
Physik IV

Atome, Moleküle, Wärmestatistik

Vorlesungsskript zur Vorlesung im SS 2003

Prof. Dr. Rudolf Gross

Walther-Meissner-Institut
Bayerische Akademie der Wissenschaften
und
Lehrstuhl für Technische Physik (E23)
Technische Universität München

Walther-Meissner-Strasse 8
D-85748 Garching
Rudolf.Gross@wmi.badw.de

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-------------|
| Vorwort | xiii |
| I Physik der Atome und Moleküle | 1 |
| 1 Einführung in die Quantenphysik | 3 |
| 1.1 Der Welle-Teilchen Dualismus | 4 |
| 1.1.1 Dualismus des Lichtes | 4 |
| 1.1.2 Dualismus der Materie | 6 |
| 1.2 Materiewellen und Wellenfunktionen | 10 |
| 1.2.1 Wellenpakete | 11 |
| 1.2.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation | 13 |
| 1.2.3 Messprozess und Observable | 17 |
| 1.2.4 Dispersion von Materiewellen | 17 |
| 1.2.5 Gegenüberstellung Quantenphysik – klassische Physik | 19 |
| 1.3 Grundlagen der Quantenmechanik | 22 |
| 1.3.1 Schrödinger-Gleichung und Materiewellen | 22 |
| 1.3.2 Operatoren | 29 |
| 1.3.3 Erwartungswerte | 33 |
| 1.3.4 Eigenwerte und Eigenfunktionen | 34 |
| 1.3.5 Zulässige Operatoren | 36 |
| 1.3.6 Vertiefungsthema: Quantenmechanische Bewegungsgleichung | 37 |
| 1.3.7 Vertiefungsthema: Vertauschungsrelationen und Heisenbergsche Unschärferelation | 38 |
| 1.3.8 Anwendungen | 40 |
| 1.4 Ununterscheidbarkeit | 41 |
| 1.5 Fermionen und Bosonen | 45 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1.5.1 | Der Spin von Quantenteilchen | 45 |
| 1.5.2 | Quantenteilchen mit ganz- und halbzahligem Spin | 46 |
| 1.6 | Austauschsymmetrie und Pauli-Verbot | 48 |
| 1.6.1 | Die Austauschsymmetrie | 48 |
| 1.6.2 | Das Pauli-Verbot | 50 |
| 1.7 | Vertiefungsthema: Zur Axiomatik der Quantenmechanik | 52 |
| 2 | Aufbau der Atome | 57 |
| 2.1 | Historisches | 58 |
| 2.2 | Experimenteller Nachweis der Existenz von Atomen | 59 |
| 2.3 | Größe, Masse und elektrischer Aufbau von Atomen | 63 |
| 2.3.1 | Größe von Atomen | 63 |
| 2.3.2 | Der elektrische Aufbau von Atomen | 64 |
| 2.3.3 | Bestimmung der Atommasse | 65 |
| 2.4 | Die Struktur von Atomen | 69 |
| 2.4.1 | Geschichtliche Entwicklung | 69 |
| 2.4.2 | Grundlagen zu Streuexperimenten | 71 |
| 3 | Das Einelektronenatom | 81 |
| 3.1 | Experimentelle Grundlagen | 82 |
| 3.1.1 | Spektralanalyse | 82 |
| 3.1.2 | Anregung von Atomen | 83 |
| 3.1.3 | Das Spektrum des Wasserstoffs | 84 |
| 3.2 | Das Bohrsche Atommodell | 88 |
| 3.3 | Die Schrödinger-Gleichung für Einelektronenatome | 94 |
| 3.3.1 | Schwerpunkt- und Relativbewegung | 94 |
| 3.3.2 | Teilchen im kugelsymmetrischen Potenzial | 96 |
| 3.3.3 | Winkelabhängigkeit | 98 |
| 3.3.4 | Der Drehimpuls | 106 |
| 3.3.5 | Die Radialabhängigkeit | 113 |
| 3.3.6 | Quantenzahlen | 119 |
| 3.3.7 | Aufenthaltswahrscheinlichkeiten | 122 |
| 3.4 | Der Elektronenspin | 125 |
| 3.4.1 | Experimentelle Fakten | 125 |
| 3.4.2 | Vertiefungsthema: Theoretische Beschreibung des Spins | 127 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4 | Das Wasserstoffatom | 135 |
| 4.1 | Experimentelle Befunde | 136 |
| 4.2 | Relativistische Korrektur der Energieniveaus | 137 |
| 4.3 | Die Spin-Bahn-Kopplung: Feinstruktur | 139 |
| 4.3.1 | Der Spin-Bahn-Kopplungsterm | 139 |
| 4.3.2 | Der Gesamtdrehimpuls | 141 |
| 4.3.3 | Energieniveaus des Wasserstoffatoms bei Spin-Bahn-Kopplung | 143 |
| 4.3.4 | Die Feinstruktur beim Wasserstoffatom | 145 |
| 4.4 | Die Lamb-Shift | 148 |
| 4.5 | Die Hyperfeinstruktur | 154 |
| 4.6 | Das Wasserstoffatom im Magnetfeld: Normaler Zeeman-Effekt | 159 |
| 4.6.1 | Klassisches Teilchen im Magnetfeld | 159 |
| 4.6.2 | Vertiefungsthema: Quantenmechanische Beschreibung | 165 |
| 4.7 | Anomaler Zeeman- und Paschen-Back-Effekt | 168 |
| 4.7.1 | Der anomale Zeeman-Effekt | 168 |
| 4.7.2 | Der Paschen-Back-Effekt | 172 |
| 4.8 | Der Stark-Effekt | 175 |
| 4.9 | Vollständiges Termschema des Wasserstoffatoms | 176 |
| 4.10 | Vertiefungsthemen | 178 |
| 4.10.1 | Das Modell des Elektrons | 178 |
| 4.10.2 | Vertiefungsthema: Das Korrespondenzprinzip | 180 |
| 5 | Wasserstoffähnliche Systeme | 185 |
| 5.1 | He^+ , Li^{++} und Be^{+++} | 186 |
| 5.2 | Die schweren Wasserstoffisotope | 187 |
| 5.3 | Rydbergatome | 188 |
| 5.4 | Exotische Atome | 191 |
| 5.4.1 | Myonische Atome | 191 |
| 5.4.2 | Anti-Wasserstoff | 193 |
| 5.4.3 | Positronium | 194 |
| 5.5 | Quarkonium | 196 |
| 5.6 | Exzitonen | 196 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 6 | Übergänge zwischen Energieniveaus | 199 |
| 6.1 | Übergangswahrscheinlichkeiten | 200 |
| 6.1.1 | Spontane und stimulierte Übergänge | 200 |
| 6.2 | Lebensdauer angeregter Zustände | 205 |
| 6.3 | Linienbreiten von Spektrallinien | 208 |
| 6.3.1 | Natürliche Linienbreite | 209 |
| 6.3.2 | Dopplerverbreiterung | 211 |
| 6.3.3 | Stoßverbreiterung | 213 |
| 6.4 | Übergangsmatrixelemente | 217 |
| 6.4.1 | Parität | 219 |
| 6.4.2 | Auswahlregeln | 221 |
| 6.4.3 | Auswahlregeln für die Bahndrehimpulsquantenzahl – Paritätsauswahlregeln . . . | 222 |
| 6.4.4 | Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl | 223 |
| 6.4.5 | Auswahlregeln für die Spinquantenzahl | 227 |
| 6.4.6 | Stärke des Dipolübergangs | 228 |
| 6.4.7 | Vertiefungsthema: Multipol-Übergänge höherer Ordnung | 232 |
| 6.4.8 | Vertiefungsthema: Zwei-Photonen-Übergänge | 232 |
| 6.4.9 | Vertiefungsthema: Spektrales Lochbrennen | 234 |
| 7 | Mehrelektronenatome | 237 |
| 7.1 | Das Heliumatom | 238 |
| 7.1.1 | Die Zentralfeldnäherung | 239 |
| 7.1.2 | Symmetrie der Wellenfunktion | 243 |
| 7.2 | Numerische Methoden und Näherungsverfahren | 249 |
| 7.2.1 | Das Modell unabhängiger Elektronen | 249 |
| 7.2.2 | Das Hartree-Verfahren | 250 |
| 7.3 | Der Gesamtdrehimpuls | 252 |
| 7.3.1 | Die L-S - oder Russel-Saunders-Kopplung | 252 |
| 7.3.2 | Die j-j -Kopplung | 253 |
| 7.3.3 | Termschema bei L-S-Kopplung | 255 |
| 7.3.4 | Beispiele für Drehimpulskopplungen und Termschemata | 256 |
| 7.4 | Der Grundzustand des Vielelektronenatoms – Hundzsche Regeln | 258 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 7.5 | Vertiefungsthema: Atomarer Magnetismus | 261 |
| 7.6 | Die Elektronenstruktur von Vielelektronenatomen | 262 |
| 7.6.1 | Schalen und Unterschalen | 263 |
| 7.6.2 | Aufbau der Atomhülle mit zunehmender Kernladungszahl | 265 |
| 7.6.3 | Das Periodensystem der Elemente | 270 |
| 7.7 | Spektren der Mehrelektronenatomen | 273 |
| 7.7.1 | Termschema des Heliumatoms | 273 |
| 7.7.2 | Alkalimetalle | 275 |
| 7.7.3 | Erdalkalimetalle | 278 |
| 8 | Angeregte Atomzustände | 281 |
| 8.1 | Einfachanregungen | 283 |
| 8.1.1 | Anregung und Rekombination durch Stoßprozesse | 284 |
| 8.2 | Komplexere Anregungsprozesse | 286 |
| 8.2.1 | Anregung mehrerer Elektronen – Autoionisation | 286 |
| 8.2.2 | Innerschalenanregungen | 287 |
| 8.3 | Röntgenstrahlung | 289 |
| 8.3.1 | Erzeugung von Röntgenstrahlung | 290 |
| 8.3.2 | Das Röntgenspektrum | 292 |
| 8.3.3 | Die Feinstruktur der Röntgenlinien | 301 |
| 8.3.4 | Vertiefungsthema: Streuung und Absorption von Röntgenstrahlung | 303 |
| 8.3.5 | Vertiefungsthema: Röntgenfluoreszenz | 307 |
| 8.3.6 | Vertiefungsthema: Monochromatisierung von Röntgenstrahlung | 308 |
| 9 | Moleküle | 313 |
| 9.1 | Das Einelektronen-Molekül — H_2^+ -Molekülion | 316 |
| 9.1.1 | Die Schrödinger-Gleichung des Einelektronenmoleküls | 316 |
| 9.1.2 | Die adiabatische Näherung | 317 |
| 9.1.3 | Lösung der elektronischen Wellengleichung | 318 |
| 9.2 | Das Vielelektronen-Molekül — H_2 -Molekül | 328 |
| 9.2.1 | Die Molekülorbitalnäherung | 328 |
| 9.2.2 | Die Heitler-London Näherung | 330 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 9.2.3 | Vergleich der Näherungen | 332 |
| 9.2.4 | Die Molekülbindung | 334 |
| 9.3 | Elektronische Zustände zweiatomiger Moleküle | 336 |
| 9.4 | Die Kernbewegung | 340 |
| 9.4.1 | Der starre Rotator | 340 |
| 9.4.2 | Molekülschwingungen | 343 |
| II | Wärme-statistik | 349 |
| 10 | Grundlagen der Wärmelehre | 351 |
| 10.1 | Systeme, Phasen und Gleichgewicht | 352 |
| 10.1.1 | Systeme | 352 |
| 10.1.2 | Phasen | 352 |
| 10.1.3 | Gleichgewicht | 353 |
| 10.2 | Zustandsgrößen | 355 |
| 10.2.1 | Definitionen | 355 |
| 10.2.2 | Die Temperatur | 357 |
| 10.2.3 | Der Druck | 357 |
| 10.2.4 | Teilchenzahl, Stoffmenge und Avogadrozahl | 358 |
| 10.2.5 | Die Entropie | 359 |
| 10.3 | Die thermodynamischen Potenziale | 360 |
| 10.3.1 | Prinzip der maximalen Entropie und minimalen Energie | 360 |
| 10.3.2 | Innere Energie als Potenzial | 360 |
| 10.3.3 | Entropie als thermodynamisches Potenzial | 361 |
| 10.3.4 | Die freie Energie oder das Helmholtz-Potenzial | 361 |
| 10.3.5 | Die Enthalpie | 362 |
| 10.3.6 | Die freie Enthalpie oder das Gibbsche Potenzial | 363 |
| 10.3.7 | Die Maxwell-Relationen | 364 |
| 10.3.8 | Thermodynamische Stabilität | 365 |
| 10.4 | Die kinetische Gastheorie | 367 |
| 10.4.1 | Druck und Temperatur | 367 |
| 10.4.2 | Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung | 368 |
| 10.4.3 | Freiheitsgrade | 369 |
| 10.4.4 | Der Gleichverteilungssatz | 370 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 10.5 | Energieformen, Zustandsänderungen und Hauptsätze | 371 |
| 10.5.1 | Energieformen | 371 |
| 10.5.2 | Energieumwandlung | 373 |
| 10.5.3 | Die Wärmekapazität | 374 |
| 10.5.4 | Zustandsänderungen | 375 |
| 11 | Statistische Beschreibung | 377 |
| 11.1 | Grundbegriffe der Statistik | 379 |
| 11.1.1 | Wahrscheinlichkeiten | 379 |
| 11.1.2 | Mittelwert, Mittelwert der Abweichung, Schwankung | 380 |
| 11.2 | Phasenraum und Verteilungen | 382 |
| 11.2.1 | Mikro- und Makrozustände | 382 |
| 11.2.2 | Der Phasenraum | 382 |
| 11.2.3 | Verteilungen | 383 |
| 11.3 | Das Spin-1/2 System | 386 |
| 11.3.1 | Die Magnetisierung | 387 |
| 11.3.2 | Entartung der Zustände | 388 |
| 11.3.3 | Statistische Eigenschaften der Magnetisierung | 390 |
| 11.3.4 | Die Gauß-Verteilung für große N | 392 |
| 11.3.5 | Die Energie des Spin-1/2-Systems | 393 |
| 11.4 | Grundlegende Annahmen der Wärmephysik | 394 |
| 11.4.1 | Zeitmittel und Scharmittel | 396 |
| 11.5 | Systeme in thermischem Kontakt | 399 |
| 11.6 | Entropie, Temperatur und chemisches Potenzial | 406 |
| 11.6.1 | Entropie | 406 |
| 11.6.2 | Statistische Definition der Temperatur | 408 |
| 11.6.3 | Statistische Definition des chemischen Potenzials | 408 |
| 11.6.4 | Der 3. Hauptsatz | 409 |
| 11.6.5 | Der 2. Hauptsatz | 409 |
| 11.6.6 | Wärmefluss | 410 |
| 11.6.7 | Teilchenfluss | 411 |
| 11.6.8 | Zusammenhang zwischen statistischen und thermodynamischen Größen | 412 |
| 11.7 | Der Zeitpfeil | 415 |
| 11.8 | Magnetische Kühlung | 416 |

| | |
|---|------------|
| 12 Verteilungsfunktionen | 423 |
| 12.1 Repräsentative Ensemble | 424 |
| 12.1.1 Abgeschlossenes System | 424 |
| 12.1.2 System in Kontakt mit einem Wärmereservoir | 424 |
| 12.1.3 System in Kontakt mit einem Wärme- und Teilchenreservoir | 425 |
| 12.2 Gibbs- und Boltzmann-Faktoren | 426 |
| 12.2.1 Der Gibbs-Faktor | 428 |
| 12.2.2 Der Boltzmann-Faktor | 428 |
| 12.3 Zustandssummen und Mittelwerte | 431 |
| 12.3.1 Große Zustandssumme | 431 |
| 12.3.2 Mittelwerte | 431 |
| 12.3.3 Zustandssumme | 433 |
| 12.3.4 Verteilungsfunktionen und ihre Eigenschaften | 436 |
| 12.4 Anwendungen der Verteilungsfunktionen | 438 |
| 12.4.1 Das ideale einatomige Gas | 438 |
| 12.4.2 Gültigkeit der klassischen Näherung | 441 |
| 12.4.3 Der Gleichverteilungssatz | 442 |
| 12.5 Die Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung | 446 |
| 12.5.1 Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages | 448 |
| 12.5.2 Verteilung einer Geschwindigkeitskomponente | 451 |
| 12.5.3 Die barometrische Höhenformel | 453 |
| 12.5.4 Thermalisierung | 454 |
| 13 Quantenstatistik | 461 |
| 13.1 Identische Teilchen | 462 |
| 13.1.1 Klassischer Fall: Maxwell-Boltzmann-Statistik | 462 |
| 13.1.2 Quantenmechanischer Fall | 462 |
| 13.2 Die quantenmechanischen Verteilungsfunktionen | 465 |
| 13.2.1 Quantenstatistische Beschreibung | 465 |
| 13.2.2 Photonen-Statistik | 468 |
| 13.2.3 Die Fermi-Dirac-Statistik | 469 |
| 13.2.4 Die Bose-Einstein-Statistik | 472 |
| 13.2.5 Quantenstatistik im klassischen Grenzfall | 473 |
| 13.3 Die Zustandsdichte | 477 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 13.3.1 | Das freie Elektronengas | 480 |
| 13.3.2 | Das Photonengas | 484 |
| 13.4 | Vertiefungsthema: | |
| | Die Bose-Einstein Kondensation | 487 |
| 13.4.1 | Historische Entwicklung | 487 |
| 13.4.2 | Temperatur der Bose-Einstein Kondensation | 488 |
| 13.4.3 | Realisierung eines Bose-Einstein Kondensats | 494 |
| 13.4.4 | Beobachtung der Bose-Einstein Kondensation | 498 |
| 13.4.5 | Atomlaser und Kohärenz | 500 |
| III | Anhang | 505 |
| A | Rutherfordsche Streuformel | 507 |
| B | Krummlinige Koordinaten | 512 |
| C | \hat{L}_i, \hat{L}^2 in Kugelkoordinaten | 518 |
| D | Vertauschungsrelationen \hat{L}_i, \hat{L}^2 | 520 |
| E | Heliumatom | 522 |
| F | Literatur | 525 |
| G | SI-Einheiten | 527 |
| G.1 | Geschichte des SI Systems | 527 |
| G.2 | Die SI Basiseinheiten | 529 |
| G.3 | Einige von den SI Einheiten abgeleitete Einheiten | 530 |
| G.4 | Vorsätze | 532 |
| G.5 | Abgeleitete Einheiten und Umrechnungsfaktoren | 533 |
| H | Physikalische Konstanten | 537 |

