an den Energietermen der Schrödinger Theorie durch das Integral

$$\Delta W_{FS} = \int \psi^* W_{FS} \psi dV \quad (259)$$

⁸Wir folgen hier dem Brauch, große Buchstaben für die Quantenzahlen zu verwenden. Das ist sehr nützlich bei Systemen mit mehreren Elektronen. Ein Verwechslung mit dem Betrag des Drehimpulses (z.B. $|\mathbf{J}| = J$) sollte durch den Kontext weitgehend ausgeschlossen sein. Für ein einzelnes Elektron verwenden wir aber weiter kleine Buchstaben für die Quantenzahlen.

berechnet, worin W_{FS} aus (254) als Operator aufgefaßt wird. Sofort taucht das Problem auf, daß zuerst die Eigenfunktionen ψ des Hamilton-Operators zu Zuständen mit definierten Werten von J, L, S gefunden werden müssen. Es ist aber ein typisches Vorgehen der quantenmechanischen Störungstheorie, im ersten Schritt die Lösungen des ungestörten Problems zu verwenden. Damit reduziert sich (254) auf ein Volumenintegral über $|R_{n,l}|^2$. Die Durchführung der Rechnung ist kompliziert, da verschiedene relativistische Korrekturen angebracht werden müssen.

Nach (139) ist der klassische Ausdruck für die kinetische Energie $W_{kin} = \alpha \hbar c / 2r$. Wenn man für r den Bohrschen Radius (144) einsetzt, folgt

$$v = \alpha c . \quad (260)$$

Es sind also offenbar relativistische Korrekturen nötig, die kompliziert sind, da es sich bei einer Kreisbahn um eine beschleunigte Bewegung handelt!

Anstelle die Berechnung dieser Korrekturen in der Schrödinger Theorie nachzuverfolgen, geben wir die die Eigenwerte der Energie eines Elektrons im Coulombfeld an, wie sie als Lösung der Dirac-Gleichung gefunden werden. Dies ist im Grunde genommen das richtige Vorgehen, da es sich ja offenbar um ein relativistisches Problem handelt und Spin und magnetisches Moment des Elektrons ebenfalls relativistische Effekte sind. Eine Behandlung der Dirac Gleichung und insbesondere ihrer Lösungen im Coulombfeld geht weit über den Rahmen dieser Vorlesung hinaus, wir können das Ergebnis nur angeben

$$W = W_{0,e} \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} . \quad (261)$$

Um diese komplizierte Formel zu interpretieren, entwickeln wir sie nach Potenzen von α^2 . Dazu betrachten wir die ersten Terme der Taylorreihe

$$W \approx W_{0,e} \left(1 + \frac{dW}{d\alpha^2} \alpha^2 + \frac{1}{2} \frac{d^2W}{d(\alpha^2)^2} \alpha^4 \right) . \quad (262)$$

Diese Rechnung gelingt mit MAPLE sehr einfach. Die beobachtbaren Energiewerte werden nach Abzug der Ruheenergie gefunden, $W_{n,j} = W - W_{0,e}$, und sind durch

$$W_{n,j} = W_n \left(1 - \frac{3}{4} \frac{\alpha^2}{n^2} + \frac{\alpha^2}{n(j + \frac{1}{2})} \right) \quad (263)$$

gegeben. Hierin ist W_n der Energie Eigenwert der Schrödingerschen Theorie. Die relativistisch korrekten Werte sind demgegenüber um den Wert

$$\Delta W_{FS} = \frac{R_y \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad (264)$$

abgesenkt. Zu jedem Wertepaar (n, l) mit $l \geq 1$ gibt es zwei Werte von j

$$j = l \pm \frac{1}{2} , \quad (265)$$

n	l	j	$^{2S+1}L_J$	
1	0	1/2	$1^2S_{1/2}$	}entartet
2	0	1/2	$2^2S_{1/2}$	
2	1	1/2	$2^2P_{1/2}$	
2	1	3/2	$2^2P_{3/2}$	}entartet
3	0	1/2	$3^2S_{1/2}$	
3	1	1/2	$3^2P_{1/2}$	}entartet
3	1	3/2	$3^2P_{3/2}$	
3	2	3/2	$3^2D_{3/2}$	
3	2	5/2	$3^2D_{5/2}$	

Tabelle 4: Tabelle der niedrigsten Zustände im Wasserstoff bei Berücksichtigung der Feinstruktur.

wobei die Regeln für die Quantenzahlen wie in der Schrödinger-Theorie lauten. Wichtig ist, daß die l -Entartung der nichtrelativistischen Theorie auch in der relativistischen Lösung erhalten bleibt. Diese Zusammenhänge werden nochmal in Tabelle 4 erläutert. Wir geben zusätzlich die alte spektroskopische Notation $^{2S+1}L_J$ der Zustände an. Der Wert des Drehimpulses L wird durch die historischen Bezeichnungen S, P, D, \dots für $L = 0, 1, 2, \dots$ ersetzt⁹. Im Wasserstoff mit nur einem Elektron gilt natürlich $L = l$, $S = s$, und $J = j$. Der Index $2S + 1$ wird als Multiplizität bezeichnet, weil er für $L \geq S$ tatsächlich die Multiplizität der Terme mit festem L und S angibt. Der Term mit $n = 1$ wird nicht aufgespalten, das Gleiche gilt für $n = 2$, $l = 0$.

Die stärkste Absenkung für $n > 1$ haben die Terme

$$\begin{aligned}
 2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2} : \Delta W_{\text{FS}} &= \frac{5\alpha^2 R_y}{64} \\
 2^2P_{3/2} : \Delta W_{\text{FS}} &= \frac{\alpha^2 R_y}{64}
 \end{aligned} \tag{266}$$

die Aufspaltung des 2^2P Terms beträgt daher $\alpha^2 R_y/16$, also ein wirklich kleiner Effekt. Zu beachten ist allerdings, daß Atome mit hohem Z , die sich wasserstoffähnlich verhalten, große Feinstruktur-Aufspaltungen zeigen, da dann α^2 in (264) durch $Z^2\alpha^2$ ersetzt wird.

Die erste Linie des Wasserstoffspektrums, die eine Feinstruktur zeigt ist die H_α Linie, die dem Übergang von $n = 3$ nach $n = 2$ entspricht. Die Abb. 46 zeigt die Energieterme und die erlaubten Übergänge. Diese entsprechen den Auswahlregeln

$$|\Delta l| = 1 \quad \Delta j = 0, \pm 1, \tag{267}$$

die wir später begründen werden. Die Dublett- bzw. Tripletstruktur der Terme führt also zu einem Linienmultiplett mit 5 Linien!

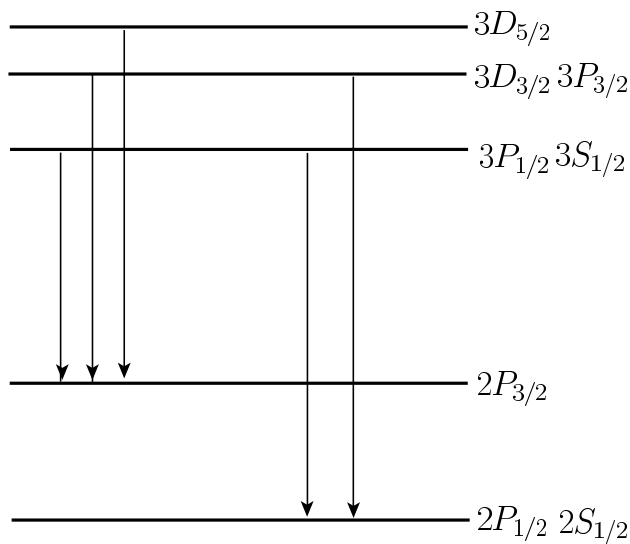


Abbildung 46: Termschema der Feinstruktur für die H_α -Linie im Wasserstoff.

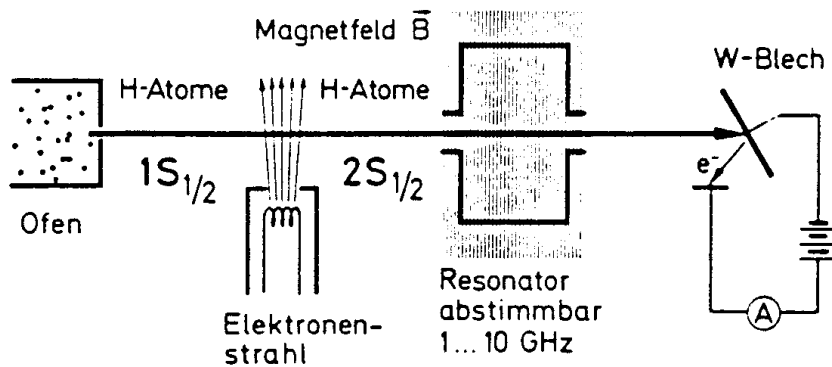


Abbildung 47: Der Versuch von Lamb und Retherford. Aus Haken, Wolf Atom- und Quantenphysik.

4.5 Die Lambshift

In den Jahren 1947 bis 1952 konnten Lamb und Retherford zeigen, daß auch die l -Entartung im Wasserstoff aufgehoben ist (Nobelpreis für W. Lamb 1955). Die dadurch bedingte Aufspaltung der Energieterme ist sehr klein, maximal $4 \cdot 10^{-6}$ eV. Lamb und Retherford benutzten keine optischen Methoden, sondern die in Abb. 47 dargestellte Mikrowellen-Apparatur. Der aus dem Ofen austretende Strahl von H-Atomen durchquert einen Elektronenstrahl. Durch inelastische Stöße wird ein kleiner Teil der Atome angeregt, z.B. in die möglichen Zustände mit $n = 2$, $\Delta W = R_y/4$. H-Atome im Zustand $2^2P_{1/2}$ und $2^2P_{3/2}$ gehen wegen der Auswahlregel

⁹Vorsicht! In der Spektroskopie wird also S als Bezeichnung für die Spinquantenzahl und als Symbol für $L = 0$ munter nebeneinander verwendet!

$\Delta l = 1$ für optische Übergänge sofort in den Grundzustand über. Der Zustand $2^2S_{1/2}$ kann dies nicht, er ist metastabil. Auf dem Wolframblech des Detektors geben die angeregten Atome sehr leicht das Elektron ab und es wird ein Strom gemessen, der proportional zur Anzahl der auftreffenden angeregten Atome ist. Im Resonator können durch Einstrahlung von Mikrowellen ($f = 1..10$ GHz) Übergänge in die $2P$ -Zustände induziert werden, die dann sofort in den Grundzustand übergehen. Wenn die Resonanzfrequenz erreicht wird, sinkt der Strom im Detektor ab, da H Atome im Grundzustand eine hohe Elektronenaffinität haben. Die Experimentatoren fanden eine starke Abnahme bei einer Einstrahlung von ca. 10 GHz, was nur grob der berechneten Feinstrukturaufspaltung entspricht. Zusätzlich gibt es aber eine Abnahme bei 1059 MHz, d.h. der $2^2S_{1/2}$ -Zustand ist $4.37 \cdot 10^{-6}$ eV von einem anderen Zustand entfernt. Es ist der $2^2P_{1/2}$ -Zustand (Abb. 48).

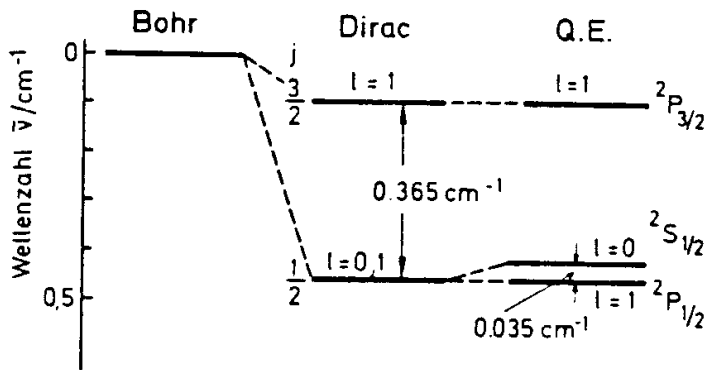


Abbildung 48: Die Aufspaltung und Verschiebung der Feinstrukturterme mit $n = 2$ in der QED. Aus Haken, Wolf Atom- und Quantenphysik.

Diese Aufhebung der l -Entartung kann nur in der Quantenelektrodynamik (QED) richtig beschrieben werden. Die Schrödingergleichung der nichtrelativistischen und die Diracgleichung der relativistischen Quantenmechanik erlauben die Berechnung von Zuständen eines Einteilchen-Systems. Prozesse, wie die Absorption und Emission von Photonen können nur mit zusätzlichen Annahmen behandelt werden. Darauf werden wir später zurückkommen. In der QED als Teil der Quantenfeldtheorie ist die Teilchenzahl keine Konstante, Teilchen können erzeugt und vernichtet werden. Neben der Emission und Absorption von Photonen kann also auch z.B. die Erzeugung und Vernichtung (Zerstrahlung) von Elektron-Positron-Paaren berechnet werden.

Für Streuprozesse wurde in der QED eine sehr mächtige Bildersprache – die Feynmangraphen – entwickelt. Über die Visualisierung hinaus beinhalten sie Rechenregeln, mit deren Hilfe die quantenmechanische Amplitude des Prozesses berechnet werden kann. Die Abb. 49a zeigt den Graphen für die Streuung eines Elektrons im Coulomb-Potential, das hier durch das Kreuz angedeutet wird. Die Emission eines Photons (Bremsstrahlung) wird in Abb. 49b gezeigt. Eine Emission (oder Absorption) von Photonen durch freie Elektronen (Abb. 49c) ist nicht möglich, da der Energiesatz

$$W = W' + W_\gamma \quad (268)$$

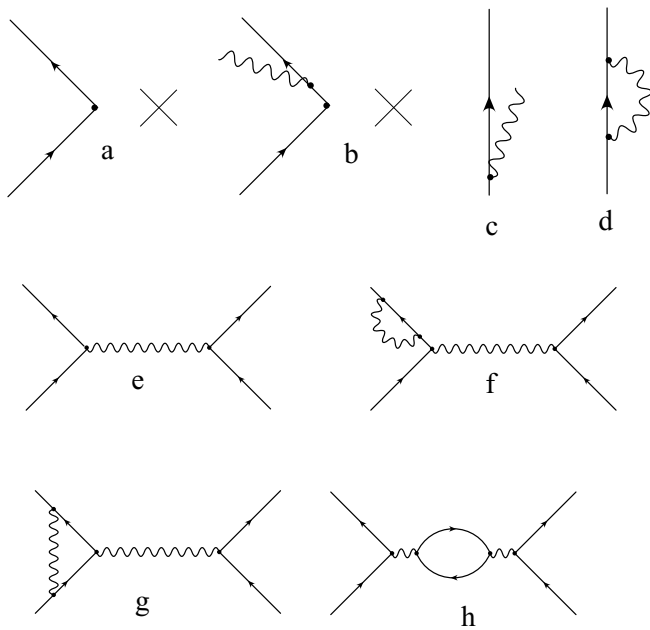


Abbildung 49: Feynmangraphen der Elektronenstreuung.

verletzt wird. Als einfachstes Beispiel berechnen wir die kollineare Abstrahlung eines Photons. Die Energien der Elektronen ersetzen wir durch ihre Impulse und erhalten für die Energiedifferenz zwischen Anfangs- und Endzustand

$$\Delta W = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - \sqrt{p'^2 c^2 + m^2 c^4} - W_\gamma . \quad (269)$$

Nun entwickeln wir die Wurzel für große p, p'

$$\Delta W = pc + \frac{m^2 c^3}{2p} - p'c - \frac{m^2 c^3}{2p'} - W_\gamma . \quad (270)$$

Der Impulssatz gibt aber $p = p' + W_\gamma/c$ also ist

$$\Delta W = \frac{m^2 c^3}{2p} - \frac{m^2 c^3}{2p'} \approx \frac{W_{0,e}^2 W_\gamma}{2W^2} \quad (271)$$

die angenäherte Verletzung des Energiesatzes. In der Quantenmechanik ist eine solche Verletzung jedoch für die Zeitspanne $\Delta t = \hbar/\Delta W$ erlaubt. Daher sind Prozesse wie in Abb. 49d, bei denen das emittierte Photon nach kurzer Zeit wieder absorbiert wird, möglich. Diese Graphen beschreiben typisch die Wechselwirkung eines Elektrons mit seinem Strahlungsfeld und führen zur Formel (36).