Teil I

Physik der Atome und Moleküle

Kapitel 1

Einführung in die Quantenphysik

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts gab es mehrere experimentelle Ergebnisse, die nicht mehr im Rahmen der “klassischen Physik” erklärt werden konnten und Anlass zur Entwicklung der Quantenphysik gaben. Die wichtigsten Beispiele dafür, nämlich die Diskrepanz zwischen theoretisch vorhergesagter und experimentell gemessener Spektralverteilung der Hohlraumstrahlung, der photoelektrische Effekt, der Compton-Effekt oder der Franck-Hertz-Versuch wurden bereits im Rahmen von Physik III vorgestellt. Es zeigte sich, dass sowohl das Teilchenbild der klassischen Mechanik, das für jedes Teilchen bei bekannten Anfangsbedingungen eine wohldefinierte Bahn vorhersagt, als auch das Wellenbild, das für elektromagnetische Wellen durch die Maxwell-Gleichungen vollständig beschrieben wird, einer kritischen Revision bedarf, wenn man in den Bereich mikroskopischer Teilchen vordringt. In diesem Kapitel wiederholen wir zunächst die bereits im Rahmen der Physik III eingeführten grundlegenden Konzepte der Quantenphysik und fassen die wichtigsten Eigenschaften von Quantenteilchen zusammen. Dieser Abschnitt dient also zu einer Vertiefung der Grundlagen zur Quantenphysik.

Wir haben bei der Diskussion von Quantenphänomenen in Physik III bereits gesehen, dass klassische Teilchen wie z.B. das *Elektron* Welleneigenschaften besitzen. Umgekehrt zeigen klassische Wellen wie z.B. Lichtwellen auch Teilcheneigenschaften. Wir haben diese Lichtteilchen als *Photonen* bezeichnet. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass im Rahmen des Vorlesungskurses Physik I bis IV die Eigenschaften klassischer Teilchen und Wellen im Rahmen von Physik I und II behandelt wurden. Eine ausführliche Darstellung der Welleneigenschaften des Lichts und eine Einführung in die Quantenphysik erfolgte dann im Rahmen der Physik III.

In diesem Kapitel wird anschließend an die Diskussion des Welle-Teilchen Dualismus und die Diskussion von Materiewellen eine Einführung in die Grundlagen der Quantenmechanik gegeben, die für die Diskussion des weiteren Stoffes von Physik IV essentiell sind. Dabei werden einige Sachverhalte, die bereits im Rahmen von Physik III diskutiert wurden, wiederholt und vertieft. Aufbauend auf den experimentellen Fakten sollen in diesem Abschnitt die Grundzüge der Quantenmechanik nur in dem Umfang skizziert werden, wie es für das Verständnis der diskutierten Beobachtungen erforderlich ist. Dementsprechend ist die Darstellung in Breite und Tiefe angelegt. Sie soll lediglich an die quantenmechanischen Gedankengänge gewöhnen, nicht jedoch eine strenge Theorie ersetzen. Dies wird im Rahmen der theoretischen Quantenmechanik getan.¹

¹siehe z.B.

F. Schwabl: Quantenmechanik, Springer Verlag Berlin (1993)
oder

H. Haken, H. C. Wolf: Atom- und Quantenphysik, Springer Verlag Berlin (1996).

1.1 Der Welle-Teilchen Dualismus

1.1.1 Dualismus des Lichtes

Licht als klassische elektromagnetische Welle

Im 18. Jahrhundert gab es einen langen Streit über die Natur des Lichtes.² Während **Isaac Newton** und seine Anhänger postulierten, dass Licht aus Partikeln besteht (Erklärung der geradlinigen Ausbreitung und des Brechungsgesetzes), vertraten **Christiaan Huygens** und andere die Auffassung, dass Licht eine Welle wäre (Erklärung von Beugung, Brechung, und Interferenz). Das Wellenmodell des Lichtes schien sich endgültig durchzusetzen, als **Heinrich Hertz** die elektromagnetischen Wellen entdeckte und dadurch klar wurde, dass sichtbares Licht nur ein auf den Wellenlängenbereich von etwa 400 bis 700 nm begrenzter Spezialfall elektromagnetischer Wellen ist. Licht wurde als elektromagnetische Welle beschrieben, die eine Lösung der elektromagnetischen Wellengleichungen

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \varepsilon \mu \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{v_{\text{ph}}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.1.1)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \varepsilon \mu \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = \nabla^2 \mathbf{H} - \frac{1}{v_{\text{ph}}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0 . \quad (1.1.2)$$

ist, die aus den Maxwell-Gleichungen abgeleitet werden können. Hierbei ist ε_0 die elektrische Feldkonstante, ε die Dielektrizitätskonstante, μ_0 die magnetische Feldkonstante, μ die Permeabilität, \mathbf{E} die elektrische Feldstärke, \mathbf{H} die magnetische Feldstärke und v_{ph} die Phasengeschwindigkeit der Welle. Eine Lösung der Wellengleichung ist die ebene Welle

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi)] . \quad (1.1.3)$$

Hierbei ist \mathbf{k} der Wellenvektor, $\omega = 2\pi\nu$ die Kreisfrequenz und ϕ eine Phasenkonstante. Die Wellenlänge ist durch $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}| = c/n\nu = c2\pi/n\omega = v_{\text{ph}}2\pi/\omega$ gegeben, wobei $n = \sqrt{\varepsilon\mu}$ der Brechungsindex und $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0} = 2.9979 \times 10^8 \text{ m/s}$ die Vakuum-Lichtgeschwindigkeit ist.

Mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen ließen sich lange Zeit alle bekannten elektrischen und optischen Phänomene im Rahmen einer Wellentheorie quantitativ richtig beschreiben. Erste Hinweise auf eine Korrektur der Annahme einer kontinuierlichen Energie des elektromagnetischen Feldes kamen dann aus der experimentellen Untersuchung der Hohlraumstrahlung und deren theoretischer Deutung.

Der Teilchencharakter des Lichtes

Um 1900 wurden experimentelle Ergebnisse bekannt, die der Auffassung von Licht als klassischer Welle widersprachen. Neben dem Spektrum der Hohlraumstrahlung war dies vor allem der *Photoeffekt*.³ Es wurde beobachtet, dass die kinetische Energie von Elektronen, die durch Lichteinstrahlung aus der Atomhülle ausgelöst werden, durch

²siehe z.B. F. Rosenberger, *Isaac Newton und seine physikalischen Prinzipien*, Wissenschaftliche Verlagsanstalt Leipzig, (1997).

³Eine ausführliche Behandlung der Hohlraumstrahlung und des Photoeffekts wurde in Physik III gegeben.

$$E_{\text{kin}} = \hbar\omega - E_B \quad (1.1.4)$$

beschrieben werden kann. Hierbei ist ω die Frequenz des einfallenden Lichtes, E_B die atomare Bindungsenergie des Elektrons⁴ und $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \text{Js}$ die Planck'sche Konstante. Dieses Ergebnis ist unabhängig von der Intensität des eingestrahlteten Lichtes und widerspricht klar dem klassischen Wellenbild des Lichtes. Hier würde man einen kontinuierlichen Energieübertrag erwarten, der mit wachsender Intensität zunimmt, da sowohl die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes

$$u_{\text{em}} = \varepsilon_0 E^2 = \frac{1}{2} \varepsilon_0 (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2)$$

als auch die Intensität

$$I = c\varepsilon_0 E^2$$

kontinuierliche Funktionen der Feldstärke sind.

Einen weiteren sehr deutlichen Hinweis auf die Unzulänglichkeit des Wellenmodells des Lichtes lieferte der von **Arthur Holly Compton** im Jahr 1922 entdeckte *Compton-Effekt* (siehe Physik III).

Albert Einstein gelang es im Jahr 1905 durch die Einführung der Photonenhypothese eine schlüssige Erklärung für die beobachteten experimentellen Fakten zu liefern. Er knüpfte dabei an Aspekte der Lichttheorie von **Newton** an und nahm an, dass die vom Licht mitgeführte Energie nicht wie bei einer klassischen Welle kontinuierlich im Raum verteilt ist, sondern diskontinuierlich oder *gequantelt*. Die physikalischen Objekte, denen die einzelnen Energieportionen oder *Energiequanten* zuzuordnen sind, nannte Einstein *Lichtquanten* oder *Photonen*. Er berücksichtigte dabei die Quantenhypothese von **Planck**, die besagt, dass ein harmonischer Oszillator nur diskrete Energiezustände einzunehmen vermag, die sich um ganzzahlige Vielfache von $h\nu$ unterscheiden. Im Photonenmodell wird die "körnige" Energiestruktur des Lichtes und damit die teilchenartige Eigenschaft mit der dem Wellenmodell entlehnten Größe Frequenz verknüpft. Einstein postulierte:

Licht besteht aus Photonen (Lichtquanten) der Energie

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.1.5)$$

mit

$$h = 2\pi\hbar = 6.626\,068\,76(52) \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$= 4.135\,667\,27 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

Photonen besitzen keine Ruhemasse und bewegen sich mit Lichtgeschwindigkeit.

Im Einzelprozess kann also Lichtenergie nur als ein Vielfaches des Energiequantens $E = \hbar\omega$ auf Materie übertragen werden. Dem Lichtquant oder Photon kommen damit Teilcheneigenschaften zu, da den lokalisierten Energieübertrag auf ein einzelnes Materieteilchen das Wellenbild nicht beschreiben kann. Im Rahmen eines Teilchenbildes lassen sich dagegen die beobachteten experimentellen Tatsachen zwanglos erklären (siehe hierzu Physik III).

Mit $E = mc^2$ und $E = \hbar\omega$ erhält man für die relativistische Masse des Photons

⁴Beim Auslösen von Elektronen aus einem Metall tritt an die Stelle der Bindungsenergie E_B die Austrittsarbeit W_A , siehe hierzu auch Physik III).

$$m = \frac{\hbar\omega}{c^2} . \quad (1.1.6)$$

Mit $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ und $v = c$ ergibt sich für den Impuls des Photons

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar\omega}{c} \hat{\mathbf{c}} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} \hat{\mathbf{c}} = \hbar\mathbf{k} . \quad (1.1.7)$$

Es sei hier angemerkt, dass dieser Gedanke Einsteins wissenschaftlich äußerst revolutionär war und zuerst von vielen Physikern strikt abgelehnt wurde.⁵ Die Anwendung des relativistischen Energie- und Impulssatzes auf die Streuung eines Photons mit der Energie $E = \hbar\omega$ und Impuls $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ an einem schwach gebundenen Elektron des Streumaterials liefert den bereits im Rahmen von Physik III besprochenen Compton-Effekt.

Komplementarität von Wellen- und Teilcheneigenschaften

Wir haben bereits bei der Diskussion von Quantenphänomenen im Rahmen von Physik III gesehen, dass die Frage, ob nun die Auffassung von **Huygens** und **Fresnel** über das Licht (Wellenhypothese) oder diejenige von **Einstein** (Photonenhypothese) richtig ist, falsch formuliert ist. Vielmehr ist festzuhalten, dass mit beiden Modellvorstellungen verschiedenen Eigenschaften des physikalischen Objektes Licht beschrieben werden. Licht zeigt Wellen- und Teilchencharakter je nach Art der Experimente, die man mit ihm durchführt. Widersprüche treten nur dann auf, wenn man Licht sowohl mit einer klassischen Welle als auch mit einem klassischen Teilchen identifiziert, da man dann die teilweise widersprüchlichen Aussagen dieser beiden Modelle auf das Licht überträgt. Nach **Bohr** bezeichnet man die Eigenschaften, die sich gegenseitig ausschließen, als *komplementär*.⁶

Zusammenfassend können wir folgenden Sachverhalt nochmals betonen:

Licht ist weder Welle noch Teilchen. Es ist ein physikalisches Objekt, für das uns die klassischen Vorstellungen fehlen.

1.1.2 Dualismus der Materie

Die Eigenschaften des Lichtes und der elektromagnetischen Wellen sind weder allein durch ein klassisches Wellen- noch allein durch ein Teilchenmodell vollständig zu erfassen. Diese Schlussfolgerung trifft auch auf alle physikalischen Objekte mit einer von Null verschiedenen Ruhemasse zu, also z.B. auf Elektronen, Neutronen, Atome oder Moleküle.

⁵So schrieb z.B. Max Planck am 3. Juli 1913 in seinem Gutachten zur Aufnahme von A. Einstein in die Preußische Akademie der Wissenschaften u.a.: „....., dass er in seinen Spekulationen gelegentlich auch einmal über das Ziel hinausgeschossen sein mag, wie zum Beispiel in seiner Hypothese der Lichtquanten, wird man ihm nicht allzusehr anrechnen dürfen. Denn ohne Risiko zu wagen, lässt sich auch in der exaktesten Wissenschaft keine wirkliche Neuerung einführen. ...“ 1921 erhielt Einstein für diese Erkenntnis den Nobelpreis für Physik.

⁶Komplementaritätsprinzip, formuliert von **Niels Bohr** im Jahr 1927.

Klassische Teilchen

Die statischen und dynamischen Eigenschaften von Teilchen im Raum lassen sich im Rahmen der klassischen Physik beschreiben. Die Bewegung von Teilchen lassen sich durch lokalisierte Bahnen beschreiben, die man entsprechend den Gesetzen von **Isaac Newton** (im nicht-relativistischen Grenzfall) oder **Albert Einstein** (im relativistischen Grenzfall) beliebig genau berechnen kann, falls man die Anfangsbedingungen und die auf die Teilchen wirkenden Kräfte kennt. Dies stimmt mit unserer Alltagserfahrung, die sich meist auf makroskopische Systeme bezieht, überein. Für Teilchen mit atomaren Dimensionen werden allerdings Eigenschaften beobachtet, die dem klassischen Teilchenbild völlig widersprechen. So kann man Beugungs- und Interferenzeffekte beobachten, wie bereits in Physik III ausführlich diskutiert wurde. Dies ist ein klarer Hinweis darauf, dass mikroskopische Teilchen auch Welleneigenschaften besitzen.

Der Wellencharakter von Teilchen

Louis de Broglie machte 1924 den Vorschlag, die duale Beziehung $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ zwischen Teilchen- und Wellenbild, die sich bei Licht gut bewährt hatte, auch auf mikroskopische Teilchen wie Elektronen oder Neutronen zu übertragen, deren Wellencharakter bis dahin allerdings noch nie beobachtet wurde.⁷

Wendet man die Beziehung $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ auf Teilchen der Masse m an, die sich mit der Geschwindigkeit v_T bewegen, so muss man im dualen Modell wegen $k = 2\pi/\lambda$ den Teilchen die *de Broglie Wellenlänge*

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv_T} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} \quad \text{de Broglie Beziehung} \quad (1.1.8)$$

Die Herleitung von (1.1.8) trägt hypothetischen Charakter. De Broglie konnte die Existenz von Materiewellen nicht aus einer gesicherten Theorie ableiten, wie dies z.B. für elektromagnetische Wellen aus den Maxwell-Gleichungen möglich ist. Deshalb war der experimentelle Nachweis von Materiewellen sehr wichtig. **Davisson** und **Germer**⁸ gelang dies 1927 durch den Nachweis der Beugung von niederenergetischen Elektronenstrahlen auf Kristalloberflächen. 1928 wies dann **Thomson** die Elektronenbeugung beim Durchstrahlen von dünnen Metallfolien nach.

Bis heute wurde eine Vielzahl von Beugungs- und Interferenzexperimente mit Materiewellen außer mit Elektronen vor allem mit Neutronen sowie H- und He-Atomen durchgeführt. 1991 gelang es z.B. **Mlynek** mit Hilfe eines Materiewellen-Interferometers, die Beugung von He-Atomen am Doppelspalt nachzuweisen. Heute wissen wir, dass die Wellenhypothese von de Broglie gleichermaßen für schwere und leichte Atome gilt, wir können deshalb ohne Einschränkung folgende Feststellung treffen:⁹

⁷Für diese Arbeit erhielt de Broglie 1929 den Nobelpreis für Physik.

⁸Clinton Joseph Davisson (1881-1958), Nobelpreis für Physik 1937; Lester Halbert Germer (1896-1971).

⁹Zur Herleitung der Beziehung zwischen Phasen- und Teilchengeschwindigkeit gilt:

(a) nicht-relativistische Teilchen:

Es gilt

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{E(k)}{\hbar k} = \frac{E(p)}{p} = \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{\hbar k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

Für die Teilchen (bzw. Gruppengeschwindigkeit) gilt

$$v_T = \frac{\partial E(p)}{\partial p} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = 2v_{\text{ph}}$$

(b) relativistische Teilchen:

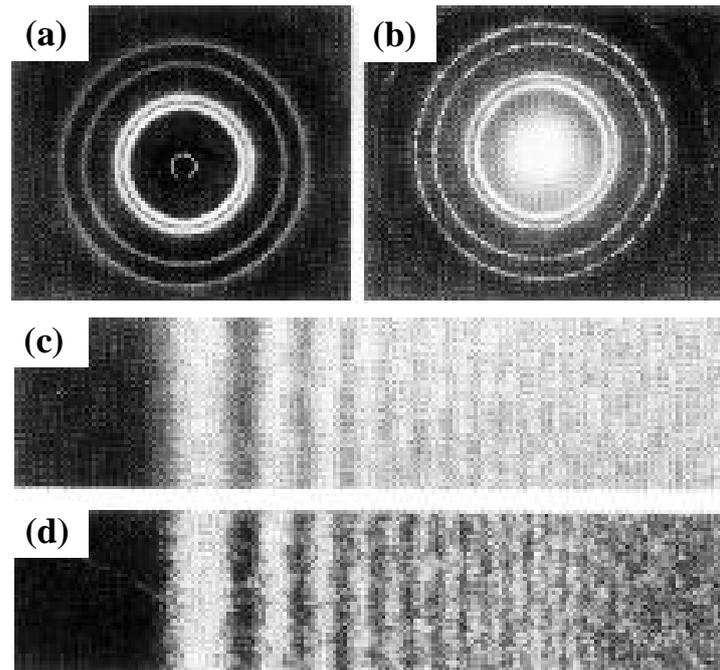


Abbildung 1.1: Oben: Vergleich der Elektronenbeugung (a) und der Röntgenbeugung (b) beim Durchstrahlen einer dünnen Metallfolie. Unten: Vergleich der Elektronen (c) und der Lichtbeugung (d) an der Kante eines MgO-Einkristalls. Der Abstand r_0 zur Photoplatte wurde so eingestellt, dass das Produkt $r_0\lambda$ in (c) und (d) gleich groß ist (aus H. Raether: Elektroneninterferenzen, in *Handbuch der Physik*, Bd. 32, 443 (1957)).

Bewegt sich ein Objekt mit nicht verschwindender Ruhemasse mit dem Impuls $p = mv_T$, dann kann ihm eine Materiewelle der Wellenlänge λ , der Kreisfrequenz ω und der Phasengeschwindigkeit v_{ph} zugeordnet werden:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad v_{\text{ph}} = \frac{c^2}{v_T} . \quad (1.1.9)$$

Ein überzeugendes Beispiel für den Wellencharakter von mikroskopischen Teilchen ist in Abb. 1.1 gezeigt. In Abb. 1.1a und b wird die Elektronenbeugung und Röntgenbeugung an einer dünnen Metallfolie dargestellt, wobei die Energie eU_B (e ist die Ladung des Elektrons, U_B die Beschleunigungsspannung)

Es muss die volle Dispersionsrelation aus der Dirac-Gleichung benutzt werden. Es gilt

$$E(p) = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} = \sqrt{m_0^2 c^4 + \frac{m_0^2 v^2}{\beta^2} c^2} = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{v^2/c^2}{\beta^2}} = \frac{m_0 c^2}{\beta} = mc^2$$

mit $\beta^2 = 1 - \frac{v^2}{c^2}$. Für die Phasengeschwindigkeit erhält man damit

$$v_{\text{ph}} = \frac{E(p)}{p} = \frac{mc^2}{mv_T} = \frac{c^2}{v_T} .$$

Andererseits lässt sich zeigen, dass

$$v_{\text{gr}} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{p}{m} = v_T .$$

Das heißt, es gilt

$$v_{\text{ph}} v_{\text{gr}} = c^2 .$$

der Elektronen so gewählt wurde, dass die de Broglie Wellenlänge der Elektronen ($\lambda = h/\sqrt{2meU_B}$) der Wellenlänge der Röntgenstrahlung entspricht. Man erkennt, dass mit Materiewellen (Elektronen) und "klassischen elektromagnetischen Wellen" (Röntgenstrahlung) ein identisches Ergebnis erhalten wird. In Abb. 1.1c und d wird die Beugung von Licht und Elektronenwellen an der Kante eines MgO-Kristalls verglichen. Dabei wurde der Abstand r_0 der Photoplatte so eingestellt, dass in beiden Fällen das Produkt $r_0\lambda$ gleich groß ist und damit wiederum für Materiewelle und klassische Welle gleiche Beugungsbilder erhalten werden.

Zum Vergleich sind in Tabelle 1.1 die Teilchen- und Welleneigenschaften von Teilchen mit endlicher Ruhemasse m_0 und von Photonen gegenübergestellt.

| | Eigenschaft | Teilchen: $m_0 \neq 0$ | Photon |
|--------------------------|------------------------|---|-------------------------|
| Teilchen- Eigenschaft | Ruhemasse | m_0 | 0 |
| | Geschwindigkeit | v_T | c |
| | Masse | m | $m = E/c^2$ |
| | Impuls | $p = mv_T$ | $p = E/c$ |
| | Energie | $E = mc^2 = \sqrt{p^2c^2 + (m_0c^2)^2}$ | $E = mc^2$ |
| | Drehimpuls | $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ | $\mathbf{s} = \pm\hbar$ |
| Wellen- Eigenschaften | Frequenz | $\omega = E/\hbar = mc^2/\hbar$ | $\omega = E/\hbar$ |
| | Wellenlänge | $\lambda = h/p$ | $\lambda = hc/E = c/v$ |
| | Phasengeschwindigkeit | $v_{ph} = c^2/v_T$ | $v_{ph} = c$ |
| | Gruppengeschwindigkeit | $v_{gr} = v_T$ | $v_{gr} = c$ |
| | Energie | $E = \hbar\omega$ | $E = \hbar\omega$ |

Tabelle 1.1: Vergleich der Teilchen- und Welleneigenschaften von Teilchen mit endlicher Ruhemasse und von Photonen.

1.2 Materiewellen und Wellenfunktionen

In der klassischen Physik wird ein physikalisches Objekt stets nur entweder als Teilchen oder als Welle beschrieben. Die Objekte der Quantenwelt zeigen dagegen sowohl Teilchen- als auch Wellencharakter. Weder das Teilchen- noch das Wellenmodell ist in der Lage, eine vollständige Beschreibung zu liefern. Das heißt, jedes der beiden Modelle kann nur einige Eigenschaften der physikalischen Objekte richtig beschreiben. Teilchen- und Wellenmodell enthalten damit Elemente, die zur Beschreibung der beobachteten physikalischen Erscheinung notwendig sind, aber auch Elemente, die der experimentellen Erfahrung nicht entsprechen. Die sich daraus ergebende Problematik äußert sich in den bereits erwähnten Widersprüchen und wird als *Komplementarität* bezeichnet. Wichtig ist, dass die Komplementarität von Teilchen- und Welleneigenschaften nicht nur eine Problematik des Lichts, sondern von allen physikalischen Objekten ist.

Wir wollen nun zunächst die Wellenbeschreibung eines freien, nichtrelativistischen Teilchens mit der Masse m , das sich mit der Geschwindigkeit v_T in x -Richtung bewegen soll, vertiefen. Wir wählen für die *Materiewelle* eine zur Lichtwelle analoge Darstellung:

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \exp[i(kx - \omega t)] = \Psi_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]. \quad (1.2.1)$$

Hierbei ist die Frequenz ω der Materiewelle mit der kinetischen Energie $E = E_{\text{kin}} = p^2/2m$ des Teilchens ($E_{\text{pot}} = 0$ für freies Teilchen) durch $\omega = E/\hbar$ verknüpft. Sowohl für Materiewellen als auch Lichtwellen gelten ferner die Beziehungen

$$E = \hbar\omega \quad \text{und} \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.2.2)$$

mit $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$. Es besteht jedoch ein wichtiger Unterschied bezüglich der Phasengeschwindigkeit v_{ph} , die man aus der Bedingung

$$\frac{d}{dt}(kx - \omega t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dx}{dt} = v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} \quad (1.2.3)$$

erhält. Während für elektromagnetische Wellen wegen $k = \omega/c$ die Phasengeschwindigkeit $v_{\text{ph}} = c = \text{const.}$ ist, d.h. die Dispersion von elektromagnetischen Wellen im Vakuum gleich Null ist, gilt dies für Materiewellen nicht.

Aus (1.2.2) erhält man mit $E = E_{\text{kin}} = p^2/2m$ für ein freies Teilchen (das Teilchen bewegt sich im konstanten Potenzial V) unter Benutzung von $p = \hbar k$ und $\omega = E/\hbar$

$$\begin{aligned} \omega = \frac{\hbar}{2m}k^2 & \Rightarrow v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar}{2m}k \\ & \Rightarrow \frac{dv_{\text{ph}}}{d\omega} = \frac{1}{k} \neq 0 \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

Die Phasengeschwindigkeit der Materiewelle hängt also vom Wellenvektor k , d.h. vom Impuls des Teilchens ab. Mit der Teilchengeschwindigkeit $v_T = p/m = \hbar k/m$ folgt dann¹⁰

Materiewellen zeigen Dispersion und ihre Phasengeschwindigkeit

$$v_{\text{ph}} = \frac{1}{2} v_T . \quad (1.2.5)$$

ist gleich der halben Teilchengeschwindigkeit.

Wir sehen also, dass die Materiewelle (1.2.1) nur sehr eingeschränkt zur Beschreibung der Teilchenbewegung geeignet ist, zumal die ebene Welle (1.2.1) sich ja im ganzen Raum ausbreitet. Im Gegensatz dazu ist das Teilchen wenigstens ungefähr an einer Stelle lokalisiert. Diesen Mangel kann man durch Einführung von Wellenpaketen beheben. Wellenpakete wurden bereits in der Physik III eingeführt. Im folgenden Abschnitt werden die wichtigsten Aspekte kurz rekapituliert.

1.2.1 Wellenpakete

Bei einer Überlagerung von unendlich vielen Wellen, deren Frequenzen ω im Intervall $\omega = \omega_0 \pm \Delta\omega$ und deren Wellenzahlen im Intervall $k = k_0 \pm \Delta k$ liegen, erhält man

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \Psi_0(k) \exp[i(kx - \omega t)] dk . \quad (1.2.6)$$

Wenn $\Delta k \ll k_0$ gilt, kann man die Funktion $\omega(k)$ in eine Taylorreihe

$$\omega(k) = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} \cdot (k - k_0) + \dots \quad (1.2.7)$$

entwickeln, deren höhere Glieder vernachlässigt werden können. Wenn sich ferner die Amplitude in dem engen Intervall $2\Delta k$ nicht ändert, können wir $\Psi_0(k)$ durch $\Psi_0(k_0)$ ersetzen und erhalten durch Einsetzen von (1.2.7) in (1.2.6) unter Benutzung der Abkürzungen

$$K = k - k_0 \quad \text{und} \quad u = (d\omega/dk)_{k_0} t - x$$

den Ausdruck

$$\Psi(x, t) = \Psi_0(k_0) \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} \exp[iuK] dK . \quad (1.2.8)$$

Durch Ausführen der Integration erhält man

¹⁰Für den relativistischen Fall erhält man $v_{\text{ph}} v_T = c^2$, siehe hierzu Seite 7.

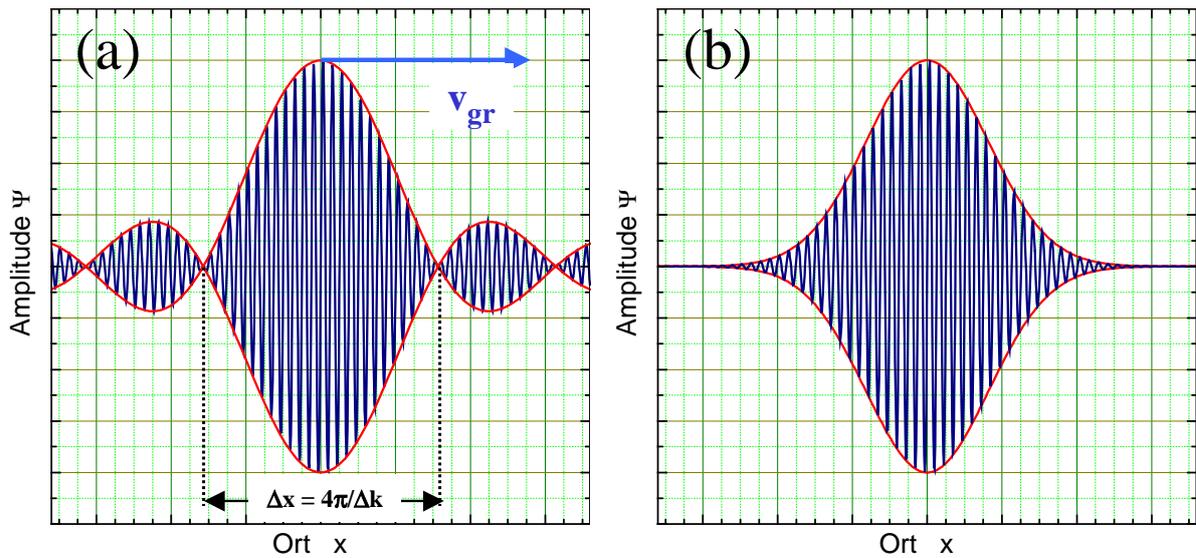


Abbildung 1.2: Wellenpaket als Überlagerung von unendlich vielen Wellen mit Frequenzen ω im Bereich $\omega_0 \pm \Delta\omega$ und konstanten Amplituden $\Psi(k) = \Psi_0(k_0)$ (a) und einer Gauss-förmigen Amplitudenverteilung nach (1.2.14).

$$\Psi(x, t) = A(x, t) \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \quad (1.2.9)$$

mit

$$A(x, t) = 2\Psi_0(k_0) \frac{\sin(u\Delta k/2)}{u} . \quad (1.2.10)$$

Die Funktion $\Psi(x, t)$ beschreibt also eine ebene Welle, deren Amplitude A bei $u = 0$, also bei $x_{\max} = (d\omega/dk)_{k_0} t$ ein Maximum hat (siehe Abb. 1.2). Wir bezeichnen diese Funktion $\Psi(x, t)$ als Wellenpaket. Die Funktion (1.2.10) hat Nullstellen die ersten Nullstellen bei $u\Delta k/2 = \pm\pi$, das heißt der Abstand zwischen den beiden ersten Nullstellen ist $2\Delta u = 4\pi/\Delta k$. Für eine feste Zeit $t = t_0$ erhalten wir damit $2\Delta x = 4\pi/\Delta k$.

Die genaue Form des Wellenpakets hängt von der Größe des Intervalls Δk und von der Amplitudenverteilung $\Psi_0(k)$ ab. Sein Maximum bewegt sich mit der Geschwindigkeit

$$v_{gr} = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} \quad (1.2.11)$$

in x -Richtung. Aus den Relationen

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (1.2.12)$$

folgt dann

$$v_{\text{gr}} = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_T}{m} = v_T . \quad (1.2.13)$$

Wir können damit folgende wichtigen Punkte zusammenfassen:

- Teilchen können durch Wellenpakete beschrieben werden. Die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets ist gleich der Teilchengeschwindigkeit.
- Der Wellenvektor \mathbf{k}_0 des Gruppenzentrums bestimmt den Teilchenimpuls $\mathbf{p}_T = \hbar\mathbf{k}_0$.
- Im Gegensatz zur ebenen Welle ist das Wellenpaket räumlich lokalisiert. Seine Amplitude hat nur in einem beschränkten Raumgebiet Δx eine große Amplitude. Für die Fußbreite des zentralen Maximums erhält man wegen $\Delta k \leq 2k_0$ die Beziehung $\Delta x = 4\pi/\Delta k \geq 2\pi/k_0 = \lambda$. Die Breite des Wellenpakets ist also mindestens so groß wie die de Broglie Wellenlänge.