Photonen, die den Energiesatz nicht erfüllen, nennt man virtuelle Photonen. Mit ihrer Hilfe kann man zunächst einmal die Potentialstreuung selbst (oder die Elektron Proton Streuung) als Austausch virtueller Photonen verstehen (Abb. 49e). Die Graphen der Selbstenergie, Vertexkorrektur und Vakuumpolarisation (Abb. 49f-h) sind dann Korrekturen höherer Ordnung zum Graphen der Streuung.

Für gebundene Systeme werden die Feynmangraphen nicht verwendet, die physikalischen Zusammenhänge bleiben aber gleich. Die schwierige Rechnung der QED-Korrektur der Energiewerte ergibt für den Zustand $2^2 S_{1/2}$ eine Anhebung der Energie um

$$\Delta W_{\text{Lamb}} = \frac{\alpha^3 R_y}{3\pi} \left(\ln \frac{1}{16.639\alpha^2} + \frac{19}{30} \right) , \quad (272)$$

was einer Frequenz von 1039.31 MHz entspricht. Die P -Terme werden ein wenig angehoben, die numerische Korrektur ist aber nur etwa 1% von (272) und das Gesamtergebnis der sog. *Lambshift* lautet

$$\Delta f(2^2 S_{1/2} - 2^2 P_{1/2}) = 1052.19 \text{ MHz} . \quad (273)$$

Der Hauptbeitrag hierzu kommt von der sog. Vertexkorrektur ((Abb. 49e)). Die physikalisch besonders interessante Vakuumpolarisation trägt nur 27 MHz bei. Die Vakuumpolarisation ist prinzipiell wichtig, da sie zeigt, daß die Quantenfluktuationen des Vakuums (des Zustands ohne Materie) einen meßbaren Effekt haben. Das elektrische Feld erzeugt kurzlebige Elektron-Positron-Paare. Die durch eine Wolke von Elektron-Positron-Paaren bewirkte Abschirmung der Ladung des Kerns im Spektrum des Wasserstoffatoms trägt etwa 2.7% zu (273) bei.

Rechnungen und Messungen sind ständig verfeinert worden. Die Übereinstimmung der Messung mit der theoretischen Vorhersage ist überwältigend. Die Feinstruktur des Wasserstoffspektrums diente daher zu einer genauen Bestimmung von α . Der beste Wert ist heute $1/\alpha = 137.03599976$ mit einer Unsicherheit von 50 in den letzten beiden Stellen.

4.6 Die Hyperfeinstruktur

Bis auf die Korrektur der Rydbergenergie auf die Mitbewegung des Kerns haben wir das Wasserstoffatom als ein Elektron im Coulombfeld behandelt. Das Proton ist aber ein reales Teilchen mit einem Radius, Spin und magnetischem Moment. Der Bohrsche Radius ist verglichen mit dem Radius des Protons so groß, daß es erlaubt ist, das Proton als punktförmig zu behandeln. Bei Kernen mit hohem Z gibt es aber durchaus beobachtbare Effekte im Spektrum der Atome, die mit dem endlichen Kernradius zusammenhängen. Beim Wasserstoff ist der theoretische Fehler in der Behandlung der Lambshift mit der Ungenauigkeit in der Kenntnis des Protonradius verknüpft.

Den Einfluß der endlichen Masse des Protons wurde schon in Abschnitt 4.2 behandelt. Aus (226) folgt, daß beim Vergleich mit den Experimenten in allen Formeln R_y durch

$$R_{y,H} = R_y \frac{1}{1 + m/M_p} \quad (274)$$

ersetzt werden muß. Die Korrektur beträgt etwa 1/2 Promille. Der genaue Zahlenwert ist $R_{y,H} = 13.599$ eV.

Auch das Proton hat einen halbzahligen Spin, \mathbf{I} mit den Spinquantenzahlen $i = 1/2$ und $i_z = \pm 1/2$. Der Beweis für den halbzahligen Spin erfolgt in Experimenten, die ähnlich zum Stern-Gerlach-Versuch aufgebaut sind. Wenn das Proton ein elementares *Fermion* wie das Elektron ist, erwarten wir

$$\boldsymbol{\mu}_p = g_p \frac{e}{2M_p} \mathbf{I} \quad (275)$$

mit $g_p = 2$ für das magnetische Moment. Die Messungen ergaben aber $g_p = 5.5855$, das Proton hat ein anomales magnetisches Moment, dessen Zahlenwert mit der inneren Struktur des Protons zusammenhängt.

In einem Magnetfeld richtet sich der Kernspin aus, die Richtung des Feldes legt eine Quantisierungsachse fest. Die Wechselwirkungsenergie

$$W = -\boldsymbol{\mu}_p \mathbf{B} \quad (276)$$

hat daher mit $i_z = \pm 1/2$ die quantenmechanisch erlaubten Werte

$$W = \mp \frac{g_p}{2} \mu_K B = \mp 2.79 \mu_K B, \quad (277)$$

worin

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2M_p} \quad (278)$$

ein Kernmagneton mit dem Zahlenwert $3.1525 \cdot 10^{-8}$ eV/T ist.

Ein Magnetfeld am Ort des Kerns wird auch vom Elektron erzeugt. Der erste Anteil kommt vom magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}_e$ des Elektrons. In den Lehrbüchern wird meist

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}_e) - \boldsymbol{\mu}_e}{r^3} \quad (279)$$

als das Feld in einer Richtung \mathbf{n} im Abstand r von einem punktförmigen Dipol angegeben. In dieser Gleichung ist $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ VsA}^{-1}\text{m}^{-1}$ die magnetische Feldkonstante und \mathbf{n} der Einheitsvektor in Richtung des Radiusvektors. Für das Volumenintegral über das magnetische Feld einer Stromverteilung gilt der allgemeine Satz (siehe z.B. Jackson, Klassische Elektrodynamik)

$$\int \mathbf{B} dV = \frac{2}{3} \mu_0 \boldsymbol{\mu} , \quad (280)$$

worin $\boldsymbol{\mu}$ das eingeschlossene magnetische Dipolmoment ist. Diese Bedingung wird von (279) nicht erfüllt. Die Integration über die Richtungen ergibt null, damit verschwindet das Integral ungeachtet der Polstelle im Nenner. Durch Hinzufügen des Terms

$$\mathbf{B}_\delta = \frac{2}{3} \mu_0 \boldsymbol{\mu}_e \delta^3(\mathbf{r}) \quad (281)$$

lautet der erste Anteil

$$\mathbf{B}_1 = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}_e) - \boldsymbol{\mu}_e}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_e \delta^3(\mathbf{r}) \right) \quad (282)$$

und erfüllt nun (280). Außerhalb $r = 0$ ist diese Formel mit (279) identisch.

Von der Bahnbewegung des Elektrons wird ebenfalls ein Magnetfeld am Ort des Kern erzeugt. Das Gesetz von Ampère ergibt nach kurzer Umformung

$$\mathbf{B}_2 = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \frac{e}{m} \mathbf{L} . \quad (283)$$

Beide Anteile des Feldes setzen wir in (276) ein und erhalten den klassischen Ausdruck

$$W_{\text{magn}} = -\frac{2}{3} \mu_0 \boldsymbol{\mu}_e \boldsymbol{\mu}_p \delta^3(\mathbf{r}) + \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\boldsymbol{\mu}_p \boldsymbol{\mu}_e - 3(\boldsymbol{\mu}_p \mathbf{n})(\boldsymbol{\mu}_e \mathbf{n}) - \frac{e}{m} \boldsymbol{\mu}_p \mathbf{L} \right) \quad (284)$$

für die Wechselwirkungsenergie der Hyperfeinstruktur. (In der δ -Funktion liegt jetzt $r = 0$ am Ort des Kerns, dies gilt wegen $\delta(-x) = \delta(x)$.)

Nun benutzen wir (284) zur Berechnung des quantenmechanischen Erwartungswertes der Energieverschiebung

$$\Delta W_{\text{HFS}} = \int \psi^* W_{\text{magn}} \psi dV . \quad (285)$$

Für Wellenfunktionen mit $l \neq 0$ trägt nur der Term in der großen Klammer von (284) bei, da sie einen Knoten bei $r = 0$ besitzen. Umgekehrt ist für eine s -Welle nur der erste Term relevant, da der Beitrag der großen Klammer verschwindet. Dies kann man sich folgendermaßen klarmachen. Der dritte Term verschwindet wegen $l = 0$. Für $l = 0$ sind die ψ -Funktionen winkelunabhängig. Das Integral über den ersten Term ergibt also $4\pi \boldsymbol{\mu}_e \boldsymbol{\mu}_p$. Zur Berechnung des Integral über den zweiten Term in der großen Klammer von (284) werden die Skalarprodukte ausmultipliziert. Es gilt

$$(\boldsymbol{\mu}_p \mathbf{n})(\boldsymbol{\mu}_e \mathbf{n}) = n_x^2 \mu_{p,x} \mu_{e,x} + n_y^2 \mu_{p,y} \mu_{e,y} + n_z^2 \mu_{p,z} \mu_{e,z} + \text{gemischte Terme} . \quad (286)$$

In Polarkoordinaten ergibt sich für die Quadrate der Komponenten der Einheitsvektoren

$$\begin{aligned} n_x^2 &= \cos^2 \phi \sin^2 \Theta \\ n_y^2 &= \sin^2 \phi \sin^2 \Theta \\ n_z^2 &= \cos^2 \Theta \end{aligned} \quad (287)$$

Die gemischten Terme enthalten $\cos \phi$, $\sin \phi$ oder $\sin(2\phi)$, und verschwinden daher bei der Integration. Die quadratischen Terme ergeben im Integral jeweils einen Faktor $4\pi/3$ und damit wird das Integral des ersten Terms exakt durch das Integral des zweiten Terms aufgehoben.

Jetzt läßt sich die Hyperfeinstruktur für $l = 0$ leicht berechnen

$$\Delta W_{\text{HFS}} = -\frac{2}{3} \mu_0 \langle \boldsymbol{\mu}_e \boldsymbol{\mu}_p \rangle |\psi_{n,0}(0)|^2, \quad (288)$$

der Erwartungswert von $\boldsymbol{\mu}_p \mathbf{B}$ wird also durch den Erwartungswert von $\boldsymbol{\mu}_e \boldsymbol{\mu}_p$ ersetzt. Die magnetischen Momente sind mit den Drehimpulsen verknüpft, also gilt

$$\Delta W_{\text{HFS}} = a \frac{\langle \mathbf{SI} \rangle}{\hbar^2} \quad (289)$$

mit

$$a = \frac{4}{3} \mu_0 \mu_B \mu_K g_p |\psi_{n,0}(0)|^2. \quad (290)$$

Aus Tabelle 2 und 3 lesen wir die Beziehung

$$|\psi_{n,0}(0)|^2 = \frac{1}{n^3 a_Z^3} \quad (291)$$

ab und mit $\epsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$ ergibt sich

$$a = \frac{8 g_p m}{3 n^3 M_p} \alpha^2 R_y = \frac{5.8762 \cdot 10^{-6}}{n^3} \text{ eV}. \quad (292)$$

Spin und Kernspin setzen sich zu einem Gesamtdrehimpuls \mathbf{F} zusammen, $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$. Mit $\mathbf{F}^2 = \mathbf{I}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{IS}$ gilt

$$\frac{\langle \mathbf{SI} \rangle}{\hbar^2} = \frac{1}{2} (f(f+1) - i(i+1) - s(s+1)) \quad (293)$$

und daher wegen $i = s = 1/2$

$$\Delta W_{\text{HFS}} = \frac{a}{2} \left(f(f+1) - \frac{3}{2} \right). \quad (294)$$

Die Quantenzahl f kann hier die Werte 0 und 1 annehmen. Die größte HFS-Aufspaltung gibt es im Grundzustand ($n = 1$), nämlich

$$\Delta W_{\text{HFS}}(f = 1) - \Delta W_{\text{HFS}}(f = 0) = a \quad (295)$$

mit der zugehörigen Wellenlänge der Strahlung von 21.099 cm.

Das interstellare Gas der Galaxien besteht aus Wasserstoff. Die Beobachtung der HFS-Übergänge (21cm Linie) hat sich zu einem wichtigen Arbeitsgebiet der Radioastronomie entwickelt. Hiermit wurde u.a. die spirale Struktur der Milchstraße bestimmt. Der im Labor gemessene Wert der HFS-Aufspaltung weicht um etwa 1 Promille vom theoretischen Wert ab ($\Delta W_{\text{HFS}} = 5.6847 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$). Der g -Faktor des Elektrons ist nicht exakt 2. Aufgrund der Strahlungskorrekturen also der Wechselwirkung des Elektrons mit seinem Feld ergibt sich eine kleine Korrektur, die in der QED berechnet werden kann. Der Hauptbeitrag stammt vom Diagramm der Abb. 49g. Aus den Messungen der Hyperfeinstruktur ergab sich $g = 2.0023$, was gut mit der theoretischen Näherung

$$g = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right) \quad (296)$$

übereinstimmt.

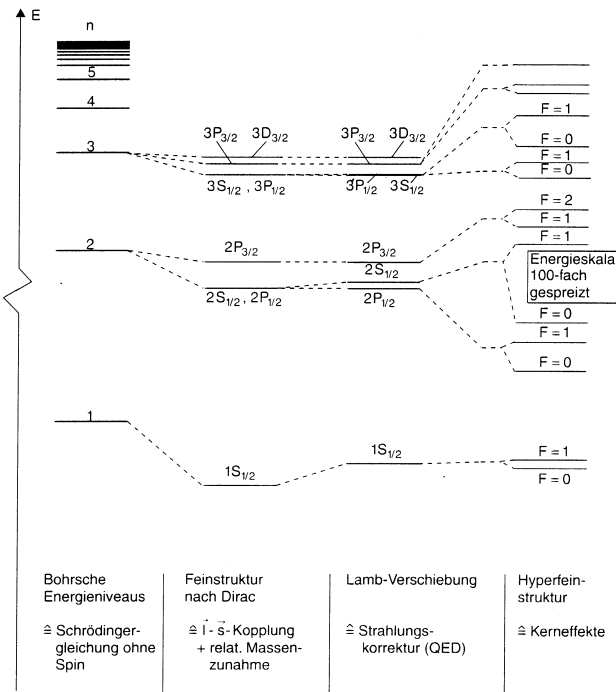


Abbildung 50: Das vollständige Termschema des Wasserstoffs. Aus Demtröder, Experimentalphysik.

Für $l \neq 0$ wird die theoretische Berechnung der Hyperfeinstruktur ungleich komplizierter, das Ergebnis kann aber sehr einfach zusammengefaßt werden,

$$\Delta W_{\text{HFS}} = \frac{a}{2} (f(f+1) - i(i+1) - j(j+1)) \quad (297)$$

mit

$$a = \frac{2g_p m}{n^3 M_p} \alpha^2 R_y \frac{1}{j(j+1)(2l+1)} \quad (298)$$

Hierin ist j die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses des Elektrons. Evident ist in dieser Formel das abgeleitete Resultat für $l = 0$ enthalten. In der Abb. 50 wird das Ergebnis dieses Kapitels über das Spektrum des Wasserstoffatoms nochmals dargestellt.