Es sei hier noch darauf hingewiesen, dass die zusätzlichen Nebenmaxima in Abb. 1.2a verschwinden, wenn man für die Amplitudenverteilung der Teilwellen eine Gauss-Verteilung

$$\Psi_0(k) = \Psi_0(k_0) \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2(\Delta k)^2}\right) \quad (1.2.14)$$

annimmt (siehe Abb. 1.2b).

Obwohl es zunächst so aussieht, als ob wir das Wellenpaket als geeignetes Wellenmodell des Teilchens betrachten können, treten bei näherer Betrachtung doch folgende Probleme auf:

- Die Funktion $\Psi(x,t)$ kann komplexe und auch negative Werte annehmen, die nicht unmittelbar mit einer Messgröße verknüpft werden können.
- Die Breite des Wellenpakets wird aufgrund der Dispersion der Materiewellen im Laufe der Zeit größer (siehe unten). Es verändert also im Gegensatz zu einem klassischen Teilchen bei der Ausbreitung im Raum seine Form.
- Ein elementares Teilchen wie das Elektron stellen wir uns als unteilbar vor. Ein Wellenpaket kann dagegen mit Hilfe eines Strahlteilers in zwei Komponenten aufgeteilt werden, die sich dann in verschiedene Richtungen weiterbewegen.

Diese Schwierigkeiten bewogen **Max Born** 1927 dazu, eine statistische Deutung der Materiewellen zu geben, die im Abschnitt 1.3.1 vorgestellt wird.

1.2.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Wir betrachten ein Wellenpaket mit einer Gauss-förmigen Amplitudenverteilung

$$\Psi_0(k) = \Psi_0 \exp[-2\sigma^2(k-k_0)^2] . \quad (1.2.15)$$

Mit dieser Amplitudenverteilung erhalten wir aus (1.2.6) für den Zeitpunkt $t = 0$ die Wellenfunktion

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right) \exp(ik_0x) . \quad (1.2.16)$$

Das Absolutquadrat dieser so normierten Wellenfunktion ist

$$|\Psi(x,0)|^2 = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.2.17)$$

und erfüllt die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = 1 . \quad (1.2.18)$$

Das Wellenpaket (1.2.16) hat seine maximale Amplitude bei $x = 0$. Bei $x_{1/e} = \pm\sigma$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x,0)|^2$ auf $1/\sqrt{e}$ ihres Maximalwertes abgefallen. Man definiert üblicherweise das Intervall $\Delta x = 2\sigma$ als die volle Breite des Wellenpakets.¹¹

Nach (1.2.15) setzt sich das Wellenpaket aus ebenen Wellen mit einer Amplitudenverteilung $\Psi_0(k)$ zusammen. Die volle Breite Δk der Amplitudenverteilung beträgt entsprechend $\Delta k = 1/a$. Damit erhält man das folgende wichtige Ergebnis:

Das Produkt aus räumlicher Breite Δx des Wellenpakets und der Breite Δk des Wellenzahlintervalls der das Wellenpaket bildenden Materiewellen ist

$$\Delta x \Delta k = 1 . \quad (1.2.19)$$

Mit der de Broglie Beziehung $p_x = \hbar k$ für den Impuls des Teilchens, das sich in x -Richtung bewegt, ergibt sich aus (1.2.19)

$$\Delta p_x \Delta x = \hbar . \quad (1.2.20)$$

Man kann zeigen, dass ein Gauss-förmiges Wellenpaket das minimale Produkt $\Delta p_x \Delta x$ hat und sich für alle anderen Amplitudenverteilungen größere Werte ergeben. Wir kommen damit zu einer Aussage, die

¹¹Im Gegensatz dazu bezeichnet die **Full Width at Half Maximum** (FWHM) die volle Breite der Kurve bei halbem Funktionswert. Wir können leicht zeigen, dass $\text{FWHM} = \sqrt{8 \ln 2} \sigma$.

Werner Heisenberg (1901 -1976), Nobelpreis für Physik 1932:

Werner Heisenberg wurde am 5. Dezember 1901 in Würzburg geboren. Er war der Sohn von Dr. August Heisenberg und seiner Frau Annie Wecklein. Sein Vater wurde später Professor für Griechische Sprachen an der Universität München.

Heisenberg ging bis 1920 in München zur Schule und begann dann an der Ludwig-Maximilians Universität München bei Sommerfeld, Wien, Pringsheim, und Rosenthal zu studieren. Im Winter 1922-1923 ging er nach Göttingen, um bei Max Born, Franck, und Hilbert Physik zu studieren. 1923 promovierte er an der Universität München und wurde dann Assistent bei Max Born an der Universität Göttingen, wo er 1924 die Lehrbefugnis erhielt. Von 1924 bis 1925 arbeitete er mit Niels Bohr an der Universität Kopenhagen, von wo er im Sommer 1925 nach Göttingen zurückkehrte. 1926 wurde er im Alter von 26 zum Professor für Theoretische Physik an der Universität Leipzig ernannt. 1941 wurde er dann Professor für Physik an der Universität Berlin und Direktor des dortigen Kaiser-Wilhelm-Instituts für Physik.

Nach dem 2. Weltkrieg reorganisierte Heisenberg mit einigen Kollegen das Institut für Physik in Göttingen, das dann in Max-Planck-Institut für Physik umbenannt wurde. 1955 war Heisenberg mit dem Umzug des Max-Planck-Instituts für Physik nach München beschäftigt. Immer noch Direktor diesen Instituts ging er mit ihm nach München und wurde dort im Jahr 1958 zum Professor für Physik an der Universität München ernannt. Sein Institut wurde dann in Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik umbenannt.

Heisenberg's Name wird immer mit seiner Theorie zur Quantenmechanik, die er 1925 im Alter von 23 Jahren publizierte, verbunden bleiben. Für diese Theorie erhielt er 1932 den Nobelpreis für Physik. Später formulierte Heisenberg die nach ihm benannte Unschärferelation. Nach 1957 beschäftigte sich Heisenberg hauptsächlich mit Problemen der Plasmaphysik.

Als er 1953 Präsident der Alexander von Humboldt Stiftung wurde, setzte er sich sehr für Weiterentwicklung dieser Stiftung ein. Eines seiner Hobbies war klassische Musik: Er war ein sehr guter Pianist. 1937 heiratete Heisenberg Elisabeth Schumacher. Sie hatten sieben Kinder.

Werner Heisenberg starb 1976.



erstamls von **Werner Heisenberg** formuliert wurde und nach ihm *Heisenbergsche Unschärferelation* genannt wird:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar . \quad (1.2.21)$$

Die Beziehung besagt, dass das Produkt aus der Unbestimmtheit Δx der Ortsbestimmung und der Impulsunschärfe Δp_x , gegeben durch die Breite der Impulsverteilung der das Wellenpaket aufbauenden Teilwellen, immer größer oder gleich \hbar ist.¹² Entsprechende Unschärferelationen für Ort und Impuls gelten auch für die y- und z-Komponenten.

Basierend auf der Heisenbergschen Unschärferelation kann man formal zwischen einer *Makrophysik* und einer *Mikrophysik* unterscheiden. Bei ersterer ist die Unschärfe stets so klein, dass sie unterhalb der Messgenauigkeit liegt. Die Heisenbergsche Unschärferelation braucht dann nicht beachtet werden. Ort und Impuls sind gleichzeitig mit großer Exaktheit messbar. In diesem Fall macht es z.B. Sinn, von einer Bahn bei der Bewegung eines Teilchens zu sprechen. Mit letzterer bezeichnet man den Teilbereich

¹²Es sei hier darauf hingewiesen, dass als Breite Δx einer Gauss-Verteilung oft auch das Intervall zwischen den beiden Punkten gewählt wird, bei denen die Funktion auf $1/e$ statt auf $1/\sqrt{e}$ ihres Maximalwertes abgesunken ist. In diesem Fall ergibt sich $\Delta x \Delta p_x \geq 4\sqrt{2}\hbar$. Wählt man als Breite des Wellenpakets die Nullstellen auf beiden Seiten des zentralen Maximums (siehe Abb. 1.2a), so erhält man $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$. Man sieht, dass der Zahlenwert für die untere Grenze des Produkts $\Delta x \Delta p_x$ von der genauen Definition der Ortsunschärfe und der entsprechenden Impulsunschärfe abhängt. Abb. 1.3 zeigt, dass eine große Ortsunschärfe mit einer kleinen Impulsunschärfe und umgekehrt verbunden ist.

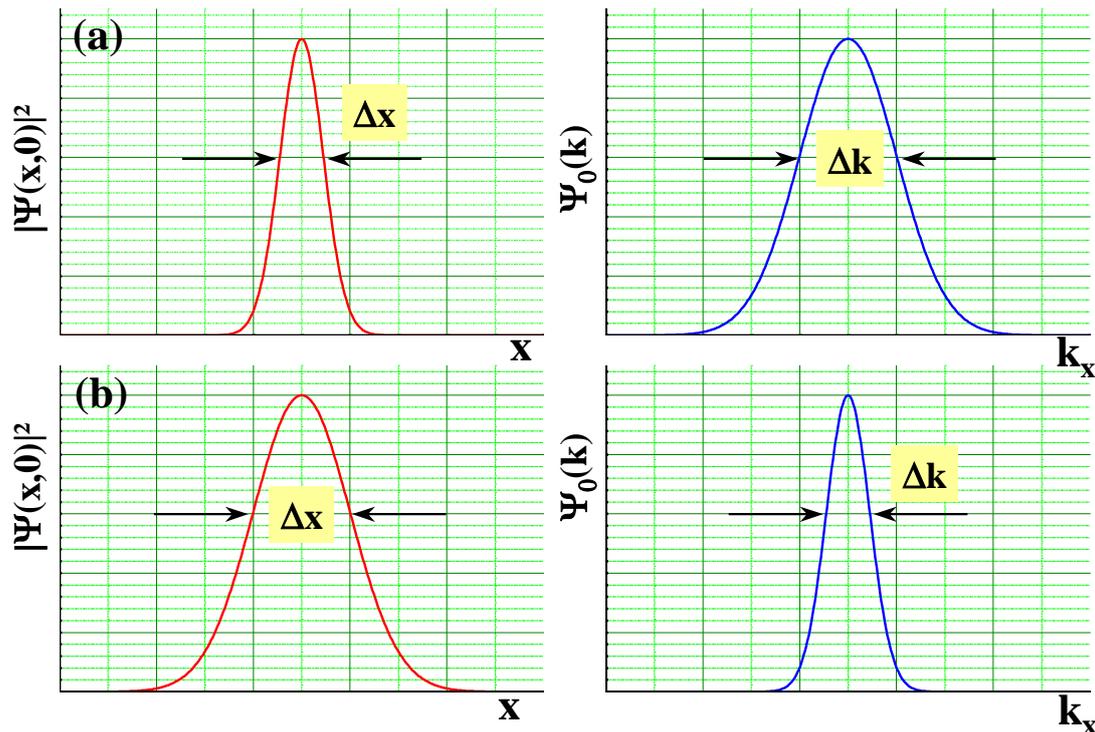


Abbildung 1.3: Darstellung der Unschärferelation durch die Orts- und Impulsunschärfen von zwei Wellenpaketen mit kleiner (a) und großer Ortsunschärfe (b).

der Physik, in dem die Heisenbergsche Unschärferelation berücksichtigt werden muss. Der Bahnbegriff macht hier keinen Sinn mehr.

Wir wollen die Ausführungen zur Makro- und Mikrophysik durch Beispiele belegen. Ein freies Objekt der Masse m soll zur Zeit $t = 0$ auf den Bereich $x_0 \pm \Delta x_0$ lokalisiert sein. Die Frage ist nun, auf welchen Bereich $x_0 \pm \Delta x$ es sich nach der Zeit $t = 1$ sec ausgedehnt hat. Nach Heisenberg gilt $m\Delta v\Delta x_0 = \hbar$ oder $\Delta v = \hbar/m\Delta x_0$, woraus für den gesamten Unschärfbereich nach t Sekunden $\Delta x = t\Delta v = \hbar t/m\Delta x_0$ folgt. Wählt man $m = 1$ g und reduziert Δx_0 durch eine sehr genaue Ortsmessung auf $1 \mu\text{m}$, so wird diese Lokalisierung nach 1 s um $\Delta x \sim 10^{-25}$ m verändert. Diese Veränderung ist um viele Größenordnungen kleiner als die verfügbare Messgenauigkeit, sie wird also vom Beobachter gar nicht bemerkt. Handelt es sich dagegen bei dem betrachteten Objekt um ein freies Elektron mit Masse $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg, dass zur Zeit $t = 0$ auf einen Bereich von $\Delta x_0 = 10^{-10}$ m (Atomradius) lokalisiert werden kann, so kann man das Elektron nach 1 s im Bereich $x_0 \pm \Delta x = x_0 \pm 1000$ km finden. Die Kenntnis über den genauen Aufenthaltsort des mikroskopischen Objekts Elektron geht also im Laufe der Zeit verloren.

Energie-Zeit Unschärferelation

Betrachtet man ein Wellenpaket wieder als eine Überlagerung von Teilwellen entsprechend (1.1.9), integriert jetzt aber nicht über das k -Intervall Δk sondern über das Frequenzintervall $\Delta\omega$, so lässt sich entsprechend zur Ort-Impuls-Unschärferelation eine Energie-Zeit-Unschärferelation ableiten (siehe hierzu auch Physik III):

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar . \quad (1.2.22)$$

Die Energie-Zeit-Unschärferelation besagt, dass zu einer beliebig genauen Energiebestimmung beliebig viel Zeit zur Verfügung stehen muss. Nur ein völlig stationärer Zustand kann deshalb eine scharfe Energie E besitzen. Nichtstationäre Zustände sind grundsätzlich hinsichtlich ihrer Energieeigenwerte unscharf.

1.2.3 Messprozess und Observable

In der klassischen Physik (z.B. klassische Mechanik) setzte man voraus, dass die bei einer Messung auftretende Störung im Prinzip unter jede gewünschte Schranke reduziert werden kann. Diese Voraussetzung widerspricht allerdings dem Messvorgang in der Quantenphysik. Die Heisenbergsche Unschärferelation zeigt, dass die im Bereich der Mikrophysik nicht mehr zu vernachlässigenden, durch den Messprozess auftretenden Störungen von prinzipieller Natur sind und nichts mit Messfehlern zu tun haben. Der zur Realisierung der Messung notwendige Wechselwirkungsprozess gehört selbst mit zur physikalischen Erscheinung und bestimmt diese mit. Das heißt, in der Mikrophysik wird das Ergebnis der Messung stets durch die Wechselwirkung mit der Messapparatur beeinflusst. Der Messprozess selbst ändert also den Zustand des zu messenden Systems.

Dies trifft für den Bereich der Makrophysik nicht zu. Um diesen Unterschied zwischen Mikro- und Makrophysik herauszuheben, benutzt man in der Mikrophysik nicht mehr den Begriff *physikalische Größe*, sondern den der *Observablen*. Man unterscheidet dabei verträglich und unverträglich Observable:

Zwei Observable heißen komplementär oder unverträglich zueinander, wenn bei ihrer gleichzeitigen Messung die Genauigkeit ihrer Messwerte durch die Heisenbergsche Unschärferelation eingeschränkt ist.

Um den Einfluss des Messprozesses klarer zu machen, betrachten wir ein aktuelles Beispiel: die Messung von Gravitationswellen mit Hilfe eines an Federn aufgehängten schweren Metallzylinders (etwa 10 Tonnen). Gravitationswellen, die z.B. bei der Explosion eines Sterns (Supernova) entstehen, würden eine periodische Kontraktion und Expansion des Zylinders um etwa 10^{-21} m bewirken (theoretische Vorhersage). Um diese Längenänderung zu messen, muss die Messungenauigkeit bei der Ortsmessung mindestens $\Delta x = 10^{-21}$ m sein. Durch diese sehr genau Messung wird aber eine Impulsunschärfe von $\Delta p = \hbar/\Delta x$ bewirkt. Das heißt, war der Zylinder ursprünglich in Ruhe, so erhält er durch die Messung eine endliche Geschwindigkeit $v = \Delta p/m = \hbar/\Delta x m$. Die Periode der Gravitationswelle ist etwa $\tau = 10^{-3}$ sec. In dieser Zeit verursacht die endliche Geschwindigkeit eine Ortsveränderung von $\Delta x_m = v\tau = \hbar\tau/\Delta x m$. Mit $m = 10^4$ kg und $\tau = 10^{-3}$ s erhält man $\Delta x_m \simeq 10^{-20}$ m, was oberhalb der erforderlichen Messgenauigkeit liegt. Die durch die Unschärferelation bewirkte Ortsunschärfe ist also größer als die zu erwartende Verschiebung durch die Gravitationswelle. Einen Ausweg bildet die Verwendung einer größeren Masse und die Mittelung über viele Messdaten.