5 Atombau und Spektrallinien II, Atome mit mehreren Elektronen

5.1 Die Alkali-Atome

Die chemische Verwandtschaft der Alkalimetalle mit dem Wasserstoff ist schon sehr früh gefunden worden. Die Perioden des Periodensystems der Elemente beginnen ab der zweiten Periode mit einem Alkalimetall. Am bekanntesten sind das Lithium ($Z = 3$), das Natrium ($Z = 11$) und das Kalium ($Z = 19$). Die Spektren dieser Atome können nur verstanden werden, wenn es verschiedene Termserien gibt, zwischen denen Übergänge stattfinden. Betrachten wir das Termschema des Natriums (Na) in Abb. 51. Es zeigt 5 Termserien mit den historischen Namen *S*, *P*, *D*, *F* für *sharp*, *principal*, *diffuse*, *fundamental*. Übergänge gibt es zwischen Nachbarn ungleichen Namens. In Absorption, d.h. in Übergängen vom Grundzustand werden nur die *P*-Serien erreicht.

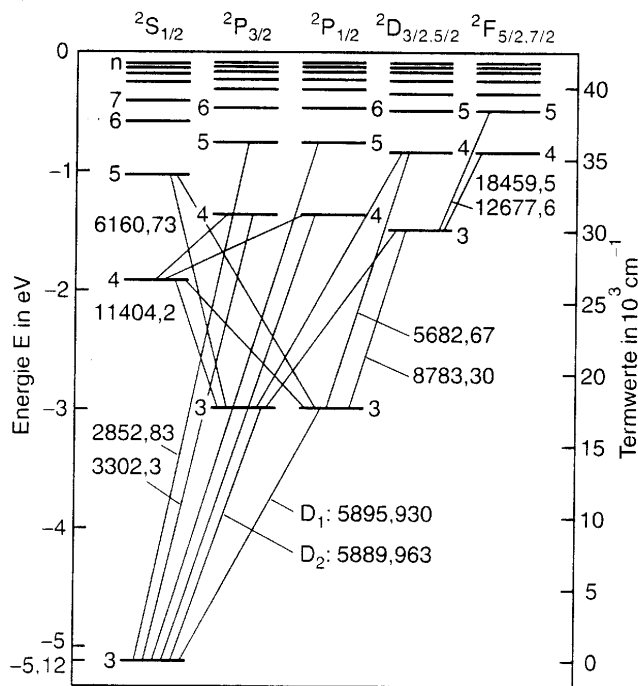


Abbildung 51: Termschema des Natrium-Atoms. Angabe der Wellenlänge in 10^{-10} m. Aus Demtröder, Experimentalphysik.

Wir behandeln nun die atomtheoretische Erklärung des Termschemas. Die Alkaliatome ähneln dem Wasserstoff, weil ihre Eigenschaften im wesentlichen von einem Elektron, dem äußeren Elektron bestimmt werden. Die inneren Elektronen dienen nur zum Abschirmen der Kernladung. Diese Abschirmung gelingt nicht vollständig und sie ist abhängig vom Abstand r . Bei großen r gilt $V = -\alpha\hbar c/r$, nahe am Kern hingegen $V = -Z\alpha\hbar c/r$. Das Elektron interpoliert zwischen beiden Werten (Abb.52) und das resultierende Potential hat keine reine $1/r$ Abhängigkeit mehr, die l -Entartung ist aufgehoben. Die Termserien *S*, *P*, *D*, *F* werden den Werten $l = 0, 1, 2, 3$ zugeordnet. Spin und Bahndrehimpuls des „Leuchtelektrons“ kombinieren

zu einem Gesamtdrehimpuls, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Die Termserien werden daher durch die spektroskopische Notation der Tabelle 4 gekennzeichnet. Die Feinstruktur-Aufspaltung der P -Serie ist so groß, daß zwei getrennte Serien gezeichnet werden. Am bekanntesten ist die sog. Natrium- D -Linie, die für das gelbe Licht der Na-Lampen verantwortlich ist. Die Wellenlängen sind 589.59 und 588.99 nm.

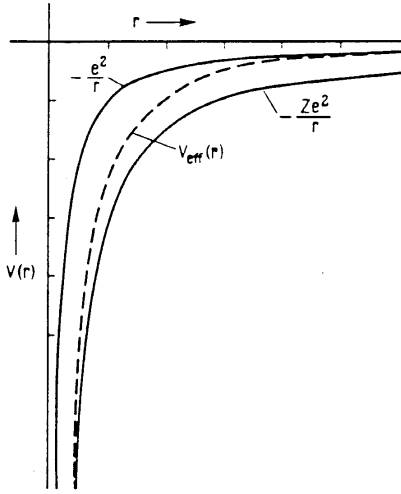


Abbildung 52: Das effektive Potential in einem Atom mit mehreren Elektronen. Aus Mayer-Kuckuk, Atomphysik.

Für viele Zwecke reicht es aus, mit einer effektiven Kernladung Z_{eff} , also

$$V = -Z_{\text{eff}} \frac{\alpha \hbar c}{r} \quad (299)$$

zu rechnen. Für die Energie des Grundzustands folgt dann $W = -R_y Z_{\text{eff}}^2 / n^2$. Wir nehmen das Ergebnis vorweg, daß in jeder Periode die Hauptquantenzahl n des ersten Elektrons um 1 erhöht wird. Da die Ionisierungsenergie des Natriums 5.14 eV beträgt, folgt also mit $n = 3$ ein Wert von $Z_{\text{eff}} = 1.84$, was nicht unvernünftig erscheint.

Eine Abweichung vom Wasserstoffspektrum (218), läßt sich auch durch eine Modifikation des Nenners erreichen

$$W_{n,l} = -\frac{R_y}{[n - \delta(n,l)]^2}, \quad (300)$$

worin der sog. Quantendefekt δ für höhere Werte von n, l rasch gegen 0 strebt, das Spektrum wird wasserstoffähnlich!

Für Kerne mit $Z \neq 1$ ist die Feinstrukturaufspaltung der P -Terme $a/(2n^3)$, worin $a = Z^4 \alpha^2 R_y$ gilt. Der Faktor Z^4 ist eine Folge der Tatsache, daß α in (261) durch $Z\alpha$ ersetzt wird. Wenn wir die Abschirmung wieder durch Ersetzen von Z durch Z_{eff} berücksichtigen, gilt für Natrium $Z_{\text{eff}} = 3.49$, also deutlich mehr als sich bei der Bestimmung von Z_{eff} aus der Ionisationsenergie ergeben hat. Mit einem universellen Wert von Z_{eff} ist es nicht möglich, die Abweichung des Potentials vom $1/r$ Verhalten zu beschreiben.

5.2 Das Helium

5.2.1 Das Termschema

Das einfachste Atom nach dem Wasserstoff ist das Helium mit $Z = 2$, also zwei Elektronen. Dennoch taucht im Spektrum des Heliums etwas völlig Neues auf. Es gibt zwei Sorten Helium, das Ortho- und das Parhelium, die zwar chemisch völlig identisch sind, aber verschiedene Spektren haben. Abb. 53 zeigt das Termschema.

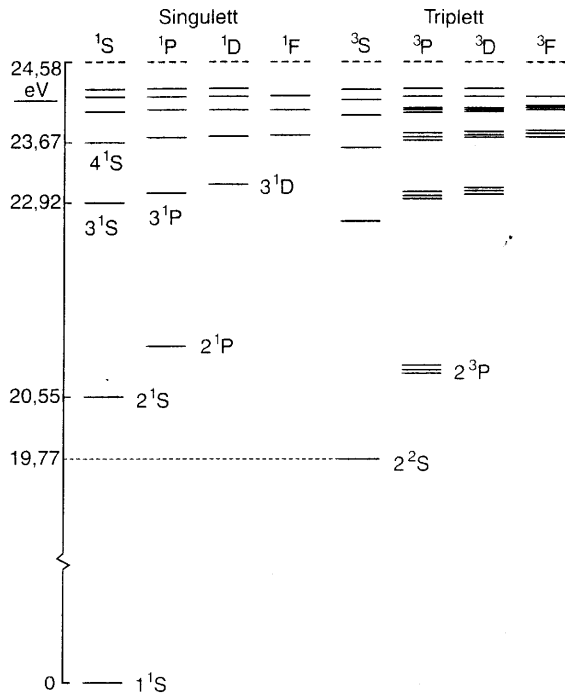


Abbildung 53: Das Termschema des Helium-Atoms. Der Nullpunkt der Energie ist hier auf den Grundzustand des Parheliums gelegt. Aus Demtröder, Experimentalphysik.

Die Alkalimetalle sind faktisch Einelektronen-Atome, da die inneren Elektronen abgeschlossene Schalen mit $L = 0$ und $S = 0$ bilden. Im Gegensatz dazu muß beim Helium die Wechselwirkung der beiden Elektronen berücksichtigt werden. Die Spins koppeln zu einem Gesamtspin

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad (301)$$

mit den Werten $S = 1, 0$ ¹⁰. Die Bahndrehimpulse koppeln zu $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$ und der Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (302)$$

kann die durch (257) festgelegten Werte annehmen. Für $S = 0$ gilt $J = L$ und die Terme haben keine Feinstruktur, es entsteht das Singulett-schema des Parheliums. Für $S = 1$ kann sich der Spin z.B. bezüglich des Magnetfeldes des Bahndrehimpulses auf 3 Arten einstellen,

¹⁰Wir bezeichnen die Drehimpulsquantenzahlen zusammengesetzter Systeme mit großen Buchstaben, auch wenn es Überschneidungen mit den Operatorsymbolen gibt.

daher haben die Terme ($L \geq 1$) entsprechend den drei nach (257) möglichen Werten von J eine Tripletstruktur, das ist das Orthohelium. Zwischen den beiden Systemen gibt es (fast) keine Übergänge, da damit eine Umorientierung der Spins („Umklappen“) verbunden ist. Solche Prozesse sind aber in der elektromagnetischen Strahlung stark unterdrückt. Die Auswahlregel $\Delta S = 0$ werden wir in Kap.6. noch diskutieren.

Bis auf den Grundzustand liegen die Terme von Par- und Orthohelium offenbar dicht beieinander. Der Grundzustand im Singulett hat die Energie $W = -24.47$ eV. Mit $n = 1$ ergibt dies $Z_{\text{eff}} = 1.35$, ein vernünftiger Wert, da man nicht annehmen kann, daß das andere Elektron eine Kernladung vollständig abschirmt. Die mittlere Energie der $2S$ - und $2P$ -Niveaus ist -3.8 eV, also ist hier Z_{eff} schon nahe bei 1. Da der Grundzustand des Orthoheliums eine ähnliche Energie hat, müssen wir auch für ihn $n = 2$ ansetzen. Die entscheidende Frage ist nun, warum im Triplettsystem der Zustand mit $n = 1$ fehlt!

Die Antwort wurde 1925 von Wolfgang Pauli gegeben (Nobelpreis 1945), der erkannte, daß es sich hier um ein quantenmechanisches Prinzip handelt. In einem System mit mehreren Elektronen wird jedes Elektron durch 4 Quantenzahlen gekennzeichnet, die drei räumlichen Quantenzahlen n, l, m und s_z die z -Komponente der Spinquantenzahl. Die naive Formulierung des Pauliprinzips lautet nun: In einem System mit mehreren Elektronen sind nur solche Anordnungen erlaubt, in denen sich alle Elektronen in mindestens einer Quantenzahl unterscheiden.

Im Termschema des Heliums sind die Zustände des Leuchtelektrons wie üblich durch die spektroskopische Notation $^{2S+1}L_J$ gekennzeichnet. Im Zustand 1^1S_1 des Heliums sind die Quantenzahlen $Q = \{n, l, m, s\}$ für das erste und zweite Elektron durch $Q_1 = \{1, 0, 0, 1/2\}$ und $Q_2 = \{1, 0, 0, -1/2\}$ in Übereinstimmung mit dem Pauli-Prinzip realisiert. Im Zustand 1^3S_1 wählen wir $S_z = 1$ dann sind nur die Sätze $Q_1 = \{1, 0, 0, 1/2\}$ und $Q_2 = \{1, 0, 0, 1/2\}$ möglich. Dies ist nach dem Pauli-Prinzip verboten während $Q_1 = \{1, 0, 0, 1/2\}$ und $Q_2 = \{2, 0, 0, 1/2\}$ für 2^3S_1 erlaubt ist.

5.2.2 Das Pauli-Prinzip

Gegen die einfache Fassung des Pauli-Prinzips könnte man einwenden, daß auch im Zustand $S = 1$, $S_z = 0$ das erste Elektron $s_z = +1/2$ und das zweite Elektron $s_z = -1/2$ hat. Damit haben dann beide Elektronen unterschiedliche Quantenzahlen. Aus Symmetriegründen dürfen aber die verschiedenen Zustände mit $S = 1$ nicht zu unterschiedlichen Aussagen führen. Um die tiefere Formulierung des Pauli-Prinzips vorzubereiten, die diese Schwierigkeiten vermeidet, stellen wir zunächst die Schrödingergleichung für das Helium auf,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z\alpha\hbar c}{r_1} - \frac{Z\alpha\hbar c}{r_2} + \frac{\alpha\hbar c}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = W\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) . \quad (303)$$

Hierin sind $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ die Koordinaten des ersten bzw. zweiten Elektrons und Δ_1, Δ_2 die entsprechenden Laplace-Operatoren. Der letzte Term in der Klammer beschreibt die Wechselwirkung der beiden Elektronen. Genau wie im Fall des Wasserstoffs die Lösung ein Produkt von getrennten Funktionen der einzelnen Koordinaten r, Θ, ϕ war, wird auch hier ein Produktansatz

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \quad (304)$$

gemacht. Der Indizes 1 und 2 bezeichnen hier jeweils einen Satz von Quantenzahlen $Q_i = n, m, l$. In (304) wurde aber wieder implizit eine Aussage über unbeobachtbare Größen gemacht: Das Elektron mit der Koordinate \mathbf{r}_1 hat die Quantenzahlen Q_1 , das Elektron mit der Koordinate \mathbf{r}_2 hat die Quantenzahlen Q_2 . Um dieses Dilemma zu vermeiden, muß eine Vertauschung von Quantenzahlen und Koordinaten zugelassen werden. Diese ist auf zwei Arten möglich

$$\begin{aligned} \psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)) \\ \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)) . \end{aligned} \quad (305)$$

Die Indizes S und A bedeuten symmetrisch bzw. antisymmetrisch bezüglich einer Vertauschung der Koordinaten $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, d.h. einer Vertauschung der beiden Elektronen. Die antisymmetrische Lösung hat zwei sehr interessante Eigenschaften

1. $\psi_A = 0$ für $Q_1 = Q_2$
2. $\psi_A = 0$ für $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$.

Wenn man die Spins der Elektronen hinzunimmt, sind die Wellenfunktionen ein Produkt der Orts- und der Spinwellenfunktion. Das Pauli-Prinzip kann nun so formuliert werden: In einem System mit mehreren Elektronen muß die Gesamtwellenfunktion (das Produkt von Orts- und Spinanteil) antisymmetrisch gegenüber einer Vertauschung von zwei Elektronen sein. Jetzt müssen wir noch beweisen, daß die Spinwellenfunktion für $S = 1$ symmetrisch und für $S = 0$ antisymmetrisch gegenüber Vertauschung ist. Dann muß für $S = 1$ die Ortswellenfunktion antisymmetrisch sein und verschwindet (siehe Eigenschaft 1), falls beide Elektronen im Zustand $Q = 1, 0, 0$ sind, während dies für $S = 0$ erlaubt ist, da hier die Ortswellenfunktion symmetrisch ist.

5.2.3 Anschauliche Bedeutung des Pauli-Prinzips

Nach den Ausführungen im letzten Abschnitt verbietet das Pauli-Prinzip, daß zwei Elektronen (Fermionen) sich im gleichen Zustand befinden. Damit wird sofort die ungeheure Vielfalt der Chemie erklärt. Jedes Elektron, was zu einem Ion hinzugefügt wird, verändert die chemischen Eigenschaften grundlegend, da es in einen anderen Zustand eingebaut wird.

Wenn wir Ort und Impuls als Observable nehmen, verbietet das Pauli-Prinzip, daß zwei Elektronen am gleichen Ort sind, oder den gleichen Impuls haben. Quantitativ wird das so formuliert, daß der mittlere Abstand von N Elektronen in einem Volumen a^3 durch $d = a/N^{1/3}$ gegeben ist. Damit ist aber wegen der Unschärferelation ein Impuls

$$p_F = \frac{\hbar}{(d/2)} = n_e^{1/3} 2\hbar \quad (306)$$

verknüpft, worin n_e die Anzahldichte der Elektronen ist. Wieder ist die Wahl von h oder \hbar in dieser Art der Ableitung nicht zwingend. Fermi hat gezeigt, daß in jedem Volumenelement des Phasenraums der Größe

$$a^3 4\pi p^2 dp = h^3 \quad (307)$$

genau zwei Elektronen Platz haben. Zwei Elektronen mit dem gleichen Impuls sind also unendlich weit voneinander entfernt. Aus (307) kann durch Integration der maximale und der mittlere Impuls der Elektronen in einem Gas berechnet werden. Die numerischen Unterschiede zu (306) sind unbedeutend. Der aus dem Fermi-Impuls (306) folgende Druck (sog. Pauli-Druck) eines Elektronengases viel größer als der Druck allein aufgrund der Unschärferelation (Heisenberg-Druck). Die Energien in einem solchen Fermi-Gas sind sehr groß verglichen mit kT , man nennt es auch „entartet“. Die quantitative Behandlung erklärt viele Effekte der Molekülphysik, Kernphysik und Physik der kondensierten Materie.

Für die spätere Verwendung soll die zu (307) führende Argumentation noch etwas erläutert werden. In der klassischen Physik kann die Zahl der Moden einer stehenden Welle in einem Hohlraum abgezählt werden. Diese Abzählung erweitern wir auf Materiewellen. Für stehende Wellen in einer Dimension, z.B. in einem Abschnitt der Länge a auf der x -Kordinate gilt die Bedingung

$$\lambda_x = \frac{2a}{n_x} \quad (308)$$

mit $n_x = 1, 2, 3, \dots$. Für hohe Werte von n_x gibt es daher

$$dn_x = \frac{a}{\pi} dk_x \quad (309)$$

Zustände von Wellen deren Wellenzahl $k_x = 2\pi/\lambda_x$ zwischen k_x und $k_x + dk_x$ liegt. In drei Dimension gibt es jedoch

$$dN = dn_x dn_y dn_z = \frac{a^3}{8\pi^3} d^3 k \quad (310)$$

Zustände von Wellen in einem Volumenelement $d^3 k$ des Wellenzahlvektors \mathbf{k} . Der Faktor 8 im Nenner rührt daher, daß Ordnungszahlen n_x, n_y, n_z positiv definit sind und wir daher nur einen

Oktanten des Raumes der ganzen Zahlen betrachten dürfen. Mit $p = \hbar k$ folgt schließlich beim Übergang zu Kugelkoordinaten des Impulses

$$dN = \frac{4\pi a^3}{h^3} p^2 dp . \quad (311)$$

Jeder Zustand ist durch einen eindeutigen Satz von Quantenzahlen n_x, n_y, n_z gekennzeichnet und kann nach dem Pauli-Prinzip mit zwei Elektronen besetzt werden. Daher gilt schließlich für ein Gas von Elektronen

$$\frac{dn_e}{dp} = 2 \frac{4\pi}{h^3} p^2 . \quad (312)$$

Durch Integration gewinnt man Beziehungen für den maximalen und mittleren Impuls mit Zahlenfaktoren, die sich geringfügig von der Abschätzung (306) unterscheiden.

Bevor wir im nächsten Abschnitt die Symmetrie der Spinzustände untersuchen, soll noch angemerkt werden, daß das Pauli-Prinzip im weiteren Verlauf der Quantenmechanik zum Spin-Statistik-Theorem erweitert wurde: Die Gesamtwellenfunktion von Fermionen (Teilchen mit Spin 1/2) ist antisymmetrisch gegenüber Vertauschung. Die Gesamtwellenfunktion von Bosonen (Teilchen mit Spin 0,1) ist symmetrisch gegenüber Vertauschung.

5.2.4 Konstruktion der Wellenfunktionen

Die Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ der Elektronen mit $s_z = \pm 1/2$ sind die Basisvektoren eines zweidimensionalen komplexen Vektorraumes. Sie dienen als Spin-Wellenfunktionen eines Elektrons und erfüllen die Gleichungen

$$\begin{aligned} S_z |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} \hbar |\uparrow\rangle \\ \mathbf{S}^2 |\uparrow\rangle &= \frac{3}{4} \hbar^2 |\uparrow\rangle \\ S_z |\downarrow\rangle &= -\frac{1}{2} \hbar |\downarrow\rangle \\ \mathbf{S}^2 |\downarrow\rangle &= \frac{3}{4} \hbar^2 |\downarrow\rangle . \end{aligned} \quad (313)$$

Diese Vektoren können als Spaltenvektoren dargestellt werden:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\downarrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (314)$$

Damit ist z.B. wie in (249)

$$\begin{pmatrix} \psi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (315)$$

die Wellenfunktion eines Elektrons mit $s_z = +1/2$ (Spin auf).

Um diese Beziehungen zu erfüllen, muß der Operator S_z die Darstellung

$$S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \quad (316)$$

haben, worin σ_z eine der drei Paulischen Spinmatrizen ist,

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (317)$$

Die beiden anderen lauten

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (318)$$

bzw.

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} . \quad (319)$$

Damit wird

$$\mathbf{S}^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad (320)$$

wie es sein muß. Die Vektoren sind orthonormiert, z.B. $\langle \uparrow | \uparrow \rangle = 1$. Dies läßt sich sofort nachvollziehen, wenn man beachtet, daß „konjugiert komplexe“ Vektoren wie $\langle \uparrow |$ als Zeilenvektoren dargestellt werden.

Die Wellenfunktionen eines Systems aus zwei Elektronen sind die Produkte

$$| \uparrow \rangle | \uparrow \rangle, | \uparrow \rangle | \downarrow \rangle, | \downarrow \rangle | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle | \downarrow \rangle . \quad (321)$$

Wir wählen Linearkombinationen, die symmetrisch bzw. antisymmetrisch gegenüber Vertauschung sind. Das sind

$$\Phi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow \rangle | \downarrow \rangle - | \downarrow \rangle | \uparrow \rangle) \quad (322)$$

sowie die drei Kombinationen

$$\begin{aligned} &= | \uparrow \rangle | \uparrow \rangle \\ \Phi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow \rangle | \downarrow \rangle + | \downarrow \rangle | \uparrow \rangle) \\ &= | \downarrow \rangle | \downarrow \rangle . \end{aligned} \quad (323)$$

Durch Anwenden der Operatoren

$$S_z = S_{z,1} + S_{z,2} \quad (324)$$

und

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2(S_{x,1}S_{x,2} + S_{y,1}S_{y,2} + S_{z,1}S_{z,2}) \quad (325)$$

kann man nachrechnen zeigen, das Φ_A die Drehimpulsquantenzahlen $S = 0$ und $S_z = 0$ hat, während die drei symmetrischen Lösungen zu $S = 1$ und $S_z = 1, 0, -1$ gehören. In (324) und (325) bedeuten die unteren Indizes 1,2, daß der jeweilige Operator auf den ersten bzw. zweiten Term des Produkts von Zuständen anzuwenden ist.

Mit diesem Wissen kann man nun auch leicht eine Matrixdarstellung des Triplets

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{326}$$

sowie der Operatoren

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{327}$$

und

$$\mathbf{S}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{328}$$

gewinnen. Schließlich erhalten wir die nach dem Pauli-Prinzip erlaubten Wellenfunktionen eines Systems von zwei Elektronen

$$\begin{aligned}
 \Psi_A &= \psi_S \Phi_A \\
 \Psi_A &= \psi_A \Phi_S,
 \end{aligned} \tag{329}$$

wobei die erste Lösung zu Parahelium mit $S = 0$ und die zweite Lösung zum Orthohelium mit $S = 1$ gehört.

5.2.5 Die niedrigsten Helium-Zustände

Ohne den Wechselwirkungsterm ist die Lösung von (303) für das Parahelium sehr einfach. Die räumliche Wellenfunktion ist die symmetrische Lösung aus (305), wobei für die Funktionen ψ_i Wasserstofflösungen mit $Z = 2$ gewählt werden. Die zugehörige Energie ist durch

$$W = -4R_y \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \tag{330}$$

gegeben, also im Grundzustand $W = -108.8$ eV. Das Leuchtelektron hat die Energie $-4R_y$. Der numerische Wert ist -54.4 eV, was in eklatantem Widerspruch zur gemessenen Energie von -24.47 eV steht. Der Wechselwirkungsterm muß also berücksichtigt werden. Mit der Abkürzung $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ machen wir im Sinne der Störungstheorie den Ansatz

$$\Delta W = \alpha \hbar c \int \frac{1}{r_{12}} \Psi_A^* \Psi_A dV_1 dV_2 = \alpha \hbar c \int \frac{1}{r_{12}} \psi_S^* \psi_S dV_1 dV_2 \tag{331}$$

unter Verwendung der wasserstoffartigen ψ Funktionen der ungestörten Gleichung. Dies ergibt für den Grundzustand des Paraheliums

$$\Delta W = \frac{\alpha \hbar c}{16\pi^2 a_Z} \int \frac{16}{\rho_{12}} e^{-2(\rho_1 + \rho_2)} d\tau_1 d\tau_2, \quad (332)$$

worin die $d\tau_i$ die Volumenelemente $d\phi_i d\cos\Theta_i d\rho_i$ bedeuten. Zur Auswertung legen wir die z -Achse eines Koordinatensystems in die Richtung von \mathbf{r}_1 . Damit kann sofort über $\phi_1, \phi_2, \cos\Theta_1$ integriert werden, was einen Faktor $8\pi^2$ ergibt. Nun betrachten wir alle Konfigurationen mit $\rho_1 > \rho_2$ und schreiben

$$\frac{1}{\rho_{12}} = \frac{1}{\rho_1} \frac{1}{\sqrt{1 - 2pq + p^2}} \quad (333)$$

mit $p = \rho_2/\rho_1$ und $q = \cos\Theta_2$. Wenn man jetzt beachtet, daß die Legendre Polynome $P_l(q)$ nichts anderes sind als die Koeffizienten der Entwicklung von $1/\sqrt{1 - 2pq + p^2}$ nach Potenzen von p ergibt die Integration über $\cos\Theta_2$ wunderbarerweise einen weiteren Faktor 2, da alle Integrale über die Legendre Polynome für $l > 0$ verschwinden. Die Auswertung des Integrals

$$\int_{\rho_1=0}^{\infty} \int_{\rho_2=0}^{\rho_1} \rho_1 \rho_2^2 e^{-2(\rho_1 + \rho_2)} d\rho_1 d\rho_2 \quad (334)$$

ist mit MAPLE sehr einfach und ergibt $5/256$, also insgesamt $10/256$, wenn wir auch die Fälle $\rho_2 > \rho_1$ berücksichtigen. Die Zusammenfassung aller Faktoren ergibt daher

$$\Delta W = \frac{160\alpha\hbar c}{256a_Z} = \frac{5}{4} Z R_y. \quad (335)$$

Hiermit ist die berechnete Energie des Grundzustandes

$$W_{1S} = -Z^2 R_y + \frac{5}{4} Z R_y, \quad (336)$$

das sind -20.4 eV. Dieses Ergebnis hat immer noch einen Fehler von 10% und erst eine komplizierte Rechnung in zweiter Ordnung der Störungstheorie schafft Abhilfe. Eine Verbesserung ist aber auch durch die Benutzung der Variationsrechnung möglich. Man benutzt Wasserstoff-Lösungen mit einer Kernladungszahl Z' und berechnet den Erwartungswert des Hamiltonoperators

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{2\alpha\hbar c}{r_1} - \frac{2\alpha\hbar c}{r_2} + \frac{\alpha\hbar c}{r_{12}} \quad (337)$$

für diese Funktionen. Das Resultat

$$W = +Z'^2 2R_y - 8Z' R_y + \frac{5}{4} Z' R_y \quad (338)$$

kann leicht bewiesen werden, wenn man (337) in zwei Hamiltonoperatoren von Elektronen im Coulombfeld einer Ladung Z' und den Rest

$$\frac{(Z' - 2)\alpha\hbar c}{r_1} + \frac{(Z' - 2)\alpha\hbar c}{r_2} + \frac{\alpha\hbar c}{r_{12}} \quad (339)$$

zerlegt, der nun als Störung aufgefaßt wird. Der Erwartungswert der ersten beiden Terme wird bei Benutzung der Wellenfunktionen des ungestörten Grundzustandes zu jeweils $2Z'(Z' - 2)R_y$

berechnet (MAPLE Routine auf der Web Seite) und damit ist (338) bewiesen. Im nächsten Schritt wird W nach Z' abgeleitet. Das Minimum liegt bei $Z' = 27/16$ also $W = -77.45$ eV bzw. $W_{1S} = -23.05$ eV. Dieses Ergebnis ist schon relativ genau.

Die Energien der $2S$ -Niveaus von Ortho- und Parahelium ergeben sich aus -13.6 eV $+\Delta W$ mit

$$\Delta W = \alpha \hbar c \int \frac{1}{r_{12}} \psi_{S,A}^* \psi_{S,A} dV_1 dV_2 . \quad (340)$$

Ersichtlich gilt

$$\Delta W = J \pm K \quad (341)$$

mit

$$J = \frac{\alpha \hbar c}{16\pi^2} \int \frac{1}{r_{12}} R_{1,0}^2(r_1) R_{2,0}^2(r_2) dV_1 dV_2 \quad (342)$$

und

$$K = \frac{\alpha \hbar c}{16\pi^2} \int \frac{1}{r_{12}} R_{1,0}(r_1) R_{1,0}(r_2) R_{2,0}(r_1) R_{2,0}(r_2) dV_1 dV_2 , \quad (343)$$

wobei J als Coulomb-Integral und K als Austausch-Integral bezeichnet wird. Gemäß unserem Ansatz müssen wir für die Wellenfunktionen $Z = 2$ ansetzen. Die Auswertung führen wir hier nicht durch. Beide Integrale sind positiv, d.h. der Zustand 2^1S_0 liegt energetisch höher als der Zustand 2^3S_1 . Der Energieunterschied ist eine Folge des Spins der Elektronen, hat aber nichts mit einer Spin-Spin Wechselwirkung zu tun, sondern mit dem durch das Pauli-Prinzip erzwungenen Unterschied in der räumlichen Anordnung der Elektronen. Numerisch ergibt sich $J = 11.4$ eV, $K = 1.19$ eV, also $\Delta W = 2.4$ eV. Diese Ergebnisse stimmen nur schlecht mit dem experimentellen Werten überein, z.B. beträgt der gemessene Energieunterschied zwischen den Zuständen 2^1S und 2^3S nur 0.8 eV. Der Ansatz, die Abstoßung zwischen den Elektronen als Störung aufzufassen, ist also viel zu grob¹¹.