1.2.4 Dispersion von Materiewellen

Nach (1.2.13) besteht zwischen der Gruppengeschwindigkeit v_{gr} eines Wellenpakets und dem Impuls p des entsprechenden Teilchens die Beziehung

$$v_{\text{gr}} = p/m . \quad (1.2.23)$$

Da der Anfangsimpuls des Teilchen nur mit einer Unschärfe Δp bestimmt werden kann, ergibt sich eine Unschärfe

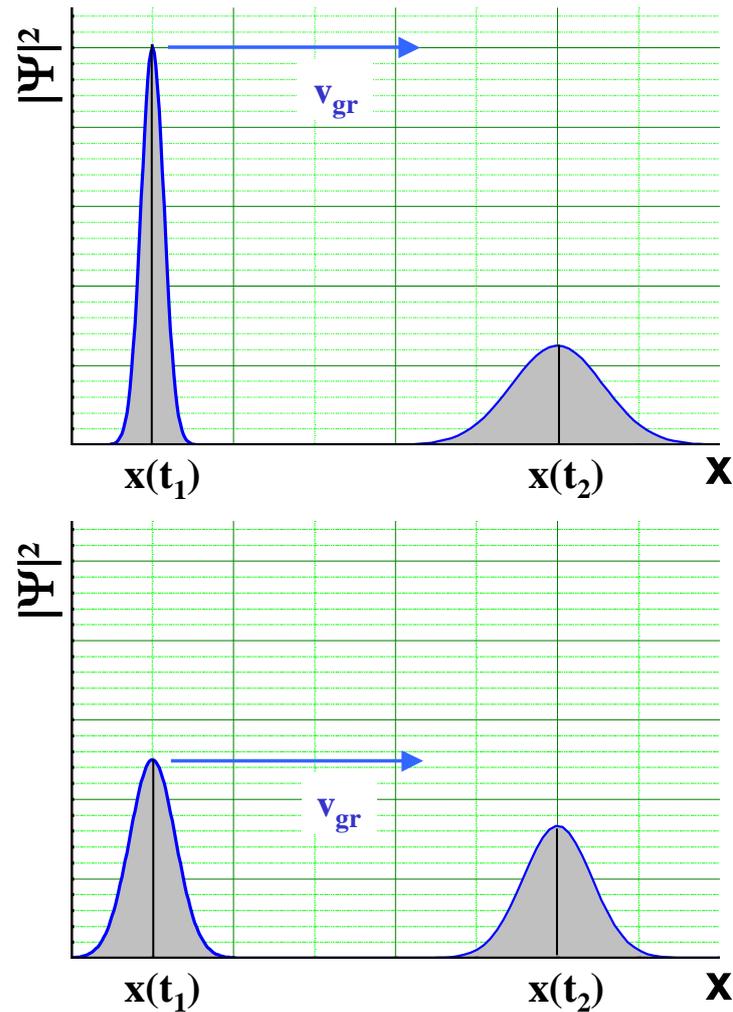


Abbildung 1.4: Auseinanderlaufen eines Wellenpakets bei anfänglich kleiner (a) und bei großer (b) Ortsunschärfe.

$$\Delta v_{\text{gr}} = \frac{1}{m} \Delta p = \frac{1}{m} \frac{\hbar}{\Delta x_0}, \quad (1.2.24)$$

wobei Δx_0 die ursprüngliche Breite des Wellenpakets, d.h. die Unschärfe der Ortsbestimmung ist. Die Unschärfe $\Delta x(t)$, mit der man zu einem späteren Zeitpunkt den Ort des Teilchens bestimmen kann, wächst aufgrund der Unschärfe der Gruppengeschwindigkeit mit der Zeit an:

$$\Delta x(t) = \Delta v_{\text{gr}} \cdot t = \frac{\hbar}{m \Delta x_0} t. \quad (1.2.25)$$

Die Fläche unter dem Wellenpaket bleibt dabei wegen der Normierungsbedingung gleich (siehe Abb. 1.4). Die Zunahme der Breite Δx ist um so größer, je schmaler die ursprüngliche Breite Δx_0 war, weil dann die ursprüngliche Impulsbreite und damit die Unschärfe der Gruppengeschwindigkeit besonders groß ist. Insgesamt sehen wir, dass die Lokalisierbarkeit des Teilchens im Laufe der Zeit abnimmt. Das Gebiet, in dem es sich aufhalten kann, wird mit der Zeit größer.

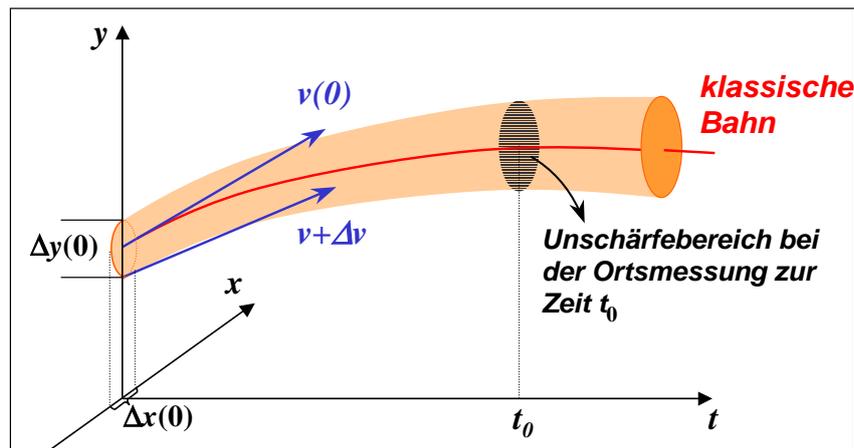


Abbildung 1.5: Unbestimmtheitsgrenzen der Teilchenbahn durch die Unschärferelation.

1.2.5 Gegenüberstellung Quantenphysik – klassische Physik

Wir wollen in diesem Unterabschnitt kurz zusammenfassen, was die klassische Physik von der Quantenphysik unterscheidet. Wir haben bisher an vielen Beispielen vor allem den Welle-Teilchen-Dualismus herausgearbeitet. Wir wollen diesen Dualismus hier zusammenfassend nochmals verdeutlichen, um die Essenz der quantenphysikalischen Beschreibung herauszuarbeiten und um nochmals klarzumachen, dass Wellen- und Teilchen-Modell keine widersprüchlichen, sondern *komplementäre Beschreibungen der Natur* sind.

Klassische Teilchenbahnen – quantenphysikalische Wahrscheinlichkeitsdichten

In der klassischen Physik kann die Bewegung von Teilchen mit *Teilchenbahnen* beschrieben werden, die bei bekannten Anfangsbedingungen und auf das Teilchen wirkenden Kräften im Prinzip für alle Zeiten angegeben werden können.¹³ In der Quantenphysik existiert durch die zusätzliche Unschärferelationen eine prinzipielle Beschränkung der Berechenbarkeit der zeitlichen Entwicklung eines Systems. An die Stelle der Angabe von exakten Bahnen einzelner Teilchen treten *Wahrscheinlichkeitsaussagen* (siehe Abb. 1.5 und Abschnitt 1.3.1). Ferner ändert der Messprozess den Zustand des Mikrosystems entscheidend. Die Ortsunschärfe eines Teilchens entspricht der de Broglie Wellenlänge $\lambda = h/p$. Während diese Wellenlänge für Mikroteilchen eine entscheidende Rolle spielt, ist sie für Makroteilchen mit großer Masse vernachlässigbar klein.

Interferenzerscheinungen

Für Licht und mikroskopische Teilchen können Interferenzerscheinungen beobachtet werden. Die Interferenzerscheinungen bei Licht und Teilchenwellen resultieren aus der prinzipiellen Unkenntnis des genauen Weges durch die Interferenzanordnung.

Für makroskopische Teilchen können Interferenzerscheinungen nicht beobachtet werden. Dies liegt aber an deren extrem kleiner de Broglie Wellenlänge und nicht an einer prinzipiellen physikalischen Ursache.

¹³Bei nichtlinearen Systemen hängen die Bahnen allerdings sehr empfindlich von den Anfangsbedingungen ab, so dass bereits kleinste Änderungen der Anfangsbedingungen zu exponentiell anwachsenden Abweichungen der Teilchenbahnen führen (chaotische Bahnen).

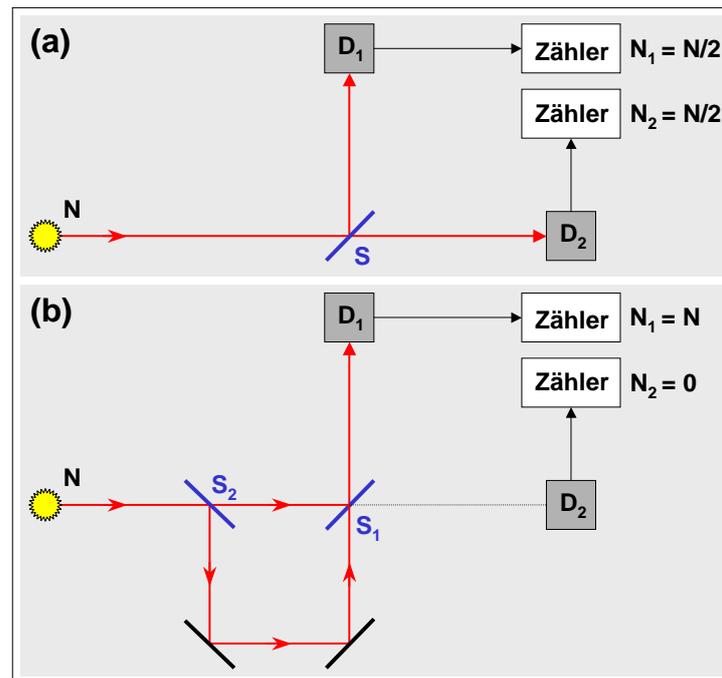


Abbildung 1.6: Die Rolle des Strahlteilers mit (a) und ohne (b) Interferenz.

Die Rolle des Messprozesses

Bei der quantenmechanischen Beschreibung der Messung von Ort und Impuls beeinflusst der Messprozess den Zustand des zu messenden Systems.

Bedeutung der Quantenphysik für das Naturverständnis

Die Quantenphysik kann viele experimentelle Tatsachen (Stabilität der Atome, Beugung von Elektronen, Photoeffekt, Schwarzkörperstrahlung) befriedigend beantworten. In ihrer Erweiterung zur Quantenelektrodynamik befinden sich ihre Aussagen in völliger Übereinstimmung mit allen bisherigen experimentellen Ergebnissen.

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation und die Unschärferelation in der Quantenphysik haben bedeutsame philosophische Konsequenzen. Das zukünftige Verhalten eines Mikroteilchens ist nicht völlig durch seine Vergangenheit bestimmt, wie dies ja in der klassischen Mechanik der Fall ist. Erstens kann der Anfangszustand nicht exakt bestimmt werden und zweitens hat auch der Endzustand eine Wahrscheinlichkeitsverteilung um den von der klassischen Physik vorausgesagten Wert.

Ein wichtiger Aspekt betrifft auch die Rolle des Experimentators bei einem Messprozess. Durch die Messung einer Größe beeinflusst der Experimentator immer die zu dieser Größe komplementäre Größe. Durch die Messung wird also der Zustand des Systems geändert. Dadurch kann das untersuchte System nicht mehr getrennt vom Experimentator betrachtet werden. Dies führt, wie durch folgendes Beispiel gezeigt, zu erstaunlichen Ergebnissen:

Ein Lichtstrahl wird an einem Strahlteiler S in zwei gleich intensive Teilstrahlen aufgeteilt und dann von zwei Detektoren D_1 und D_2 analysiert (siehe Abb. 1.6). Jeder der Detektoren zählt die statistisch auftreffenden Photonen und misst im zeitlichen Mittel die gleiche Anzahl. Da ein Photon aber nicht teilbar ist, kommt es entweder an Detektor 1 oder Detektor 2 an, d.h. sie müssen statistisch verteilt entweder von S reflektiert oder durch S transmittiert werden. Jetzt wird ein zweiter Strahlteiler eingebracht. Durch

unterschiedliche Phasendifferenzen durch die unterschiedlichen Laufwege der Teilstrahlen in Abb. 1.6b beobachtet man nur eine endliche Intensität an D_1 (konstruktive Interferenz), während D_2 keine Photonen detektiert (destruktive Interferenz). Dies wird auch beobachtet, wenn die Lichtintensität so gering ist, dass immer nur ein Photon sich in der ganzen Anordnung befindet. Es stellt sich dann die Frage, woher die Photonen wissen, dass sie jetzt nur einen Weg, nämlich zum Detektor 1 gehen dürfen. Dieses Experiment zeigt, dass man Photonen keinen Weg zuordnen kann, sondern nur eine Nachweiswahrscheinlichkeit am Detektor. Eine Zuordnung des Weges würde Δx endlich machen und dadurch auch eine endliche Impulsunschärfe der Photonen verursachen, die wiederum die Interferenzerscheinung beeinflussen würde.

1.3 Grundlagen der Quantenmechanik

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir meist nur qualitative Überlegungen gemacht. Durch Analogieschlüsse haben wir eine Übertragung des Wellenbilds auf Teilchen vorgenommen. Wir wollen uns jetzt mit einer quantitativen Analyse befassen. Quantitative Überlegungen zur Physik von Quantenteilchen können aber nur dann zu befriedigenden Resultaten führen, wenn die Natur der betrachteten mikroskopischen Objekte in ihrem Unterschied zu den Makroobjekten Berücksichtigung findet. Dies geschieht in der *Quantentheorie*. Ebenso wie das Verständnis der verschiedenen Teilgebiete der klassischen Physik ein Eingehen auf die Begriffssysteme und die Axiomatik der Newton'schen Mechanik, der Thermodynamik und der Elektrodynamik erfordert, können die Gebiete der Quantenphysik nicht losgelöst von der quantentheoretischen Betrachtungsweise verstanden werden. Wir wollen deshalb in diesem Abschnitt die Grundgedanken und Begriffe der *nichtrelativistischen Quantenmechanik* darlegen, mit der viele von der klassischen Vorstellung abweichende Eigenschaften von Atomen, Molekülen und auch Elementarteilchen erklärt werden können.

Wir werden uns im Wesentlichen auf die Schrödinger-Darstellung der Quantenmechanik, der so genannten Wellenmechanik beschränken. Die Schrödinger-Gleichung ist nicht Lorentz-invariant, d.h. sie beschreibt nur nichtrelativistische Teilchen. Gewisse Eigenschaften von Quantenteilchen, speziell im Zusammenhang mit deren magnetischem Verhalten, werden durch diese nichtrelativistische Beschreibung nicht richtig wiedergegeben. Das relativistische Pendant zur Schrödinger-Gleichung ist die *Dirac-Gleichung*. Ihre Lösung ist allerdings mathematisch viel aufwändiger und wir wollen hier darauf nicht eingehen. Wir werden uns mit dem Schrödinger-Formalismus zufrieden geben und wenden notwendige relativistische Korrekturen nachträglich an. Es sei hier aber darauf hingewiesen, dass die Dirac-Gleichung ganz grundlegende Eigenschaften von Quantenteilchen wie etwa den Spin und die Existenz von Antiteilchen beinhaltet. Dies zeigt deutlich, dass die Forderung nach Lorentz-Invarianz eine fundamentale Bedingung für die richtige Beschreibung der physikalischen Zusammenhänge ist.

Wir haben bereits gesehen, dass wir wegen der Unschärferelation Ort und Impuls eines mikroskopischen Teilchens nicht mit beliebiger Genauigkeit gleichzeitig angeben können. Anstelle der klassischen Teilchenbahn, die für einen Massenpunkt durch eine wohldefinierte Raumkrve $\mathbf{r}(t)$ dargestellt werden kann, tritt die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu einem Zeitpunkt t in einem Volumenelement dV zu finden. Wir werden sehen, dass das eigentlich Neue an der Quantenphysik die Beschreibung von klassischen Teilchen durch eine so genannte *Zustandsfunktionen* ist. Die deterministische Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von Ort und Impuls wird dabei ersetzt durch eine statistische Beschreibung, in deren Rahmen man lediglich Wahrscheinlichkeiten für die Ergebnisse von Messungen angeben kann. Wir werden in diesem Abschnitt zeigen, wie die Zustandsfunktion berechnet werden kann. Wir werden ferner anhand von einfachen Beispielen die physikalischen Grundlagen der Quantenmechanik und ihre Unterschiede zur klassischen Mechanik illustrieren.

1.3.1 Schrödinger-Gleichung und Materiewellen

Die Schrödinger-Gleichung

Ausgehend von der Existenz der Materiewellen gab **Erwin Schrödinger** im Jahr 1926 durch gewisse Analogieschlüsse zur Wellenoptik den Anstoß zur Entwicklung der *Wellenmechanik*, indem er zunächst versuchte, eine klassische Feldtheorie für Quantenobjekte zu entwickeln. Nach Schrödinger können Materiewellen durch die wellenförmige Ausbreitung einer *Zustandsfunktion* $\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben werden, wobei für diese analog zur Wellenoptik die Beziehungen

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right] \quad (1.3.1)$$

gilt.