Man kann zeigen, daß die Elektronen mit der Kreisfrequenz $\omega = K/\hbar$ ihre Plätze tauschen. Dies muß so sein, da auch die Unterscheidung in äußeres und inneres Elektron unbeobachtbar ist. Damit wird auch der Name Austausch-Energie erklärt. In der Quantenfeldtheorie wird bewiesen, daß alle Wechselwirkungen, (also alle Potentiale) auf einen Austausch von Teilchen zurückgeführt werden können.

5.3 Das Periodensystem der Elemente

Die Elektronenkonfiguration der Atome mit $Z > 2$ wird nach dem Bohr-Sommerfeldschen Aufbau-Prinzip analog zum Vorgehen beim Helium gewonnen. Zunächst wird die Kernladungszahl um 1 erhöht, das Ion mit der Kernladung $Z + 1$ hat die gleiche Konfiguration wie das Atom mit der Kernladung Z . Das hinzukommende Elektron wird in ein passendes Orbital, d.h. in einen nach dem Pauli-Prinzip erlaubten Zustand eingebaut. Die Gesamtwellenfunktion des Atoms ist in erster Näherung durch das antisymmetrische Produkt aller Wellenfunktionen gegeben (Slater-Determinante). Diese kann benutzt werden, um z.B. die Energie des Grundzustands zu berechnen. Falls diese Rechnung die richtige Ionisationsenergie ergibt, ist der Ansatz für das

¹¹Diese Probleme werden mit großer Klarheit im Artikel von H. Bethe über die Quantenmechanik der Ein- und Zweielektronen Atome im alten Handbuch der Physik behandelt.

Orbital des äußersten Elektrons bestätigt. Es läßt sich leicht vorstellen, daß solche Rechnungen für große Z sehr aufwendig werden. Die Konfiguration der Elektronen in einem Atom kann man zum großen Teil aber auch mit Hilfe empirischer Regeln und anschaulicher Argumente verstehen.

Das Helium hat die größte Ionisationsenergie aller Elemente. Mit chemischen Reaktionsenergien läßt es sich nicht ionisieren. Das Helium kann auch nicht durch Anlagern eines weiteren e^- ein He^- -Ion bilden, da dieses Elektron mit $n = 2$ sehr weit vom Kern entfernt ist und keine Kernladung mehr sieht. Daher ist das Helium chemisch inaktiv, es ist ein Edelgas.

Das Lithium mit $Z = 3$ baut das 3. Elektron in das Orbital $n = 2, l = 0, m = 0$ ein. Allein auf Grund des Pauli-Prinzips sind auch andere l -Werte möglich, aber nach unseren Erfahrungen liegen die Zustände mit $l = 0$ energetisch am tiefsten. Die Ionisationsenergie ist 5.4 eV, daraus folgt $Z_{\text{eff}} = 1.26$. Jeder andere Wert von n würde völlig unvernünftige Werte von Z_{eff} ergeben. Um ein weiteres Elektron vom Li-Ion abzutrennen, muß eine Energie von 76 eV aufgewendet werden. Dieser Wert stimmt gut mit (336) überein, wenn dort $Z = 3$ eingesetzt wird. Diese große Energie kann chemisch nie realisiert werden, das Lithium ist ein chemisch aktives, einwertiges Atom.

Elektronen mit gleichen n befinden sich in einer gemeinsamen Schale von Orbitalen. In die Schale mit $n = 2$ lassen sich zwei Elektronen mit $l = 0$ und 6 Elektronen mit $l = 1$ einbauen. Es sind die Elemente Li, Be und B, C, N, O, F, Ne. In der Tat beginnt nach dem Edelgas Neon, eine neue Periode des Systems mit dem Alkaliatom Natrium. Die Perioden des Systems werden daher mit den Schalen zu unterschiedlichem n identifiziert.

Symbol	l	Anzahl der e^-	Summe
s	0	2	2
p	1	6	8
d	2	10	18
f	3	14	32

Tabelle 5: Tabelle der Elektronenzahlen in den Unterschalen zu verschiedenem l .

Tabelle 5 zeigt die Anzahl der möglichen Elektronenkonfigurationen in einer l -Unterschale und die Gesamtzahl der Elektronen in einer Schale mit $n = l + 1$. Tatsächlich findet man im Periodensystem Perioden mit 2,8,18 und 32 Elementen. Es ist aber nicht so, daß immer erst alle l -Schalen gefüllt werden, bevor eine neues n begonnen wird. Dies ist nur für kleine Z die energetisch günstigste Konfiguration. Nach dem Edelgas Krypton ($Z = 36$) mit den gefüllten Schalen $4s, 4p$ beginnt nicht die Füllung der Schale $4d$, sondern das Alkalimetall Rubidium ($Z = 37$) hat ein $5s$ -Elektron als äußerstes Elektron. In der 6. Periode hat das äußerste Elektron des Elements (Alkalimetall Cäsium mit $Z = 55$) $n = 6$. Beim Lanthan ($Z = 57$) beginnt aber zunächst die Auffüllung der weit innen liegenden $4f$ Schale (mit zusätzlichen Komplikationen). Chemisch bedeutet dies, daß die 14 sog. Erdalkali-Elemente chemisch sehr ähnliche Eigenschaften haben, was ihre Entdeckung erschwerte.

Die Elektronenkonfiguration wird durch Aneinanderhängen von Symbolgruppen der Art $n(\text{Buchstabe})^q$ bezeichnet. Die Buchstaben $s, p, d, ..$ geben den Wert von l und das hochgestellte q gibt an, wieviel Elektronen sich in der jeweiligen l -Unterschale befinden. Ein Beispiel:

$${}_3\text{Li} : 2, 1 \rightarrow 1s^2; 2s \quad . \quad (344)$$

Sehr nützlich ist das Programm *FlashElements* auf der Web-Seite der Vorlesung. Es gibt die Anzahl der Elektronen in jeder n -Schale an, und damit kann mit den Regeln der Tabelle 5 die Elektronenkonfiguration bestimmt werden, z.B.,

$${}_{41}\text{Nb} : 2, 8, 18, 12, 1 \rightarrow 1s^2; 2s^2, 2p^6; 3s^2, 3p^6, 3d^{10}; 4s^2, 4p^6, 4d^4; 5s . \quad (345)$$

Die Wechselwirkung der magnetischen Momente des Bahndrehimpulses ist i.a. größer als die Spin-Bahn-Wechselwirkung (sog. Russel-Saunders-Kopplung). Daher koppeln die Bahndrehimpulse zu einem gesamten Drehimpuls

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}_i \quad (346)$$

und die Spins zu einem Gesamtspin

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i . \quad (347)$$

Schließlich gilt

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} . \quad (348)$$

Abgeschlossene Unterschalen, also Schalen, in die alle nach Tabelle 5 zu einem gegebenen Wert von l erlaubten Elektronen eingebaut sind, erfüllen $\mathbf{L} = 0$ und $\mathbf{S} = 0$. Aus dem Aufbauprinzip folgt unmittelbar $\sum_i L_{z,i} = 0$ und $\sum_i S_{z,i} = 0$, damit gilt aber noch nicht zwingend $L, S = 0$. In Aufgabe 23 wurde jedoch verifiziert, daß abgeschlossene Unterschalen eine kugelsymmetrische Dichteverteilung der Elektronen aufweisen. Dies ist nur für $L = 0$ möglich. Zu dieser bezüglich der Ortskoordinaten symmetrischen Dichteverteilung gehört eine bezüglich Vertauschung der Elektronen symmetrische Wellenfunktion. Daher muß die Spinwellenfunktion antisymmetrisch sein. Für zwei Elektronen bedeutet dies zwingend $S = 0$, wie wir gesehen haben. Diese Tatsache kann aber auch auf andere Zustände mit einer geraden Anzahl von Elektronen verallgemeinert werden.

Aus dem spektroskopischen Befund können die Werte von J, L, S des Grundzustands des Atoms gewonnen werden. Damit kann man bestimmen, in welcher Reihenfolge die Werte von m_i und s_i einer Unterschale aufgefüllt werden. Die empirisch bestimmten sog. Hundschen Regeln lassen sich teilweise mit Hilfe des Pauli-Prinzips verstehen. Die Regeln werden durch quantitative Berechnungen der Energie des Grundzustandes bestätigt. Im einzelnen lauten die Regeln

1. Zunächst wird der resultierende Spin maximal, d.h. es werden möglichst viele Elektronen mit $s_i = +1/2$ eingebaut.
2. Die nach dem Pauli-Prinzip (in seiner einfachen Version) erlaubten Werte von m_i werden so gewählt, daß $\sum_i m_i$ maximal wird. Dieser Wert bestimmt dann L ,

$$L = \left| \sum_i m_i \right| . \quad (349)$$

3. Die Spin-Bahn-Kopplung minimiert J , solange die Unterschale bis zur Hälfte aufgefüllt ist. Danach wird der jeweils größtmögliche Wert von J realisiert. Als Begründung mag die folgende Überlegung dienen: Beim Wasserstoff haben wir gesehen, daß die Terme mit dem kleinsten j energetisch am tiefsten liegen. Dies gilt auch für Unterschalen mit niedriger Besetzung. Nun betrachten wir eine Unterschale, die bis auf ein fehlendes Elektron gefüllt ist. Dieses Loch in der vollen Schale können wir als positive Ladung auffassen, so daß sich das Vorzeichen der Energie in (255) umkehrt und J maximiert wird.

Als Beispiel wird in Tabelle 6 die $2p$ Schale konstruiert.

s_i	m_i	L	S	J	$^{2S+1}L_J$	Element
1/2	1	1	1/2	1/2	$^2P_{1/2}$	B
1/2,1/2	1,0	1	1	0	3P_0	C
1/2,1/2,1/2	1,0,-1	0	3/2	3/2	$^4S_{3/2}$	N
1/2,1/2,1/2 -1/2	1,0,-1 1	1	1	2	3P_2	O
1/2,1/2,1/2 -1/2,-1/2	1,0,-1 1,0	1	1/2	3/2	$^2P_{3/2}$	F
1/2,1/2,1/2 -1/2,-1/2,-1/2	1,0,-1 1,0,-1	0	0	0	1S_0	Ne

Tabelle 6: Elektronenkonfiguration und Drehimpulse der $2p$ -Schale

Im Fall der Russel-Saunders Kopplung kann man die Feinstruktur aus dem Erwartungswert von (255) berechnen, es gilt also

$$\Delta W_{FS} = a' \langle \mathbf{L} \mathbf{S} \rangle . \quad (350)$$

Wegen

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \mathbf{S} \quad (351)$$

erhalten wir

$$\Delta W_{FS} = \frac{b}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (352)$$

mit $b = a' \hbar^2$. Dies ergibt $\Delta W_{FS} = 0$ für $L = 0$ wie es ja nach Voraussetzung auch sein muß. Auf der anderen Seite haben wir beim Wasserstoff gesehen, daß auch für $l = 0$ eine Absenkung der Energie stattfindet, was sich auf eine relativistische Korrektur zurückführen läßt. Außerdem steht in (264) die Quantenzahl j im Nenner und nicht im Zähler wie in (352). Die Aufspaltung der P -Terme in (352) beträgt $3/2b$. Beim Wasserstoff wurde diese Aufspaltung zu $\alpha^2 R_y / 2n^3$ berechnet. Daher kann man

$$b = \frac{Z_{\text{eff}}^4 \alpha^2}{3n^3} \quad (353)$$

als grobe Abschätzung für b in der heuristischen Formel (352) verwenden. Alle genaueren Rechnungen werden sehr kompliziert.

5.4 Atome im Magnetfeld

Die Untersuchung des Spektrums von Atomen, die sich in einem Magnetfeld befinden, hat enorm zur Aufklärung der Termstruktur beigetragen. Aus der modernen Sicht ist klar, was passieren wird. Im Wasserstoff beträgt das vom Bahndrehimpuls herrührende Magnetfeld am Ort des Elektrons etwa 12 T! Bei kleineren Magnetfeldern in der Apparatur wird also die Spin-Bahn-Kopplung nicht aufgebrochen, sondern das magnetische Moment μ_A des Atoms richtet sich im Magnetfeld aus. Damit ist eine klassische Wechselwirkungsenergie von

$$W = -\mu_A \mathbf{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \mathbf{B} \quad (354)$$

verbunden, wobei der Faktor 2 vor dem Spin das anomale magnetische Moment berücksichtigt. Um die quantenmechanische Energieverschiebung durch diese Wechselwirkung zu berechnen, wird (354) wieder als Operator aufgefaßt, woraus

$$\Delta W = \frac{\mu_B}{\hbar} (\langle J_z \rangle + \langle S_z \rangle) \quad (355)$$

folgt. Die z -Achse wird hier durch das Magnetfeld definiert. Die Berechnung von $\langle S_z \rangle$ bei der Zusammensetzung $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ der Drehimpulse erfordert eine längere Rechnung unter Benutzung der Methoden der Drehimpuls-Algebra. Einfacher ist es, das Modell rotierender Kreisel zu benutzen und das klassische Ergebnis in die Quantenmechanik zu übersetzen. Aus Abb. 54 lesen wir

$$S_z = \frac{J_z}{J^2} \mathbf{J} \mathbf{S} \quad (356)$$

ab. Mit

$$\mathbf{J} \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2) \quad (357)$$

ergibt sich

$$\langle S_z \rangle = \hbar J_z \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (358)$$

wobei auf der rechten Seite alle Symbole des Drehimpulses als Quantenzahlen interpretiert werden müssen. Damit folgt das Endresultat

$$\Delta W = g_L \mu_B B J_z \quad (359)$$

mit dem sog. Landéschen g -Faktor

$$g_L = 1 + J_z \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (360)$$

In Analogie zu (244) wird also das magnetische Moment eines Atoms durch

$$\boldsymbol{\mu} = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \quad (361)$$

gegeben. Jeder Term im Grotrian-Diagramm wird in $2J + 1$ äquidistante Terme mit einem Energieunterschied

$$\Delta W = g_L \mu_B B \quad (362)$$

aufgespalten. In Atomen ohne resultierenden Spin ($S = 0$) gilt $g_L = 1$, wie man von einem reinen Bahndrehimpuls erwartet. Dies ist als der normale Zeemann-Effekt bekannt. Im Fall $S \neq 0$ ist der Landé-Faktor etwas komplizierter (anomaler Zeemann-Effekt). Zum Beispiel spaltet das Niveau $^2P_{3/2}$ in vier Terme mit $\Delta W = (4\mu_B B)/3$ auf. In Abb. 55 wird dies für die Natrium D Linien erläutert. Da die Auswahlregeln

$$\Delta J_z = 0, \pm 1 \quad (363)$$

gelten, wird die D_1 -Linie in ein Quartett und die D_2 -Linie in ein Sextett aufgespalten. Ohne Magnetfeld werden hieraus wieder einzelne Linien, aber jetzt wird verständlich, warum die D_2 -Linie intensiver leuchtet als die D_1 -Linie: D_2 besteht aus 6 Übergängen und D_1 nur aus vier Übergängen.

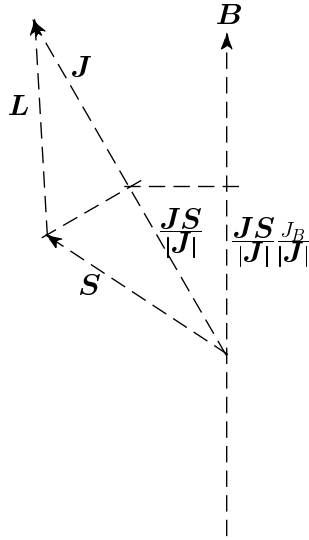


Abbildung 54: Die Zusammensetzung von Bahndrehimpuls und Spin zu einem Gesamtdrehimpuls J und die Komponente des Spins in Richtung eines Feldes.

Besonders interessant ist die Beobachtung, daß die Spektrallinien polarisiert sind. Man unterscheidet zwischen den π und den σ Linien. Die π -Linien gehören zu $\Delta J_z = 0$. Das Licht ist in Richtung des Magnetfeldes linear polarisiert und es gibt keine Ausstrahlung parallel zum Magnetfeld. Die σ -Linien gehören zu $\Delta J_z = \pm 1$. Bei Beobachtung in Richtung des Magnetfeldes ist das Licht rechts- bzw. linkszirkular polarisiert. Bei Beobachtung senkrecht zum Magnetfeld ist es linear polarisiert. Diese Polarisationen können quantenmechanisch berechnet werden. Das ist sogar einfacher als die klassische Herleitung. Trotzdem soll diese für die π -Linien kurz skizziert werden. Diese Linien stammen von Elektronen, die parallel (π !) zum Magnetfeld schwingen. Ein Dipol strahlt nicht in Schwingungsrichtung, das elektrische Feld ist in Schwingungsrichtung linear polarisiert. Da der Dipol in Feldrichtung schwingt, wirkt auf ihn keine Kraft. Die quantenmechanische Übersetzung lautet $\Delta J_z = 0$.

Direkte Übergänge zwischen den im Magnetfeld aufgespaltenen Termen eines Zustands zu festem n, J, L sind optisch nicht möglich, da die Auswahlregel der elektrischen Dipolstrahlung $\Delta L = \pm 1$ verlangt. Sie können aber durch ein senkrecht zum ausrichtenden Feld angelegtes magnetisches Wechselfeld erreicht werden (magnetische Dipolübergänge). Die Frequenz ergibt

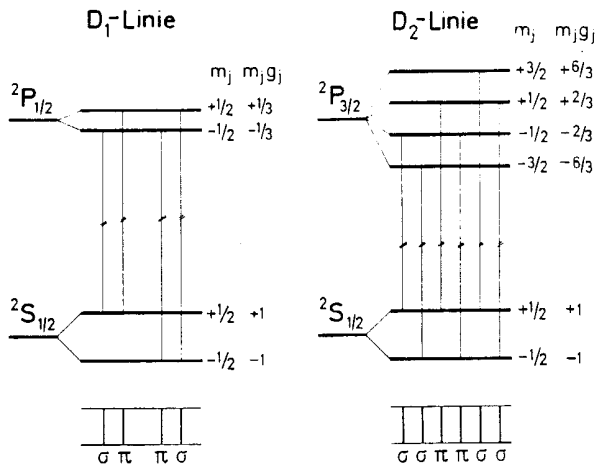


Abbildung 55: Der anomale Zeeman-Effekt der Natrium D-Linien. Aus Haken Wolf, Atomphysik.

sich aus (359) zu

$$f = \frac{g_L \mu_B B \Delta J_z}{2\pi \hbar} \quad (364)$$

also z.B. 13.996 GHz bei einem Feld von 1T, $\Delta J_z = 1$ und $g_L = 1$. Zur Beobachtung dieser *Elektronenspinresonanz* muß man also Mikrowellen verwenden. Nach den Gesetzen der statistischen Thermodynamik verhalten sich die Besetzungszahlen wie $\exp -\Delta W/kt$. Durch Einstrahlung des Wechselfeldes mit der Resonanzfrequenz (364) werden Übergänge induziert. Die Absorption überwiegt bis die Besetzungszahlen gleich sind. Die dem Sender bei Absorption entzogene Energie dient zum Nachweis der Resonanz. Besonders einfach wird dieser Nachweis, wenn man das statische Magnetfeld B_0 mit einem kleinen Wechselfeld (z.B. mit der Frequenz 50 Hz) moduliert. Dann wird nämlich das Absorptionssignal periodisch und kann einfach sichtbar gemacht werden (Abb. 56). Zusätzlich erlaubt das Modulationsfeld, die Verwendung eines Klystrons mit fester Frequenz, was erheblich einfacher und billiger ist.

Die Elektronenspinresonanz läßt sich auch indirekt optisch nachweisen. Die Versuchsanordnung der sog. Doppelresonanz zeigt Abb. 57. Durch die Einstrahlung der σ^+ -Linie auf Natrium-Atome im Magnetfeld werden Übergänge aus dem Grundzustandsterm $1^2S_{1/2}$ mit $J_z = -1/2$ in den Zustand $2^2P_{1/2}$ mit $J_z = +1/2$ erzwungen. Diese gehen optisch durch Ausstrahlung der σ und π -Linien in die beiden Niveaus des Grundzustands über. Die Besetzungszahlen des Niveaus mit $J_z = +1/2$ werden dadurch stark angereichert, da es gegen Übergänge in den tiefer gelegenen Zustand mit $J_z = -1/2$ relativ stabil (metastabil) ist. Diesen Vorgang nennt man optisches Pumpen. Durch Einstrahlen der dem Energieunterschied der beiden Niveaus des Grundzustands entsprechenden Resonanzfrequenz wird nun die Besetzungszahl des Zustands $J_z = -1/2$ erhöht. Dies bewirkt eine erhöhte Absorption der eingestrahnten σ^+ -Linie.

In diamagnetischen Atomen und Verbindungen (Atome mit $J = 0$) kann man analog zur Elektronenspinresonanz Übergänge zwischen verschiedenen Niveaus der Einstellungen des Kernspins in einem äußeren Magnetfeld nachweisen. Die zur Aufspaltung

$$\Delta W_K = g_I \mu_K B_0 I_z \quad (365)$$

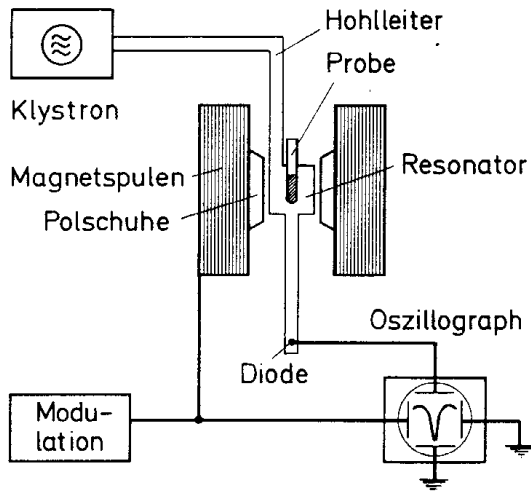


Abbildung 56: Schematische Darstellung des Versuchs. Die Spannung an den Spulen des Modulationsfeldes wird an die x -Ablenkung und das Signal der Diode an die y - Ablenkung eines Oszillographen gelegt. Im Falle der Resonanz nimmt das Signal in der Diode ab, da dem Feld Energie entzogen wird. Aus Haken Wolf, Atomphysik

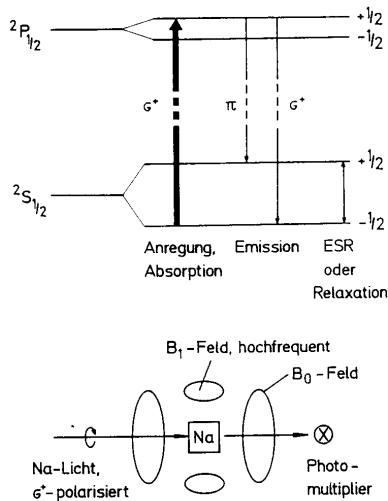


Abbildung 57: Nachweis der Elektronenspinresonanz durch einen viel höherenergetischen optischen Übergang. Gleichzeitig zeigt die Figur ein Beispiel für das sog. optische Pumpen. Aus Haken Wolf, Atomphysik

gehörigen Frequenzen liegen nun wegen des kleinen Werts von μ_K im Mhz Bereich und man kann daher einfache Spulen mit einem Magnetfeld senkrecht zur Richtung des Feldes B_0 verwenden. Die magnetischen Momente

$$\mu_K = g_I \mu_K \frac{I}{\hbar} \quad (366)$$

und damit die die Anomaliefaktoren g_I sind gut bekannt. Es gibt zwei sehr wichtige Anwendungen der Kernspinresonanz:

Chemische Strukturuntersuchungen Die Elektronenhülle diamagnetischer Moleküle bewirkt eine von der Molekülstruktur abhängige Abschirmung des Magnetfeldes B_0 . Dies gibt eine sog. chemische Verschiebung der Resonanzfrequenz von typisch 10^{-6} . Durch Messen der Resonanzfrequenz von Protonen kann man damit die Anzahl von OH-, CH₂- oder CH₃-Gruppen in einer Verbindung analysieren.

Computer Tomographie Auch Wasser gehört zu den diamagnetischen Molekülen. Es ist im Körper besonders häufig. Die räumliche Verteilung der Protonen des H₂O in einer Gewebeprobe kann gemessen werden, wenn diese sich in einem inhomogenen Magnetfeld befindet, dessen räumliche Gestalt genau bekannt ist. Aus der Intensität der zu den verschiedenen Magnetfeldstärken gehörigen Resonanzlinien kann die räumliche Verteilung der Protonen (im H₂O) berechnet werden. Die Details dieser Rekonstruktion sind kompliziert und die CT-Verfahren sind ein Musterbeispiel für die Zusammenarbeit von Physikern, Mathematikern und Informatikern in einem fortgeschrittenen Feld der Technik.

6 Strahlungsprozesse

6.1 Auswahlregeln

In einer Gasentladung werden die Atome durch den Strom (also durch Elektronenstoß) in angeregte Zustände gebracht. Die Atome im Gas sind weit voneinander entfernt und beeinflussen sich daher nicht. Der Übergang in den Grundzustand oder einen anderen energetisch tiefer liegenden Zustand wird als spontane Emission bezeichnet. Diese ist im Rahmen der Schrödinger Theorie nicht berechenbar. Wir haben gesehen, daß in der Quantenmechanik der Erwartungswert von Observablen A aus Integralen der Art

$$\langle A \rangle = \int \psi^* A_{\text{op}} \psi dV \quad (367)$$

berechnet werden kann, worin A_{op} aus dem klassischen Ausdruck gewonnen wird. In der QED wird gezeigt, daß die Übergangsamplitude von einem Anfangszustand $|i\rangle = |A^*\rangle$ eines angeregten Atoms in einen Endzustand $|f\rangle = |A, \gamma\rangle$ von Atom+Photon in führender Ordnung durch das Matrixelement

$$T_{fi} = \langle f|T|i\rangle = \int \psi_f^* \mathbf{r}_{\text{op}} \psi_i dV \quad (368)$$

gegeben ist. Im Unterschied zu (367) tauchen in (368) Wellenfunktionen zu unterschiedlichen Zuständen auf. In (368) kann \mathbf{r} als das atomare elektrische Dipolmoment geteilt durch e interpretiert werden und daher erklärt sich der Name „elektrische Dipolnäherung“. Die abgestrahlte Leistung pro Atom wird aus der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit \dot{w}_S der spontanen Emission mit Hilfe der Beziehung $P = \hbar\omega_0 \dot{w}$ zu

$$P = \frac{4\omega_0^4}{3c^2} \alpha \hbar |T_{fi}|^2 \quad (369)$$

berechnet. Diese Formel entspricht damit der Gleichung (140) für die Abstrahlung eines Elektrons auf einer Kreisbahn, wenn dort r^2 durch $|T_{fi}|^2$ ersetzt wird und ein zusätzlicher Faktor 2 die Abstrahlung von rechts- bzw. linkszirkular polarisierten Wellen durch rechts- und linksumlaufende Elektronen berücksichtigt. Außerdem ist $\omega_0 = \Delta W/\hbar$ wie immer in der Atomphysik.

Ohne weitere explizite Rechnung lassen sich aus dem Studium des Matrixelements T_{fi} die Auswahlregeln der elektrischen Dipolstrahlung gewinnen. Mit der Forderung, daß die Übergangsamplitude in einem gespiegelten Koordinatensystem ($\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$) gleich der ursprünglichen Amplitude sein muß

$$-\int \psi_f^*(-\mathbf{r}) \mathbf{r}_{\text{op}} \psi_i(-\mathbf{r}) dV = \int \psi_f^*(\mathbf{r}) \mathbf{r}_{\text{op}} \psi_i(\mathbf{r}) dV \quad (370)$$

folgt

$$\Delta L = L_f - L_i = \pm 1 \quad (371)$$

Zur Begründung überlegen wir uns, daß die Spiegelung für die Winkel die Transformationen

$$\begin{aligned} \Theta &\rightarrow \pi - \Theta \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi \end{aligned} \quad (372)$$

bewirkt. Mit Hilfe der Tabelle 2 lassen sich die Spiegelungseigenschaften

$$Y_{L,M}(\pi - \Theta, \phi + \pi) = (-1)^L Y_{L,M}(\Theta, \phi) \quad (373)$$

der Kugelflächenfunktionen verifizieren. Daher gilt

$$-1(-1)^{L_f+L_i} T_{fi} = T_{fi} \quad (374)$$

was für $L_f = L_i$ zu einem Widerspruch führt, falls T_{fi} nicht verschwindet. Neben (371) ist natürlich auch $\Delta l = \pm 3, 5..$ etc erlaubt. Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten zeigt aber, daß diese Übergänge unterdrückt sind.

Die Beziehung (373) wird auch so interpretiert, daß Atome mit einer definierten Wellenfunktion $\psi_{n,L,M}$ sich in einem Zustand definierter Parität befinden. Der Paritätsoperator P spiegelt die Koordinaten und offenbar gilt die Eigenwertgleichung

$$PY_{L,M} = (-1)^L Y_{L,M} \quad (375)$$

Die Beziehung (370) legt die *Spiegelinvarianz* der elektromagnetischen Wechselwirkung fest. Zur großen Überraschung der Physiker, gilt sie nicht in der schwachen Wechselwirkung (β -Radioaktivität).

Im Magnetfeld ist die el. Dipolstrahlung polarisiert. Für eine Welle, deren Feldvektor in z -Richtung schwingt, trägt nur $\int \psi_f^* z \psi_i dV$ bei. Das Matrixelement enthält einen Faktor

$$\int e^{i(M_f - M_i)\phi} dV \quad (376)$$

und verschwindet demnach für $M_f \neq M_i$. Die Strahlung, die sich senkrecht zum Feld ausbreitet, ist in der Feldrichtung linear polarisiert. Es sind die π -Linien des Zeeman-Effekts mit der Auswahlregel $\Delta M = 0$. Jetzt untersuchen wir zirkular polarisierte Strahlung in z -Richtung. Hierzu tragen die Matrixelemente $\int \psi_f^*(x \pm iy\psi_i) dV$ bei. Sie enthalten einen Faktor

$$\int e^{i(M_f - M_i \pm 1)\phi} dV \quad (377)$$

und daher gehören die Übergänge mit $\Delta M \pm 1$ zu rechts bzw. linkszirkular polarisierten Wellen entlang der z -Richtung. Es sind die σ -Linien des Zeeman-Effekts.

Die Spins ändern sich bei der elektrischen Dipolstrahlung nicht. Aus den Regeln der Zusammensetzung der Drehimpulse folgern wir daher

$$\Delta J_z = 0, \pm 1 \quad (378)$$

und

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (379)$$

wobei der Übergang $J = 0 \rightarrow J = 0$ aber verboten ist.