Wir betrachten zunächst den Fall eines freien Teilchens, für das die potentielle Energie E_{pot} gleich Null ist und deshalb $E = E_{\text{kin}}$ gilt. Aufgrund der Analogie zur Wellenoptik liegt es ferner nahe, von der Wellengleichung

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{v_{\text{ph}}^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0 \quad (1.3.2)$$

für Wellen mit der Phasengeschwindigkeit v_{ph} auszugehen. Bei stationären Problemen, bei denen \mathbf{p} und E nicht von der Zeit abhängen, lässt sich die Wellenfunktion in einen vom Ort abhängigen Anteil $\Psi(\mathbf{r}, 0) = A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ und einen von der Zeit abhängigen Phasenfaktor $\exp(-i\omega t)$ aufspalten, so dass wir

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, 0) \exp(-i\omega t) \quad (1.3.3)$$

schreiben können. Geht man mit diesem Ansatz in die Wellengleichung, so erhält man wegen

$$k^2 = \frac{\omega^2}{v_{\text{ph}}^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} = \frac{2m\omega}{\hbar} \quad (1.3.4)$$

die Gleichung

$$\nabla^2 \Psi = -k^2 \Psi = -\frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} \Psi. \quad (1.3.5)$$

Im allgemeinen Fall kann sich das Teilchen in einem Potenzial V bewegen. Ist das Potenzial konservativ, so können wir jedem Raumpunkt eine potentielle Energie E_{pot} zuordnen, wobei die Gesamtenergie $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$ konstant ist. Mit $E_{\text{kin}} = E - E_{\text{pot}}$ erhalten wir dann aus (1.3.5) die *stationäre Schrödinger-Gleichung*¹⁴

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E_{\text{pot}} \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.6)$$

¹⁴Diese Gleichung stellt das quantenmechanische Analogon zum Energiesatz $E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = E$ dar.

Differenziert man (1.3.1) partiell nach der Zeit, so erhält man

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = E_{\text{kin}} \Psi(\mathbf{r}, t) , \quad (1.3.7)$$

woraus wir mit (1.3.5) die zeitabhängige Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) . \quad (1.3.8)$$

Für nichtstationäre Probleme (d.h. $E_{\text{kin}} = E_{\text{kin}}(t)$ und $p = p(t)$) lässt sich $\partial^2 \Psi / \partial t^2$ nicht mehr als $-\omega^2 \Psi$ schreiben und damit aus der Wellengleichung für die Materiewellen für Teilchen herleiten. Schrödinger postulierte nun, dass auch bei einer zeitabhängigen potentiellen Energie die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E_{\text{pot}}(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.3.9)$$

gelten soll. Diese allgemeine *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung* wurde von Schrödinger erstmals 1926 angegeben (siehe hierzu auch Physik III). Sie ist mittlerweile durch unzählige Experimente bestätigt worden und stellt die Grundgleichung der Quantenmechanik dar.

Es sei hier auf einige wichtige Sachverhalte hingewiesen:

- Erstens ist festzuhalten, dass die Schrödinger-Gleichung eine Differenzialgleichung erster Ordnung in der Zeit und zweiter Ordnung im Ort ist. Ort und Zeit werden deshalb nicht gleichwertig behandelt. Sie kann daher nicht relativistisch invariant sein. Dies verwundert uns nicht, basierte doch unsere Motivation der Schrödinger-Gleichung auf der nicht-relativistischen Energie-Impuls Beziehung $E = p^2/2m$. Relativistische Verallgemeinerungen der Schrödinger-Gleichung wurden relativ früh vorgeschlagen. Dabei boten sich zwei Wege an. Es galt entweder eine Gleichung zu finden, die nur zweite Ableitungen enthält (Klein-Gordon-Gleichung), oder aber eine Gleichung die sich auch beim Ort mit den ersten Ableitungen begnügt (Dirac-Gleichung). Beide Wege haben physikalisch ihre Berechtigung und führen auf Wellengleichungen für Bosonen und Fermionen. Diese Gleichungen, die übrigens automatisch die Antiteilchen sowie den Spin implizieren, sollen hier nicht diskutiert werden (üblicherweise werden diese Gleichungen in den Theorievorlesungen zur Quantenmechanik diskutiert).
- Ein zweiter wichtiger Punkt ist, dass die Schrödinger-Gleichung die Masse als Parameter enthält. Sie bezieht sich daher auf ein System, in dem die Teilchenzahl erhalten ist.
- Drittens enthält die Schrödinger-Gleichung explizit die Größe \hbar . Dies ist bei der Wellengleichung des elektromagnetischen Feldes nicht der Fall (vergleiche (1.1.1)).
- Im Unterschied zur linearen Dispersionsrelation $\omega(k) = ck$ elektromagnetischer Wellen gilt für Materiewellen wegen $E = \hbar\omega = p^2/2m$ und $p = \hbar k$ eine *quadratische Dispersionsrelation* $\omega(k) = (\hbar/2m) \cdot k^2$.

Erwin Schrödinger (1887 -1961), Nobelpreis für Physik 1933:

Erwin Schrödinger wurde am 12. August 1887 in Wien geboren. Nach der Schulausbildung am k. u. k. Akademischen Gymnasium in Wien studierte Schrödinger Mathematik und Physik in Wien. 1910 wurde er mit einer Arbeit "über die Leitung der Elektrizität auf der Oberfläche von Isolatoren an feuchter Luft" promoviert und begann als Assistent am 2. Physikalischen Institut der Universität Wien. Hier habilitierte er sich im Jahre 1914. Anschließend nahm er als Offizier der Festungsartillerie am ersten Weltkrieg teil. Nach mehreren Aufenthalten an verschiedenen deutschsprachigen Universitäten (Wien und Jena, Dozent; Stuttgart, Extraordinarius; Breslau, Ordinarius) ging er 1921 an die Universität Zürich und übernahm nach Albert Einstein und Max von Laue den Lehrstuhl für Physik. Am 1. Oktober 1927 folgte er einem Ruf auf den Lehrstuhl für Theoretische Physik der Universität Berlin und wurde somit Nachfolger von Max Planck. Die Machtergreifung Hitlers im Jahre 1933 war für Deutschland nicht nur in politischer, sondern auch in wissenschaftlicher Hinsicht ein Wendepunkt. In den ersten Wochen des Naziregimes wurden tausende Gelehrte infolge politischer und rassistischer Verfolgung aus ihren Ämtern entlassen. Die Zerschlagung Berlins als physikalische Hochburg einerseits, eine zutiefst bürgerlich-humanistische und antifaschistische Grundhaltung Schrödingers andererseits, veranlassten ihn im Oktober zur Emigration nach Oxford. Kurz darauf erhielt er die Nachricht, dass ihm zusammen mit dem Engländer Paul Dirac der Nobelpreis für Physik des Jahres 1933 (in Anerkennung der Entdeckung und Anwendung neuer fruchtbarer Formulierungen der Atomtheorie) zugesprochen worden war. Nach drei Jahren des Exils zog es ihn 1936 an die Universität Graz. Nach Anschluß Österreichs an Hitlerdeutschland im Jahre 1938 wurde Schrödinger aber frist- und pensionslos aus dem Grazer Ordinariat entlassen, wonach er fluchtartig das Land verließ. Nach Aufenthalt in Oxford und Belgien ging er im Oktober 1939 an das Institute for Advanced Studies in Dublin, wo er bis 1956 tätig war. Im April 1956 kehrte er nach Wien zurück, trat wenige Tage nach seiner Ankunft ein "ad personam Ordinariat für Theoretische Physik" an. 1957 erfolgte Schrödingers Emeritierung. Er schied aber erst nach einem so genannten Ehrenjahr 1958 aus dem Dienst aus. Seine letzten Lebensjahre verlebte er relativ zurückgezogen im Alpendorf Alpbach, in Tirol.



Erwin Schrödinger verstarb am 04. Januar 1961 in Wien.

- Gleichung (1.3.6) und (1.3.8) sind lineare homogene Differentialgleichungen. Deshalb können verschiedene Lösungen linear überlagert werden (*Superpositionsprinzip*). Das heißt, sind Ψ_1 und Ψ_2 Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so ist es auch $\Psi_3 = a\Psi_1 + b\Psi_2$.
- Schließlich ist die Schrödinger-Gleichung komplex und damit auch deren Lösungen. Zwar hat auch die Wellengleichung des elektromagnetischen Feldes komplexe Lösungen, wir können aber immer reelle physikalische Wellenfelder durch Linearkombinationen erhalten.¹⁵ Im Photonenbild impliziert dies die Kombination von Quanten mit entgegengesetzten Impulsen.

Die Schrödinger-Gleichung wurde aus Analogiebetrachtungen gewonnen. Ihre echte Bedeutung wird erst durch die folgenden Abschnitte deutlich. Durch den Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$ können aus der Schrödinger-Gleichung die Gesetze der klassischen Mechanik hergeleitet werden. D.h. es kann immer dann die klassische Mechanik Anwendung finden, wenn Wirkungen von der Größenordnung der Planck-Konstanten vernachlässigbar sind. Damit ist die klassische Mechanik ein Grenzfall der Quantenmechanik und nicht umgekehrt. Die Gesetze der Quantenmechanik können also nicht aus denjenigen der klassischen Mechanik heraus begründet werden.

¹⁵Die komplexe Schreibweise der elektromagnetischen Wellen ist nur zur Vereinfachung der Winkelfunktion und deshalb lediglich eine mathematische Bequemlichkeit aber keine inhärente Eigenschaft. Die komplexe Natur der Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ spiegelt wider, dass $\Psi(\mathbf{r}, t)$ nicht die reale physikalische Bedeutung zukommt wie etwa der elektrischen Feldstärke $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$.

Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung

Für einige einfache, eindimensionale Probleme (z.B. Teilchen im unendlich hohen Potenzialtopf und harmonischen Oszillatorpotenzial, Durchgang durch Potenzienschwelle) wurden die Lösungen der Schrödinger-Gleichung bereits in der Physik III abgeleitet. Auf eine Diskussion dieser Lösungen wird deshalb hier verzichtet.

Die Interpretation der Zustandsfunktion

Bisher wissen wir nur, dass die Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist. Wie aber muss diese Lösung physikalisch interpretiert werden? Die erste Interpretation gab Schrödinger selbst und basiert auf dem Begriffsbild der klassischen Physik. Die Wellenoptik verknüpft nämlich mit dem Absolutquadrat der Amplituden $|E|^2 = E^*E$ die Intensität einer Welle. Es stellte sich deshalb die Frage, ob nicht auch die Größe $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ einer messbaren Eigenschaft des mit der Zustandsfunktion beschriebenen Quantenobjekts zugeordnet werden kann. Um diese Frage zu klären, können wir einen Teilchenstrom voneinander unabhängiger, nicht wechselwirkender Teilchen¹⁶ betrachten und uns die Frage stellen, wie viele Objekte dN sich zu einer bestimmten Zeit t in einem bestimmten Volumen dV befinden.

Wir haben bereits in Physik III gesehen, dass wir aus der Schrödinger-Gleichung eine Art Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_T + \nabla \cdot \mathbf{J}_T = 0 \quad (1.3.10)$$

mit

$$\mathbf{J} = \left[\frac{h}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi + \Psi \nabla \Psi^*) \right] \quad (1.3.11)$$

und

$$\rho_T \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.3.12)$$

ableiten können. Interpretiert man \mathbf{J}_T als Teilchenstromdichte, das heißt den Teilchenstrom durch die ein Volumen dV einschließende Oberfläche, dann entspricht (1.3.10) der Kontinuitätsgleichung der Elektrodynamik. Die Größe $\rho_T = \Psi^*\Psi$ entspricht dann der Teilchenzahldichte.¹⁷

¹⁶Die Schrödinger-Gleichung enthält keine Wechselwirkungsterme.

¹⁷Man erkennt dies, wenn man (1.3.10) über ein endliches Volumen integriert

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{J}_T dV = - \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_T dV$$

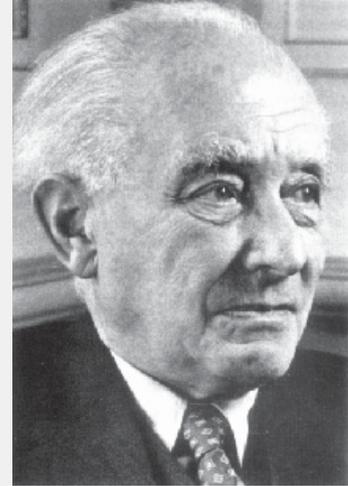
und das linke Integral mit Hilfe des Gaußschen Satzes in ein Oberflächenintegral über die das Volumen umschließende Oberfläche A überführt:

$$\oint_A \mathbf{J}_T dA = - \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_T dV.$$

Das rechte Integral gibt die zeitliche Änderung der Teilchenzahl im Volumen V an. Diese kann nur durch einen Teilchenfluss durch die das Volumen umschließende Oberfläche erfolgen. Deshalb gibt \mathbf{J}_T eine Teilchenströmung und ρ_T eine Teilchendichte an.

Max Born (1882 - 1970), Nobelpreis für Physik 1954:

Max Born wurde am 11. Dezember 1882 in Breslau geboren. Als Sohn einer wohlhabenden Familie konnte er sein Studium, frei von Geldsorgen, breit anlegen. So orientierte er sich zunächst in Breslau, Heidelberg und Zürich in diversen Studiengängen, bis er 1904 ein Mathematikstudium in Göttingen begann. Nach der Promotion im Jahre 1906 bildete er sich in Breslau und Cambridge in Physik weiter. 1908 kehrte er an die Universität Göttingen zurück und habilitierte sich 1909. Er untersuchte 1912 theoretisch die möglichen Schwingungen der Atome in einem Gitter und leitete daraus den Verlauf der spezifischen Wärme als Funktion der Temperatur mit Benutzung der Quantentheorie ab. Albert Einstein hatte schon mit einer sehr groben Annahme über die Schwingungen den Verlauf bei tiefen Temperaturen dargestellt, doch die Ergebnisse von Max Born entsprachen den Messungen viel besser. 1914 wurde er an die Universität Berlin als außerordentlicher Professor für theoretische Physik und kinetische Theorie fester Körper berufen. Durch sein Buch "Dynamik der Kristallgitter", das 1915 erschien gilt er als Begründer der Kristallgittertheorie. 1918 vereinbarte er mit dem in Frankfurt in einer vergleichbaren Stellung wirkenden Max von Laue einen Tausch der Lehrstühle. So wechselte Max von Laue 1919 an das Kaiser Wilhelm Institut für Physik in Berlin und Max Born nach Frankfurt. Hier war Otto Stern Privatdozent und wurde Borns Assistent.



1921 erhielt er einen Ruf an die Universität Göttingen. Hier arbeitete er mit James Franck und Robert Pohl zusammen. Gemeinsam mit seinen Assistenten verfasste er 1925 eine umfassende Theorie der atomaren Erscheinungen, der so genannten Quantenmechanik. Mit der Machtübernahme durch die Nationalsozialisten in Deutschland wurde er 1933 aufgrund seiner jüdischen Abstammung zwangsweise beurlaubt. Über Zwischenstationen in Südtirol, Indien und Cambridge erhielt er 1936 einen Ruf nach Edingburgh. 1939 erhielt er die britische Staatsbürgerschaft. 1953 trat er von seinem Lehrstuhl zurück und kehrte 1954 nach Deutschland zurück. Im selben Jahr wird er mit dem Nobelpreis für Physik für seine Arbeiten zur Quantenmechanik und Kristallgittertheorie ausgezeichnet. Seine Arbeiten über die Quantentheorie werden jedoch von seinem Freund Albert Einstein nicht anerkannt.

Am 5. Januar verstirbt er in Göttingen.

Aus der eben beschriebenen Interpretation der Zustandsfunktion ergeben sich aber Widersprüche zur Erfahrung. Betrachtet man z.B. einen Strom von Elektronen, so enthält ein Volumen ΔV die Ladung $\Delta q = e\Psi^*\Psi\Delta V$. Es lässt sich aber stets ein ΔV finden, so dass $\Delta q < e$ wird, d.h. ein Ergebnis, das dem experimentellen Befund der Existenz der Elementarladung widerspricht. Auf ähnliche Widersprüche trifft man bei der Analyse von Elektroneninterferenzen (z.B. Beugung am Doppelspalt). Diese Überlegungen zeigen, dass die Zustandsfunktion nicht im klassischen Sinne als Feldfunktion verstanden werden kann und damit das Geschehen im Quantenbereich nicht in einem klassischen Wellenbild zu beschreiben ist. Die Zustandsfunktion Ψ stellt zwar bezüglich des mathematischen Formalismus ein Feld dar, physikalisch fehlen aber Ψ wesentliche Eigenschaften, die ein Feld charakterisieren. Ψ ist insbesondere keine physikalische Größe und damit auch nicht, wie es für eine Feldgröße in jedem Raumpunkt zu fordern ist, messbar. Wir stellen also fest, dass die Interpretation von $\Psi^*\Psi$ als Teilchenzahldichte zu Widersprüchen mit der Erfahrung führt.