Die Auswahlregeln müssen im Teilchenbild so interpretiert werden, daß die Photonen den Spin 1 haben, wobei die beiden möglichen Einstellungen $s_z \pm 1$ zu rechts- bzw. linkszirkular

polarisierten Wellen gehören. Die an sich erwartete dritte Einstellmöglichkeit $s_z = 0$ fehlt. Es kann gezeigt werden, daß dies mit $m_\gamma = 0$ zusammenhängt.

Prozesse, bei denen der Spin des Atoms sich ändert, gehören zur magnetischen Dipolstrahlung, deren Matrixelement durch

$$T_{fi} = \int \psi_f^* \mathbf{J}_{\text{op}} \psi_i dV \quad (380)$$

festgelegt ist, weil das magnetische Moment proportional zum Drehimpuls ist. Drehimpulse ändern bei einer Spiegelung der Koordinaten ihr Vorzeichen nicht ($\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{J}$) und daher gilt die Auswahlregel $\Delta L = 0$. Magnetische Dipolübergänge erlauben aber Änderungen des Spins. Diese Übergänge sind jedoch typisch um einen Faktor v^2/c^2 unterdrückt.

6.2 Die Linienform

Die Zahl der Übergänge aus einem höheren in einen niederen Zustand ist durch das Zerfallsgesetz

$$dN = -N \frac{dt}{\tau} \quad (381)$$

bzw.

$$N = N_0 e^{-t/\tau} \quad (382)$$

bestimmt. Hierin ist N_0 die Zahl der angeregten Atome zur Zeit $t = 0$ und die Zeit τ wird als Lebensdauer des angeregten Zustands bezeichnet. In der Kernphysik ist der Gebrauch der Halbwertszeit $t_{1/2} = \tau \ln 2$ verbreitet.

Der Betrag der pro Atom abgestrahlten Leistung wird aus

$$P = \hbar\omega_0 \frac{dN}{Ndt} = \frac{\hbar\omega_0}{\tau} \quad (383)$$

berechnet. Durch Vergleich mit (369) finden wir

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4\omega_0^3}{3c^2} \alpha |T_{fi}|^2 \quad (384)$$

Anstelle der Lebensdauer wird besonders bei sehr kleinen Werten von τ die Zerfallsbreite

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (385)$$

benutzt. Die numerische Umrechnung lautet $\Gamma = 65.823 \cdot 10^{-8} \text{ eVns}/\tau$.

Die elektrische Feldstärke der ausgestrahlten Welle hat für $t \geq 0$ das zeitliche Verhalten

$$E = E_0 e^{-t/(2\tau)} \cos \omega_0 t \quad (386)$$

Nach Fourier ist mit jeder Abweichung von einer rein periodischen Form ein Frequenzspektrum $\sim c(\omega)$ mit

$$c(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{-i\omega t} dt \quad (387)$$

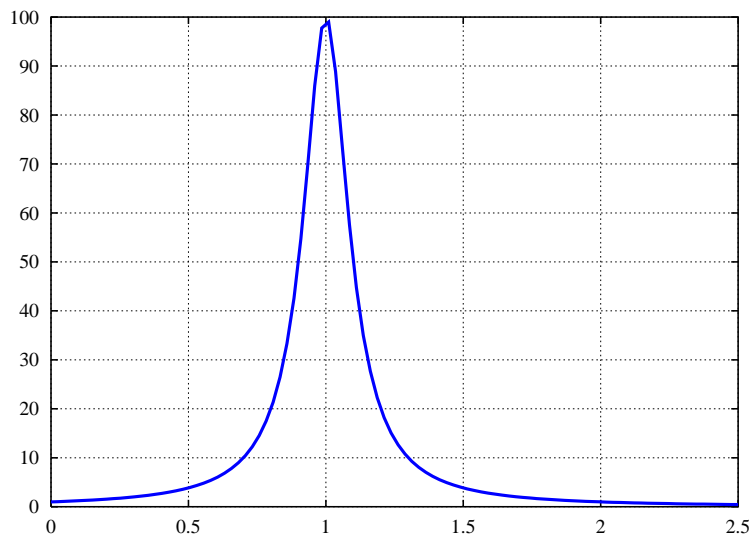


Abbildung 58: Lorentzkurve I/I_0 nach (389) aufgetragen gegen ω/ω_0 mit einer Halbwertsbreite $\Delta\omega = 0.2\omega_0$.

verbunden. Die Auswertung mit (386) ergibt

$$c(\omega) = -\frac{E_0}{2} \left(\frac{1}{i(\omega_0 - \omega) - \Delta\omega/2} + \frac{1}{i(-\omega_0 - \omega) - \Delta\omega/2} \right) \quad (388)$$

mit $\Delta\omega = 1/\tau$. Der erste Term überwiegt vollständig in der Umgebung von $\omega = \omega_0$ und wir vernachlässigen deshalb den Beitrag des zweiten Terms. Die Intensität der Spektrallinie hat daher die Form

$$I(\omega) = I_0 \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Delta\omega)^2/4} \quad (389)$$

Die charakteristische Frequenzabhängigkeit dieser sog. Lorentz-Kurve ist in Abb. 58 gezeigt. $\Delta\omega$ hat die sehr anschauliche Bedeutung der Halbwertsbreite. Mit (385) folgt daher für die Energieunschärfe der Photonen

$$\Gamma = \hbar\Delta\omega = \frac{\hbar}{\tau} \quad (390)$$

also

$$\Gamma\tau = \hbar \quad (391)$$

in Übereinstimmung mit der Unschärferelation.

Als Beispiel berechnen wir die Linienbreite der H_α Linie. Mit MAPLE finden wir sofort $T_{fi} = 1.85a_B^2$ und damit $\tau = 4.5 \cdot 10^{-8}$ s bzw. $\Gamma = 1.4 \cdot 10^{-8}$ eV. Solche für die Atomphysik typischen geringen Linienbreiten sind mit normalen optischen Methoden nicht meßbar. Die experimentelle Linienbreite ist meistens sehr viel größer als diese sog. natürliche Breite.

In einer Gasentladung stammt die größte Verbreiterung vom Doppler-Effekt. Gasatome, die sich mit der Geschwindigkeit v bewegen, bewirken eine Frequenzverschiebung $\Delta\omega/\omega_0 = v/c$. Ausgehend von der Geschwindigkeitsverteilung

$$n(v)dv \sim e^{-W_{\text{kin}}/kT} \quad (392)$$

in einem Gas (Physik II), folgt die Intensitätsverteilung einer Gaußkurve

$$I(\omega) = I_0 \exp \left[\frac{-W_0}{kT} \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \right)^2 \right] \quad (393)$$

mit der relativen Halbwertsbreite

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = 2 \left(\frac{2kT \ln 2}{W_0} \right)^{1/2}, \quad (394)$$

worin W_0 die Ruheenergie des Atoms ist. Für unser Beispiel ergibt dies bei 1000 K einen Wert von $1.56 \cdot 10^{-5}$. Das ist sehr groß verglichen mit $0.75 \cdot 10^{-8}$ für die natürliche Linienbreite.

6.3 Der schwarze Strahler

6.3.1 Strahlung fester Körper und Hohlraumstrahlung

Bisher haben wir uns nur mit den Strahlungsgesetzen einzelner räumlich gut getrennter Atome beschäftigt. Die Strahlung eines Gases wird durch die Summe der Strahlung der einzelnen Atome beschrieben.

Von großer praktischer und grundsätzlicher Bedeutung ist es jedoch, die Strahlung von festen Körpern quantitativ zu verstehen, man denke z.B. an die Strahlung einer Herdplatte oder der Sonne! Intuitiv erwarten wir ein kontinuierliches Frequenzspektrum. Es ist ein wesentliches Ergebnis der Festkörperphysik, daß in einem Kristall mit N regelmäßig angeordneten Atomen jede Linie in N Linien aufspaltet. Durch die Wechselwirkung benachbarter Atome wird es zusätzliche Verschiebungen und Verschmierungen geben, so daß im Termschema anstelle von Linien breite Bänder auftreten. In einem dichten ungeordneten Körper wird es sehr wenig erkennbare Strukturen der erlaubten Zustände geben.

Angesichts dieser Überlegungen erscheint es hoffnungslos, die spektrale Intensitätsverteilung

$$I_f = \frac{dI}{df} = \frac{d^2P}{dA df} \quad (395)$$

der von einem Oberflächenelment dA eines glühenden Körpers der Temperatur T ausgesandten Strahlung zu berechnen. Es stellt sich aber heraus, daß im Grenzfall des sog. schwarzen Strahlers eine exakte Berechnung möglich ist. Die zuerst von Max Planck im Jahre 1900 durchgeführte Rechnung gilt als einer der Startpunkte der Quantentheorie. Wir werden hier die Herleitung mit Hilfe der Regeln der QED durchführen.

Von Kirchhoff wurde gezeigt, daß I_f sich in ein Produkt

$$I_f(T, f, \dots) = \epsilon_A(f, \dots) I_f^B(T, f) \quad (396)$$

zerlegen läßt, worin I_f^B eine universelle Funktion ist (mit dem Index B für *black*) und $\epsilon_A(f, \dots)$ das spektrale Absorptionsvermögen eines bestimmten Körpers bezeichnet. Auf den Körper

auffallende Strahlung wird absorbiert bzw. reflektiert. $\epsilon_A df$ ist der Bruchteil der im Frequenzintervall zwischen f und $f + df$ absorbierten Intensität. Das Absorptionsvermögen hängt von der Frequenz und vielen weiteren Parametern (z.B. der Beschaffenheit der Oberfläche) ab, dies wird durch die Punkte im Argument von ϵ_A und I_f angedeutet. Einen Körper mit $\epsilon_A \equiv 1$, der also alle auffallende Energie absorbiert, bezeichnet man als „schwarz“. Wesentlich besser als durch einen schwarzen Anstrich kann diese Eigenschaft in einem auf der Temperatur T gehaltenen Hohlraum mit einer Öffnung der Fläche A erzielt werden, da es sehr unwahrscheinlich ist, daß von außen auf die Öffnung auftreffende Photonen, den Hohlraum wieder verlassen können (Abb. 59).

6.3.2 Atome im Strahlungsfeld

Die Beziehung (368) definiert die Übergangsamplitude der *spontanen* Emission. Unter Weglassung des Symbols für das emittierende Atom schreiben wir $T_{fi} = \langle \gamma | T | 0 \rangle$, die Amplitude beschreibt die Erzeugung eines Photons aus dem Vakuum in einen Zustand α mit einer ganz bestimmten Energie, Richtung und Polarisation. Diese Amplitude wird ab jetzt mit t_S abgekürzt.

Photonen sind Teilchen mit Spin eins, sie unterliegen also nicht dem Pauli-Verbot. Im Hohlraum des Volumens V kann es schon N_α Photonen mit genau den gleichen Eigenschaften geben. Ein wesentliches Ergebnis der QED besagt nun, daß die Amplitude für den Übergang von N_α nach $(N_\alpha + 1)$ Photonen im *gleichen* Zustand α durch

$$\langle (N_\alpha + 1)\gamma | T | N_\alpha\gamma \rangle = \sqrt{N_\alpha + 1} t_S \quad (397)$$

gegeben ist. Die zugehörige Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit

$$\dot{w} = (N_\alpha + 1)\dot{w}_S \quad (398)$$

ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten für induzierte Emission

$$\dot{w}_I = N_\alpha \dot{w}_S \quad (399)$$

und der Wahrscheinlichkeit \dot{w}_S für spontane Emission.

Atome im Grundzustand können Photonen absorbieren. Für die zugehörige Amplitude $\langle (N_\alpha - 1)\gamma | T | N_\alpha\gamma \rangle$ gilt wegen der Invarianz der Naturgesetze gegen Spiegelungen des zeitlichen Ablaufs

$$\langle (N_\alpha - 1)\gamma | T | N_\alpha\gamma \rangle = \langle N_\alpha\gamma | T | (N_\alpha - 1)\gamma \rangle , \quad (400)$$

also

$$\langle N_\alpha\gamma | T | (N_\alpha - 1)\gamma \rangle = \sqrt{N_\alpha} t_S . \quad (401)$$

Hierzu gehört die Übergangswahrscheinlichkeit für induzierte Absorption

$$\dot{w}_A = N_\alpha \dot{w}_S . \quad (402)$$

Die Herleitung der Beziehung (397) ist auf verschiedenen Wegen möglich¹². Wir machen uns hier einen weiteren Lehrsatz aus der Quantentheorie von Vielteilchensystemen zunutze. Er besagt, daß die Wellenfunktion eines System von N Photonen symmetrisch gegenüber einer Vertauschung der Photonen sein muß. Dies ist der entscheidende Unterschied zwischen Bosonen (Teilchen mit Spin 0 oder 1) und Fermionen. Man sagt, Photonen genügen der Bose-Statistik, Elektronen der Fermi-Statistik. Im Gegensatz zu Elektronen können Photonen in genau gleichen Zuständen auftreten. Zwei Photonen im Zustand α werden dann durch

$$|\gamma\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\gamma_1\gamma_2\rangle + |\gamma_2\gamma_1\rangle) \quad (403)$$

und 3 Photonen im gleichen Zustand durch

$$|\gamma\gamma\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|\gamma_1\gamma_2\gamma_3\rangle + |\gamma_1\gamma_3\gamma_2\rangle + |\gamma_3\gamma_1\gamma_2\rangle + |\gamma_3\gamma_2\gamma_1\rangle + |\gamma_2\gamma_1\gamma_3\rangle + |\gamma_2\gamma_3\gamma_1\rangle) \quad (404)$$

beschrieben. Der Vorfaktor stellt die Normierung (z.B. $\langle\gamma\gamma|\gamma\gamma\rangle = 1$) sicher. Die Verallgemeinerung auf N Photonen ist klar. Es gibt $N!$ Permutationen und der Vorfaktor lautet $1/\sqrt{N!}$. Nun gilt für die Übergänge offensichtlich

$$\langle\gamma_1\gamma_2\gamma_3|T|\gamma_1\gamma_2\rangle = \langle\gamma_1\gamma_2|\gamma_1\gamma_2\rangle\langle\gamma_3|T|0\rangle = t_S \quad , \quad (405)$$

aber

$$\langle\gamma_1\gamma_2\gamma_3|T|\gamma_2\gamma_1\rangle = 0 \quad , \quad (406)$$

da die Zustände $|\gamma_1\gamma_2\rangle$ und $|\gamma_2\gamma_1\rangle$ orthogonal zueinander sind. Mit ähnlichen Argumenten für die anderen möglichen Kombinationen ist daher die Amplitude für den Übergang von zwei nach drei Photonen durch $t_S 3!/\sqrt{2!3!}$ gegeben. Die Verallgemeinerung liefert das Ergebnis (397)

$$\langle(N_\alpha + 1)\gamma|T|N_\alpha\gamma\rangle = \frac{(N_\alpha + 1)!}{\sqrt{N_\alpha!(N_\alpha + 1)!}}t_S = \sqrt{(N_\alpha + 1)}t_S \quad . \quad (407)$$

6.3.3 Das Strahlungsgesetz von Planck

Nach diesen nicht ganz einfachen Überlegungen, (die beim ersten Lesen auch überschlagen werden können), wollen wir nun die Zahl N_α der Photonen im Hohlraum finden, die sich in einem ganz bestimmten Zustand α befinden. Dazu stellen wir uns vor, daß es in den Wänden des Hohlraums Atome gibt, deren Anregungsenergie genau der Energie der Photonen im Zustand α entspricht. Diese sollen sich im thermischen Gleichgewicht mit der Strahlung im Hohlraum befinden. Damit soll gesagt werden, daß die Gesamtzahl der Absorptionsprozesse gleich der Gesamtzahl der Emissionsprozesse ist. Mit N_1 Atomen im Grundzustand und N_2 Atomen im angeregten Zustand bedeutet dies

$$N_1\dot{w}_A = N_2(\dot{w}_I + \dot{w}_S) \quad . \quad (408)$$

¹²Siehe z.B. die elementare Diskussion in Feynman Lectures of Physics, Band 3, oder Feynmans Buch Quantum Electrodynamics oder im Lehrbuch Relativistische Quantentheorie von Landau und Lifshitz.

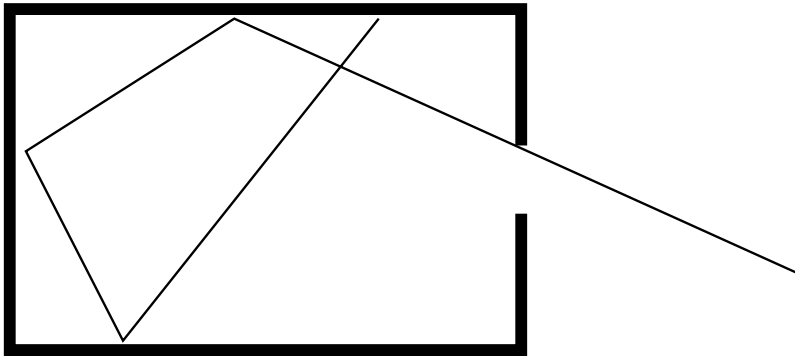


Abbildung 59: Der Hohlraum als Modell eines idealen schwarzen Strahlers.

Daraus wird mit Hilfe von (398) und (402)

$$N_1 N_\alpha \dot{w}_S = N_2 (N_\alpha + 1) \dot{w}_S . \quad (409)$$

Nun benutzen wir das Gesetz von Boltzmann

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\Delta W/kT} , \quad (410)$$

welches das Verhältnis der Zahl der Atome im angeregten Zustand und im Grundzustand festlegt, falls thermisches Gleichgewicht vorliegt. Einsetzen in (409) und Auflösen nach N_α ergibt mit $\Delta W = W_\gamma$

$$N_\alpha = \frac{1}{e^{W_\gamma/kT} - 1} . \quad (411)$$

In diesem Grundgesetz der Bose-Statistik ist die Zahl und Beschaffenheit der Atome des Strahlers überhaupt nicht mehr enthalten! Was zunächst kompliziert erschien, ist besonders einfach geworden. Wir fassen nun W_γ als Variable auf. In (411) ist auch die Richtung und die Polarisation der Photonen festgelegt. Um die Zahl dN_γ der Photonen mit Energien zwischen W_γ und $W_\gamma + dW_\gamma$ zu erhalten müssen wir (411) mit der Zahl dN_Z der Zustände mit Energien zwischen W_γ und $W_\gamma + dW_\gamma$ multiplizieren, $dN_\gamma = N_\alpha dN_Z$. Zur Berechnung von dN_Z formen wir (311) ein wenig um und multiplizieren mit einem Faktor 2, um die beiden Polarisationen von Photonen zu berücksichtigen, daher gilt

$$dN_Z = \frac{V W_\gamma^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} dW_\gamma . \quad (412)$$

Die Anzahldichte der Photonen ist durch $n_\gamma = N_\gamma/V$ festgelegt und damit folgt

$$\frac{dn_\gamma^B}{dW_\gamma} = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{W_\gamma^2}{e^{W_\gamma/kT} - 1} \quad (413)$$

als erste Form des Planckschen Strahlungsgesetzes für die Hohlraum- oder Schwarzkörperstrahlung. Die Energiedichte der Strahlung ist durch $u = W_\gamma n_\gamma$ definiert, damit ergibt sich die Dichteverteilung $u_W = du/dW_\gamma$ zu

$$u_W^B = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{W_\gamma^3}{e^{W_\gamma/kT} - 1} , \quad (414)$$

während die spektrale Energiedichte $u_f^B = du^B/df$ durch

$$u_f^B = \frac{16\pi^2\hbar}{c^3} \frac{f^3}{e^{2\pi\hbar f/kT} - 1} \quad (415)$$

gegeben ist.

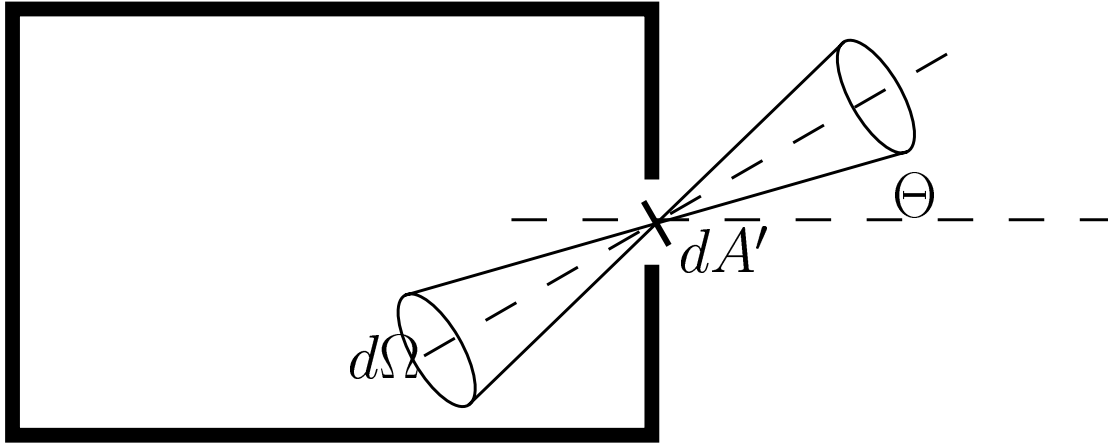


Abbildung 60: Zur Herleitung von (417).

Schließlich brauchen wir noch I_f^B die spektrale Verteilung der von der Öffnung des Hohlraums oder einem Flächenelement dA eines schwarzen Körpers emittierten Intensität. Zur Berechnung betrachten wir die Abb. 60. Im Kegel mit dem Öffnungswinkel $\Delta\Omega$ ist der Bruchteil $u_f^B d\Omega/4\pi$ der Energiedichte enthalten. Für die Intensität erhalten wir die Winkelverteilung

$$\frac{dI_f^B}{d\Omega} = \frac{u_f}{4\pi} c \cos \Theta, \quad (416)$$

da $dA' = dA/\cos \Theta$ die wirksame Fläche senkrecht zur Kegelmantelachse ist. Die Integration über den Raumwinkel ergibt

$$I_f^B = \frac{4\pi^2\hbar}{c^2} \frac{f^3}{e^{2\pi\hbar f/kT} - 1} \quad (417)$$

als vierte Form des Planckschen Gesetzes. Der berühmte Funktionsverlauf ist für $T = 3000$ K und $T = 6000$ K in Abb. 61 gezeigt.

Die Sonne ist näherungsweise ein schwarzer Strahler mit einer Temperatur von 5780 K. Das Weltall ist ein idealer schwarzer Strahler mit einer Temperatur von 2.726 K, Abb. 62. Rechnungen zeigen, daß bei einer Temperatur von 3000 K in einem Wasserstoffgas nicht mehr genügend Ionisationsprozesse stattfinden, um ein Gleichgewicht zwischen Ionisation und Rekombination aufrecht zu erhalten. Das Gas wird für die Photonen durchsichtig. Die kosmische Hintergrundstrahlung stammt also aus einer Zeit mit einer Temperatur des Weltalls von 3000 K. Dieses hat sich seitdem um einen Faktor 1100 ausgedehnt, wobei die Temperatur um den gleichen Faktor abgenommen hat.

Das Maximum der spektralen Intensität (Kurvendiskussion!) liegt bei

$$\lambda_{\max} = \frac{a}{T} \quad (418)$$

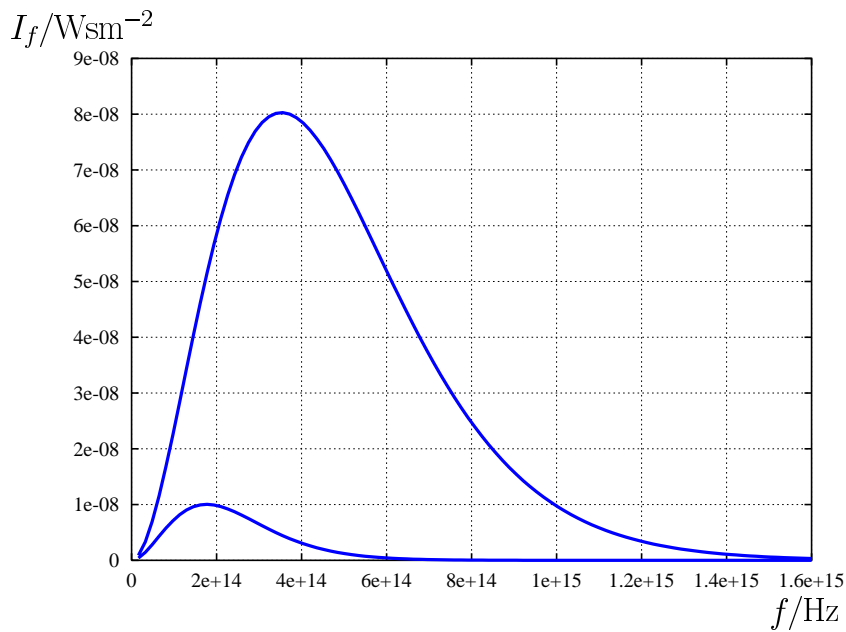


Abbildung 61: Die spektrale Intensität der Strahlung eines schwarzen Körpers nach (417) für $T = 3000 \text{ K}$ (untere Kurve) und $T = 6000 \text{ K}$ (obere Kurve).

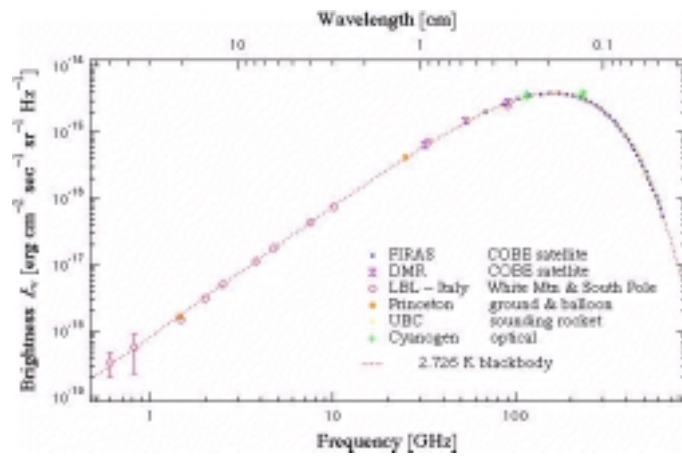


Abbildung 62: u_f der kosmischen Hintergrund-Strahlung und Vergleich mit der Planck-Formel.

mit $a = 5.08 \cdot 10^5 \text{ nmK}$. Das ist das sog. Wiensche Verschiebungsgesetz. Die Integration von (417) über die Frequenz ergibt das Stefan-Boltzmann Gesetz der Gesamtintensität

$$I^B = \sigma T^4 \tag{419}$$

mit

$$\sigma = \frac{\pi^5 k^4}{60 \hbar^3 c^2} \tag{420}$$

Der numerische Wert von σ ist $5.6705 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$.

6.3.4 Die Einstein Koeffizienten

Von Einstein wurde eine Begründung der Planckschen Formel angegeben, die unserer Ableitung sehr nahe kommt. Er führte die Begriffe spontane Emission, induzierte Emission und induzierte Absorption ein. Sie sind durch Koeffizienten A_{12} , B_{12} und B_{21} mit $B_{21} = B_{12}$ gekennzeichnet. Einstein argumentierte, daß die Wahrscheinlichkeit für induzierte Emission und Absorption proportional zur Energiedichte u_f des Strahlungsfeldes sein muß, die Bilanzgleichung lautet also

$$N_1 B_{12} u_f = N_2 (A_{12} + u_f B_{12}) \quad (421)$$

Der Vergleich mit (409) ergibt

$$\frac{A_{12}}{B_{12}} = \frac{16\pi^2 \hbar f^3}{c^3} \quad (422)$$

6.4 Der Drei-Niveau-Laser

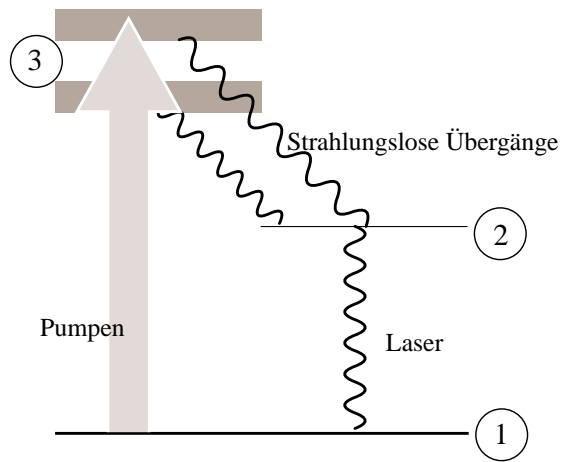


Abbildung 63: Prinzip des Drei-Niveau-Lasers. Durch optische Anregung werden die Energiebänder 3 gefüllt. Von dort gibt es strahlungslose Übergänge in das Niveau 2, welches eine lange Lebensdauer hat. Es wird $N_2 \gg N_1$ erreicht. Die Laserstrahlung ist durch induzierte kohärente Emission von 2 nach 1 gekennzeichnet.

In einem Laser ist die Verteilung der Besetzungszahlen nicht thermisch. Einfachstes Beispiel: Drei-Niveau-Laser (Abb. 63). Durch das Pumpen und die (strahlungslosen) Übergänge in das Niveau 2 (mit relativ langer Lebensdauer) wird $N(W_2) \gg N(W_1)$ erreicht. Ein Photon wird spontan aus 2 emittiert und läuft durch das Material. Durch den Prozeß der induzierten Emission werden wegen (398) aus den anderen Atomen bevorzugt Photonen ausgelöst, die sich im exakt gleichen Zustand befinden (Abb. 64). Mit $N_2 \gg N_1$ gilt angenähert

$$\frac{dN_\alpha}{dt} = N_2 \dot{w}_S N_\alpha, \quad (423)$$

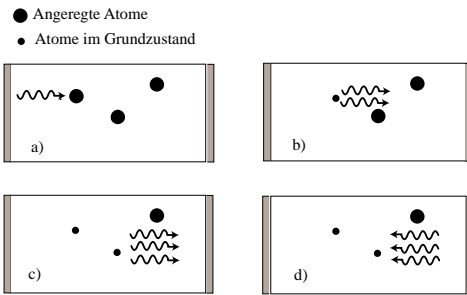


Abbildung 64: Stimulierte Emission. a) Das erste Photon kurz vor dem Stoß, b) Das Atom hat ein Photon emittiert, c) Das Photon nach dem Stoß mit dem 2. Atom, d) Die 3 Photonen sind vom Spiegel reflektiert worden.

die Zahl der Photonen im gleichen Zustand steigt also exponentiell an. Spiegel am Ende bewirken eine Umkehrung der Richtung der Photonen, so daß der Prozeß nicht frühzeitig abbricht. Die Photonen sind kohärent, d.h. die entstehende elektromagnetische Welle ist über den Querschnitt des Lasers phasengleich. Damit ist der Laser eine Quelle ebener elektromagnetischer Wellen, deren Winkeldivergenz nur durch die Beugung gegeben ist. Durch halbdurchlässige Spiegel an einem Ende kann die resultierende ebene Welle ausgekoppelt werden.