Wir haben bereits wiederholt darauf hingewiesen, dass im Quantenbereich weder ein Teilchenbild noch ein Wellenbild allein ausreichend ist. So können Beugung und Interferenzerscheinungen von Elektronen oder Neutronen nur im Wellenbild gedeutet werden. Photoeffekt oder Compton-Effekt dagegen nur im Teilchenbild. Weiterhin zeigten Doppelspaltexperimente mit Photonen oder Elektronen (siehe Physik III), dass diese zwar mit sich selbst interferieren können, aber immer nur als ganzes von einem Detektor registriert werden können. Es muss deshalb für den Quantenbereich ein Modell entwickelt werden, in dem nur die der Quantenwelt angepassten Züge der beiden klassischen Modellvorstellungen enthalten sind. Die Doppelspaltexperimente zeigen, dass im Quantenbereich grundsätzlich nur Wahrscheinlichkeitsaussagen gemacht werden können. Es ist deshalb naheliegend, die Zustandsfunktion Ψ nach **Max Born** (1926) als *Wahrscheinlichkeitsdichteamplitude* aufzufassen. Der Ausdruck $\Psi^*\Psi dV$ gibt dann die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass man das Quantenobjekt zur Zeit t im Volumen dV findet. Da das

Quantenobjekt sich irgendwo im Raum befinden muss, ergibt sich daraus die *Normierungsbedingung*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dV = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1 . \quad (1.3.13)$$

Wir erhalten damit folgende Interpretation der Zustandsfunktion:

$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, dass man bei einer Ortsmessung zur Zeit t das Quantenobjekt am Ort \mathbf{r} findet. Für die Wahrscheinlichkeit $W(\mathbf{r}, t)dV$ das Quantenobjekt zur Zeit t im Volumen dV zu finden gilt:

$$W(\mathbf{r}, t)dV = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV . \quad (1.3.14)$$

Die statistische Interpretation der Zustandsfunktion darf nun nicht so interpretiert werden, dass man mit *einem* Teilchen Statistik treiben kann. Vielmehr wird aus den Wahrscheinlichkeitsaussagen auf den Zustand einer Vielzahl von gleichartigen, nicht wechselwirkenden Quantenobjekten, d.h auf den Zustand einer *quantenmechanischen Gesamtheit* geschlossen. Diese statistische Deutung trägt der Tatsache Rechnung, dass die experimentellen Ergebnisse Mittelwerte über viele Einzelereignisse sind.

Energieeigenwerte und Eigenfunktionen

Die zeitliche Änderung eines quantenmechanischen Systems wird durch die Schrödinger-Gleichung (1.3.9) bestimmt. In vielen Fällen interessieren aber nur stationäre Zustände. Dies gilt insbesondere dann, wenn das Potenzial $V(\mathbf{r})$ nicht explizit zeitabhängig ist. In diesem Fall faktorisiert die Lösungsfunktion in einen orts- und zeitabhängigen Anteil, d.h. sie lässt sich als Produkt $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, 0) \exp(-i\omega t)$ schreiben (siehe Physik III). Die stationären Zustände werden durch die komplexe Amplitude $\Psi(\mathbf{r})$ der Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben, die der *stationären Schrödinger-Gleichung* oder *Energieeigenwertgleichung*

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_{\text{pot}}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.15)$$

gehört.

Die Energieeigenwertgleichung hat vielfach nur für bestimmte, diskret liegende Werte E_k der Energie physikalisch sinnvolle Lösungen. Dies resultiert daraus, dass die Lösungsfunktionen Ψ_k zusätzlichen Bedingungen (Randbedingungen) unterliegen. Dadurch werden die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte des Systems bestimmt:

Die speziellen Energiewerte E_k , für die stationäre Lösungen der Energieeigenwertgleichung existieren, heißen Energieeigenwerte, die zugehörigen Lösungsfunktionen Ψ_k Eigenfunktionen.

Es sei hier ohne Beweis festgehalten, dass die zu verschiedenen Energieeigenwerten $E_k \neq E_l$ gehörenden Eigenfunktionen Ψ_k und Ψ_l zueinander *orthogonal* sind. Bei entsprechender Normierung gilt also

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_l^* \Psi_k dV = \delta_{kl} . \quad (1.3.16)$$

Dies gilt allerdings nur dann, wenn zu jedem Energieeigenwert E_k nur eine Eigenfunktion Ψ_k existiert. Dies kann, muss aber nicht der Fall sein. Aus diesem Grund wird der Begriff *Entartung* eingeführt:

Existieren zu einem Energieeigenwert E_k die m linear unabhängigen Eigenfunktionen Ψ_{ki} ($i = 1, 2, \dots, m$), d.h. existieren m Eigenfunktionen, für die

$$\sum_{i=1}^m c_i \Psi_{ki} = 0 \quad (1.3.17)$$

nur dann gilt, wenn sämtliche $c_i = 0$ sind, dann heißt der Eigenwert $(m - 1)$ -fach entartet.

Die zu einem $(m - 1)$ -fach entarteten Eigenwert gehörenden Eigenfunktionen lassen sich wegen ihrer linearen Unabhängigkeit orthogonalisieren und normalisieren. Die Gesamtheit aller orthonormierten Eigenfunktionen bildet ein *vollständiges Funktionensystem*, nach dem die Zustandsfunktion entwickelbar ist:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(t) \Psi_k(\mathbf{r}) \quad (1.3.18)$$

Gegenüberstellung von klassischer Welle und quantenmechanischer Zustandsfunktion

In Tabelle 1.2 sind einige wichtige Eigenschaften der quantenmechanischen Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ den entsprechenden Eigenschaften einer klassischen Welle $f(\mathbf{r}, t)$ nochmals gegenübergestellt.

1.3.2 Operatoren

Im vorangegangenen Abschnitt wurde zur Beschreibung von Quantenteilchen die Schrödinger-Gleichung abgeleitet. Aus ihrer Lösung lassen sich statistische Aussagen über die Energiezustände von Quantenobjekten machen. Um die Tatsache zu unterstreichen, dass sich bei der Messung an einem mikroskopischen Objekt dessen Zustand selbst beeinflusst wird, haben wir den Begriff "*physikalische Größe*" durch den Begriff "*Observable*" ersetzt. Unter einer Observablen A verstehen wir eine beobachtbare, durch eine Messvorschrift definierte physikalische Größe. Der Formalismus der Quantenmechanik versetzt uns in die Lage, Angaben über die bei der Messung einer Observablen A prinzipiell möglichen Messwerte A_i zu machen und über den zu erwartenden Messwert statistische Aussagen zu treffen. Hierzu ist in der Quantenmechanik die Verwendung von *Operatoren* zur Beschreibung von Observablen charakteristisch. Die in der klassischen Physik übliche Auffassung von einer physikalischen Größe als einer reellen Funktion anderer physikalischer Größe, z.B. $E_{\text{kin}} = f(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m$, ist dafür zu eng, weil eine reelle Funktion nur reelle Zahlen miteinander verknüpft. Der übergeordnete Begriff Operator beschreibt dagegen die Zuordnung zwischen zwei Teilmengen aus zwei beliebigen abstrakten Räumen.

In der Schrödingerschen Wellenmechanik geht man davon aus, dass der Zustand eines Systems durch eine komplexe Zustandsfunktion Ψ beschrieben werden kann. Die Zustandsfunktion stellt aber selbst keine

| klassische Welle | quantenmechanische Zustandsfunktion |
|---|--|
| Größe, die sich wellenförmig ausbreitet $f(\mathbf{r}, t) = f_0(\mathbf{r}) \exp[i\omega t]$ | Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}) \exp[i\omega t]$ |
| Dispersionsbeziehung $k^2 = \frac{\omega^2}{v_{\text{ph}}^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2}$ | Dispersionsbeziehung $k^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} = \frac{2m\omega}{\hbar}$ |
| Wellengleichung $\nabla^2 f - \frac{1}{v_{\text{ph}}^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0$ | Schrödinger-Gleichung $\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V \right) \Psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = 0$ |
| stationäre Wellengleichung $\nabla^2 f_0 + k^2 f_0 = 0$ | stationäre Schrödinger-Gleichung $\nabla^2 \Psi_0 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi_0 = 0$ |
| f_0 ist als Amplitude der Welle eine messbare Größe | Ψ_0 kann als Wahrscheinlichkeitsamplitude keiner messbaren Größe zugeordnet werden |
| $ f ^2$ ist proportional zur Intensität | $ \Psi ^2 dV$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Quantenobjekt im Volumenelement dV zu finden |

Tabelle 1.2: Gegenüberstellung der Eigenschaften einer klassischen Welle und der quantenmechanischen Zustandsfunktion.

physikalische Größe bzw. Observable dar, sondern wird vielmehr über die Schrödinger-Gleichung mit der physikalischen Begriffswelt verknüpft. Im mathematischen Formalismus der Quantenmechanik wird nun jeder physikalischen Observablen A ein Operator \hat{A} zugeordnet, der auf die Wellenfunktion wirkt, um eine möglichst allgemeine und zweckmäßige Beschreibung zu erhalten. Wir werden weiter unten noch sehen, dass aus physikalischen Gründen nur lineare hermitesche Operatoren in Frage kommen. Die Eigenwerte dieser Operatoren sind dann reell und mit den experimentell zugänglichen Messwerten einer Observablen identisch.

Bevor wir einzelne Operatoren diskutieren, wollen wir uns an den klassischen Hamilton-Formalismus¹⁸ erinnern. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen eines mechanischen Systems lauten

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad i = 1, 2, 3, \dots, f, \quad (1.3.19)$$

¹⁸William Rowan Hamilton (1805 - 1865).

wobei q_i und p_i die verallgemeinerten Lage- und Impulskoordinaten und f die Anzahl der mechanischen Freiheitsgrade sind. Die *Hamilton-Funktion* ist durch

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^f \frac{\partial q_i}{\partial t} p_i - L(q_i, \partial q_i / \partial t, t) \quad (1.3.20)$$

gegeben, wobei L die *Lagrange-Funktion*¹⁹

$$L(q_i, \partial q_i / \partial t, t) = E_{\text{kin}} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t}(t), \dots, \frac{\partial q_f}{\partial t}(t) \right) - E_{\text{pot}}(q_1(t), \dots, q_f(t)) \quad (1.3.21)$$

ist. Liegen nur konservative Kräfte vor, dann ist H mit der Gesamtenergie E identisch.²⁰

Um von der klassischen Beschreibung zu einer zweckmäßigen Darstellung der Gesetzmäßigkeiten im Bereich der Quantenphysik zu gelangen, führen wir folgende Operatoren ein:

$$\hat{\mathbf{p}}_i \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \quad \text{Impulsoperator} \quad (1.3.22)$$

$$\hat{\mathbf{q}}_i \equiv q_i \quad \text{Ortsoperator} \quad (1.3.23)$$

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv H(\hat{\mathbf{q}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i, t) \quad \text{Hamilton-Operator} \quad (1.3.24)$$

$$\hat{\mathbf{E}} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{Energieoperator} \quad (1.3.25)$$

Der Energieoperator $\hat{\mathbf{E}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ repräsentiert in der Quantenmechanik die Observable Energie, während der Hamilton-Operator ihren funktionellen Zusammenhang mit dem Orts- und Impulsoperator des Objektes darstellt.

Nach der obigen Definition sind einem freien Mikroobjekt ($f = 3$) der Impulsoperator

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \nabla \quad (1.3.26)$$

und der Operator der potentiellen Energie

$$\hat{E}_{\text{pot}} = V(\mathbf{r}) \quad (1.3.27)$$

zuzuordnen. Damit erhalten wir aus der klassischen Hamilton-Funktion als Hamilton-Operator für das Quantenobjekt im nichtrelativistischen Grenzfall

¹⁹Joseph-Louis Lagrange (1736 - 1812).

²⁰Die Hamilton-Funktion eines Teilchens mit Impuls \mathbf{p} , der kinetischen Energie $E_{\text{kin}} = p^2/2m$ und der potentiellen Energie E_{pot} schreibt sich demnach nach dem Energieerhaltungssatz der klassischen Mechanik $H = E = p^2/2m + E_{\text{pot}}$.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{E}_{\text{pot}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) . \quad (1.3.28)$$

Damit lassen sich die Schrödinger-Gleichung (1.3.9) und die Energieeigenwertgleichung (1.3.15) in Operatorschreibweise als

$$\hat{H} \Psi = \hat{E} \Psi \quad (1.3.29)$$

$$\hat{H} \Psi_k = E_k \Psi_k \quad (1.3.30)$$

ausdrücken. Wir gewinnen also die Schrödinger-Gleichung aus den Gesetzen der klassischen Physik, indem wir die klassische Hamilton-Funktion durch den Hamilton-Operator ersetzen und diesen entsprechend (1.3.29) auf die Zustandsfunktion anwenden. Dieses Vorgehen erscheint zunächst formal, kann aber auf jede beliebige Observable erweitert werden.

Zur praktischen Handhabung müssen wir natürlich jeder Observablen A auch den zugehörigen Operator \hat{A} zuordnen können. Dabei nutzen wir aus, dass jedes mechanische System durch Angabe seiner Orts- und Impulskoordinaten bestimmt ist und man aus der klassischen Physik zumeist für jede physikalische Größe die Funktion $A(p_i, q_i, t)$ kennt. Mit dieser Funktion erhalten wir den zugehörigen quantenmechanischen Operator über die Vorschrift

$$\hat{A} = \hat{A}(\hat{p}_i, \hat{q}_i, t) . \quad (1.3.31)$$

Aus der klassischen Definition des Drehimpulses \mathbf{L} (bezogen auf den Nullpunkt $\mathbf{r} = 0$) eines Teilchens mit Masse m und Geschwindigkeit \mathbf{v}

$$\mathbf{L} = m(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (1.3.32)$$

folgt über die Vorschrift (1.3.31) mit der Definition des Impulsoperators der *Drehimpulsoperator*

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla) . \quad (1.3.33)$$

In kartesischen Koordinaten erhält man

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (1.3.34)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (1.3.35)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (1.3.36)$$

In Tabelle 1.3 sind einige physikalische Größen A mit ihren zugehörigen Operatoren \hat{A} zusammengefasst.

| Physikalische Größe A | Operator \hat{A} |
|---|--|
| Ortsvektor \mathbf{r} | $\hat{\mathbf{r}}$ |
| potentielle Energie E_{pot} | $\hat{E}_{\text{pot}} = V(\mathbf{r})$ |
| kinetische Energie E_{kin} | $\hat{E}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ |
| Gesamtenergie $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$ | $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ |
| Impuls \mathbf{p} | $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ |
| Drehimpuls \mathbf{L} | $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla)$ |
| z -Komponente des Drehimpulses L_z | $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ |

Tabelle 1.3: Physikalische Messgrößen mit ihren Operatoren im Ortsraum.

1.3.3 Erwartungswerte

Bei der Beschreibung der statistischen Eigenschaften eines Vielteilchensystems benutzt man in der klassischen Physik zur Definition von Mittelwerten den Begriff der *Verteilungsfunktion*. So wird z.B. die mittlere Geschwindigkeit \bar{v} eines Systems von Teilchen mit einer Geschwindigkeitsverteilung $f(v)$ durch

$$\bar{v} = \frac{\int_{v=0}^{\infty} v \cdot f(v) dv}{\int_{v=0}^{\infty} f(v) dv} = \int_{v=0}^{\infty} v \cdot f(v) dv \quad (1.3.37)$$

gegeben. Hierbei gibt $f(v)dv$ die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass ein Teilchen eine Geschwindigkeit im Geschwindigkeitsintervall zwischen v und $v + dv$ besitzt. Das Integral dieser Wahrscheinlichkeit über alle Geschwindigkeiten muss natürlich eins ergeben. Analog können wir den *Mittelwert* von v^2 oder das *mittlere Geschwindigkeitsquadrat* zu

$$\overline{v^2} = \int_{v=0}^{\infty} v^2 \cdot f(v) dv \quad (1.3.38)$$

angeben.

In der Quantenmechanik wird die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Intervall zwischen \mathbf{r} und $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ zu finden, durch $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ bestimmt. Wir können deshalb den Mittelwert

$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{r} \cdot |\Psi(\mathbf{r})|^2 dV}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\mathbf{r})|^2 dV} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{r} \cdot |\Psi(\mathbf{r})|^2 dV = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{\mathbf{r}} \Psi dV \quad (1.3.39)$$

als *Erwartungswert* für den Ort \mathbf{r} eines Teilchens auffassen. Da durch (1.3.39) also kein Mittelwert sondern ein Erwartungswert für eine Observable definiert wird, werden wir die Schreibweise

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{\mathbf{r}} \Psi dV \quad (1.3.40)$$

für den Erwartungswert verwenden. An Stelle der exakten Ortsangabe in der klassischen Physik tritt in der Quantenphysik also eine Wahrscheinlichkeitsangabe. Machen wir eine Reihe von Messungen des Ortes \mathbf{r} eines Teilchens, das durch seine stationäre Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r})$ beschrieben wird, so erhalten wir eine Verteilung der Messgröße \mathbf{r} um den Mittelwert. Wichtig ist, dass diese Verteilung nicht durch statistische Messfehler zustande kommt, sondern durch die Tatsache, dass der Ort des Teilchens aufgrund der Unschärferelation eine endliche Unschärfe $\Delta r \geq \hbar/\Delta p$ besitzt.

Allgemein erhalten wir für den Erwartungswert einer Observablen A mit der Zustandsfunktion $\Psi(\mathbf{r})$ den Ausdruck

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dV, \quad (1.3.41)$$

wobei \hat{A} der zur physikalischen Observablen A zugeordnete *Operator* heißt.²¹ Wir können also folgende allgemeine Definition geben:

Der Erwartungswert einer physikalischen Messgröße (Observablen) eines Teilchens ist der Mittelwert dieser Größe, gebildet mit der Zustandsfunktion des Teilchens.

Der Erwartungswert der Observable A im Zustand Ψ repräsentiert den Mittelwert der Messwerte dieser Observablen an einem System, das sich im Zustand Ψ befindet.

1.3.4 Eigenwerte und Eigenfunktionen

Wir haben bereits bei der Diskussion der Schrödinger-Gleichung die Begriffe Energieeigenwerte und Eigenfunktionen eingeführt. Wir wollen diese Diskussion jetzt auf beliebige Operatoren erweitern. Wenn bei der Anwendung des Operators \hat{A} auf eine Zustandsfunktion Ψ_k sich diese Funktion bis auf einen konstanten Faktor A_k reproduziert, d.h. wenn

$$\hat{A}\Psi_k = A_k\Psi_k \quad (1.3.42)$$

²¹ Bewegt sich z.B. ein Elektron, das durch die Zustandsfunktion Ψ beschrieben wird, in einem elektrostatischen Potenzial $\phi(r)$, so können wir seine mittlere potentielle Energie zu

$$\langle E_{\text{pot}} \rangle = -e \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}) \phi(r) \Psi(\mathbf{r}) dV$$

angeben.

gilt, so nennt man die Funktion Ψ_k eine *Eigenfunktion* zum Operator \hat{A} und die Konstante A_k einen *Eigenwert*. In diesem Fall folgt aus (1.3.41)

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \hat{A} \Psi_k dV = A_k \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dV = A_k . \quad (1.3.43)$$

Wir sehen also, dass der Erwartungswert $\langle A \rangle$ des Operators \hat{A} gebildet mit seiner Eigenfunktion Ψ_k gleich dem Eigenwert A_k ist, welcher wohldefiniert und ‘‘scharf’’ ist. Die quadratische Schwankung

$$\begin{aligned} \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \hat{A}^2 \Psi_k dV - \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \hat{A} \Psi_k dV \right)^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \hat{A} \cdot \hat{A} \Psi_k dV - A_k^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dV \right)^2 \\ &= A_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dV - A_k^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dV \right)^2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.3.44)$$

wird in diesem Fall Null, da $\int \Psi_k^* \Psi_k dV = 1$. Nun gilt ganz allgemein für die mittlere quadratische Abweichung einer Messgröße von ihrem Mittelwert

$$\begin{aligned} \langle \Delta A^2 \rangle &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle + \langle A \rangle^2 - \langle 2A \cdot \langle A \rangle \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = 0 , \end{aligned} \quad (1.3.45)$$

da $\langle A \cdot \langle A \rangle \rangle = \langle A \rangle^2$. Daraus können wir folgenden wichtigen Schluss ziehen:

Wenn die Zustandsfunktion Ψ_k eine Eigenfunktion zum Operator \hat{A} ist, dann wird die mittlere quadratische Schwankung der zugehörigen Messgröße A_k gleich Null. Das System befindet sich also in einem Zustand, in dem die Messgröße A_k zeitlich konstant bleibt, und man deshalb, abgesehen von Messfehlern, immer den gleichen Wert von A_k misst.

Die Energie eines stationären Zustands ergibt sich als Eigenwert des Hamilton-Operators. Die stationäre Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$\hat{H} \Psi_k = E_k \Psi . \quad (1.3.46)$$

Wir weisen hier nochmals darauf hin, dass die zu verschiedenen Eigenwerten $A_i \neq A_k$ gehörenden Eigenfunktionen Ψ_i und Ψ_k orthogonal sind (vergleiche (1.3.16)). Die Eigenfunktionen bilden ein vollständiges orthonormiertes Funktionensystem. Die Zustandsfunktion ist dann nach den Eigenfunktionen entwickelbar:

$$\Psi = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(t) \Psi_k . \quad (1.3.47)$$

Entartung

Gibt es zu einem Eigenwert A_k einer Observablen mehrere Eigenfunktionen $\Psi_{k1}, \Psi_{k2} \dots \Psi_{km}$, so nennen wir den Eigenwert A_k $(m - 1)$ -fach entartet (vergleiche (1.3.17)).

Parität

Die Parität Π einer Wellenfunktion Ψ charakterisiert ihr Verhalten bei Spiegelung am Koordinatensprung, $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. Es gilt

$$\Psi(-\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}) \quad \Pi = +1 \quad \text{gerade Parität} \quad (1.3.48)$$

$$\Psi(-\mathbf{r}) = -\Psi(\mathbf{r}) \quad \Pi = -1 \quad \text{ungerade Parität} \quad (1.3.49)$$

1.3.5 Zulässige Operatoren

Wir wollen nun noch überlegen, welche Operatoren für physikalische Observable in Betracht kommen. Die Linearität der Schrödinger-Gleichung erfordert, dass für jede Observable das Superpositionsprinzip gilt, d.h. es muss

$$\widehat{A}(\Psi_1 + \Psi_2) = \widehat{A}\Psi_1 + \widehat{A}\Psi_2 . \quad (1.3.50)$$

gelten. Es kommen also nur *lineare Operatoren* in Frage.

Weil A eine Observable sein soll, müssen wir ferner fordern, dass die Messwerte A_k reell sind, d.h. $A_k^* = A_k$. Wir können deshalb nur solche Operatoren für physikalische Größen zulassen, die reelle Eigenwerte haben. Dies ist für *hermitesche Operatoren* erfüllt.²²

²²Ein Operator heißt linear wenn er die Bedingung $\widehat{A} \sum_k \Psi_k = \sum_k \widehat{A} \Psi_k$ erfüllt. Gilt für einen linearen Operator $\int \Psi^* \widehat{A} \Psi dV = \int \Psi \widehat{A}^* \Psi^* dV = \int (\widehat{A} \Psi)^* \Psi dV$, dann heißt er hermitesch (nach Charles Hermite: 1822-1901).

Matrixdarstellung von Operatoren

In der durch die Funktionen $\Psi_i, i = 1, \dots, N$ gegebenen Basis kann der Operator \hat{A} durch die Matrixelemente

$$A_{ik} = \int \Psi_i^* \hat{A} \Psi_k dV \quad i, k = 1, \dots, N \quad (1.3.51)$$

dargestellt werden. Da die zulässigen Operatoren hermitesch sind, werden Observable in der Quantenmechanik durch *hermitesche Matrizen* dargestellt, für die $A_{ik}^* = A_{ki}$ gilt. Die quadratische Matrix (1.3.51) wird diagonal, wenn als Basis die orthonormierten Eigenfunktionen Ψ_n verwendet werden. Als Diagonalelemente treten dann die Eigenwerte A_n der Observablen, d.h. die möglichen Messwerte auf.

1.3.6 Vertiefungsthema: Quantenmechanische Bewegungsgleichung

Wir wollen in diesem Abschnitt die zeitliche Änderung

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{d\hat{A}}{dt} \Psi dV \quad (1.3.52)$$

des Erwartungswerts $\langle \hat{A} \rangle$ einer Observablen A betrachten. Die zeitliche Änderung des Erwartungswerts kann auch durch zeitliche Differentiation des Erwartungswerts $\langle \hat{A} \rangle$ gewonnen werden. Durch Ausführen der Differentiation erhalten wir

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dV \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{A} \Psi dV + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi dV + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dV . \end{aligned} \quad (1.3.53)$$

Durch Benutzen der Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^* \quad (1.3.54)$$

erhalten wir weiter

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{H}\Psi^* \hat{A} \Psi dV + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \Psi dV - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \hat{H} \Psi dV . \quad (1.3.55)$$

Aufgrund der Hermitezität des Hamilton-Operators folgt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{H}\Psi^* \hat{A} \Psi dV = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \hat{A} \Psi dV \quad (1.3.56)$$

und damit

$$\left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \left(\frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) \Psi dV . \quad (1.3.57)$$

Vergleichen wir (1.3.57) mit (1.3.52), so sehen wir, dass wir der zeitlichen Änderung der Observablen A den Operator

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \quad (1.3.58)$$

zuordnen können. Der Ausdruck (1.3.58) gestattet es, die zeitliche Änderung jedes Operators und damit die zeitliche Änderung der Messwerte der Observablen zu bestimmen. Man nennt diesen Ausdruck deshalb *allgemeine Bewegungsgleichung der Quantenmechanik*.

Im Allgemeinen ist der Kommutator $[\hat{H}, \hat{A}] = \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} \neq 0$. Nur der Kommutator vertauschbarer Operatoren verschwindet. Hängt der Operator \hat{A} nicht explizit von der Zeit ab ($\partial \hat{A} / \partial t = 0$) und ist der Kommutator $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, das heißt \hat{A} vertauscht mit dem Hamilton-Operator \hat{H} , dann ist $\frac{d\hat{A}}{dt} = 0$. Die Observable A ist dann wie eine Erhaltungsgröße der klassischen Mechanik zeitlich konstant, wir sprechen von einer *Erhaltungsobservablen*.

1.3.7 Vertiefungsthema:

Vertauschungsrelationen und Heisenbergsche Unschärferelation

Das Produkt $\hat{A}\hat{B}$ zweier Operatoren \hat{A} und \hat{B} ist im Allgemeinen nicht kommutativ, $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Man sagt dann, dass die Operatoren nicht vertauschbar sind. Zur Charakterisierung der Vertauschbarkeit von Operatoren verwenden wir den Begriff *Kommutator*:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad \text{Kommutator von } \hat{A} \text{ und } \hat{B} \quad (1.3.59)$$

Wir sehen, dass nur der Kommutator vertauschbarer Operatoren verschwindet.

Wir wollen nun zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} betrachten, die das gleiche System von Eigenfunktionen Ψ_k besitzen. Es gilt dann

$$\hat{A}\Psi_k = A_k\Psi_k \qquad \hat{B}\Psi_k = B_k\Psi_k . \quad (1.3.60)$$

Durch nochmalige Anwendung von \hat{A} und \hat{B} erhalten wir

$$\hat{B}\hat{A}\Psi_k = \hat{B}A_k\Psi_k = A_k\hat{B}\Psi_k = A_kB_k\Psi_k \quad (1.3.61)$$

$$\hat{A}\hat{B}\Psi_k = \hat{A}B_k\Psi_k = B_k\hat{A}\Psi_k = B_kA_k\Psi_k , \quad (1.3.62)$$

woraus wir durch Subtraktion der beiden Gleichungen

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\Psi_k = [\hat{A}, \hat{B}]\Psi_k = 0 \quad (1.3.63)$$

erhalten. Hierbei haben wir ausgenutzt, dass A_k und B_k reelle Zahlen sind und deshalb $A_kB_k = B_kA_k$ gilt. Da diese Beziehung für alle Ψ_k gilt, folgt insgesamt

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = [\hat{A}, \hat{B}] = 0 . \quad (1.3.64)$$

Auch die Umkehrung dieses Satzes kann bewiesen werden und wir können festhalten:

Zwei Observable besitzen das gleiche System von Eigenfunktionen, wenn die ihnen zugeordneten Operatoren vertauschbar sind. Die Observablen sind dann gleichzeitig scharf messbar.

Wir wollen für die zugehörigen Observablen eine besondere Bezeichnung einführen:

Die zwei vertauschbaren (nichtvertauschbaren) Operatoren zugeordneten Observablen bezeichnen wir als verträgliche (nichtverträgliche) Observable.

Wir wollen hier ferner ohne Beweis folgende Tatsache festhalten:²³

Verträgliche Observable sind mit beliebiger Genauigkeit gleichzeitig messbar.
 Nichtverträgliche Observable sind gleichzeitig nicht mit beliebiger Genauigkeit messbar.
 Die untere Grenze wird durch die Heisenbergsche Unschärferelation

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

gegeben.

²³Der Beweis für diese Aussage kann in den Lehrbüchern zur Quantenmechanik gefunden werden.

Für die Ortsoperatoren \hat{q}_i und die Impulsoperatoren \hat{p}_i gelten die Vertauschungsrelationen²⁴

$$\hat{p}_i \hat{q}_k - \hat{q}_k \hat{p}_i = \begin{cases} -i\hbar & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i \neq k \end{cases} \quad (1.3.65)$$

$$\hat{p}_i \hat{p}_k - \hat{p}_k \hat{p}_i = 0 \quad (1.3.66)$$

$$\hat{q}_i \hat{q}_k - \hat{q}_k \hat{q}_i = 0 \quad (1.3.67)$$

Es lässt sich ferner zeigen, dass der Impulsoperator und der Hamilton-Operator vertauschbar sind. Es kann ebenfalls gezeigt werden (siehe Abschnitt 3.3.4), dass für kugelsymmetrische Probleme der Hamilton-Operator mit $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{\mathbf{L}}_z$ vertauscht, d.h. $[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{L}}_z] = 0$ und $[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$.

1.3.8 Anwendungen

Wir haben bisher die wesentlichen Gedankengänge der Quantenmechanik erörtert. Der einzige Beweis für die Richtigkeit der gemachten Aussagen ist der Vergleich der aus der Quantenmechanik gefolgerten Gesetzmäßigkeiten mit den experimentellen Befunden. Bisher gibt es kein Experiment, das die Gültigkeit der Quantenmechanik in Zweifel gezogen hätte.

Die Übereinstimmung von theoretischen Vorhersagen und experimentellen Befunden kann explizit an Beispielen nachvollzogen werden. Einfache Beispiele wie das freie Teilchen, das Teilchen im eindimensionalen Potenzialtopf, der lineare harmonische Oszillator oder das Tunneln durch eine Potentialschwelle wurden bereits im Rahmen der Physik III diskutiert und sollen deshalb hier nicht mehr wiederholt werden.

²⁴Mit $\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$ erhalten wir

$$\hat{p}_i \hat{A} \Psi = -i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial q_i} \Psi + \hat{A} (-i\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial q_i}$$

und damit

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial q_i} = \frac{i}{\hbar} (\hat{p}_i \hat{A} - \hat{A} \hat{p}_i) = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{A}].$$

Setzen wir für den beliebigen Operator \hat{A} den Ortsoperator \hat{q}_j ein, so erhalten wir

$$\frac{\partial \hat{q}_j}{\partial q_i} = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{q}_j].$$

Für $i = j$ erhalten wir $\frac{\partial \hat{q}_i}{\partial q_i} = 1$ und damit

$$[\hat{p}_i, \hat{q}_i] = -i\hbar.$$

Für $i \neq j$ wird $\frac{\partial \hat{q}_i}{\partial q_j} = 0$ und damit

$$[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = 0.$$

1.4 Ununterscheidbarkeit

In der klassischen Physik wird häufig von unterscheidbaren Teilchen ausgegangen. So wird z.B. bei der Berechnung der Boltzmann-Verteilung von den Voraussetzung ausgegangen, dass die eine statistische Gesamtheit bildenden gleichartigen Teilsysteme (z.B. Elektronen, Protonen, Neutronen) physikalisch prinzipiell *unterscheidbar* sind. Die basiert auf der Annahme, dass klassisch der Ort und Impuls eines Teilchens zur gleichen Zeit beliebig genau gemessen werden kann. Nach der Impuls-Orts-Unschärferelation ist diese Aussage aber für Quantenobjekte nicht mehr haltbar. In der Quantenphysik zeigt es sich vielmehr, dass die *Ununterscheidbarkeit* von zwei identischen Teilchen wie z.B. zwei Elektronen eine wesentliche Eigenschaft dieser Teilchen darstellt. Dies führt z.B. zu Abweichungen von den Aussagen der Boltzmann-Statistik für Quantenobjekte. Diese Erkenntnis führte zur Entwicklung der Quantenstatistiken (Fermi-Dirac- und Bose-Einstein-Statistik, siehe Kapitel 13).

Wir wollen zunächst die Probleme und die Folgerungen aus der Ununterscheidbarkeit von Quantenteilchen anhand des in Abb. 1.7 gezeigten Experiments veranschaulichen. Die Quellen Q_1 und Q_2 senden identische Teilchen (z.B. Elektronen oder α -Teilchen) aus, die dann in der Streuzone Z miteinander kollidieren und dadurch von ihrer ursprünglichen Flugbahn abgelenkt werden. Der Nachweis der Teilchen erfolgt mit Hilfe des Detektors D , der unter dem Winkel θ zur Achse $\overline{Q_1Q_2}$ aufgestellt ist. Zur Vereinfachung machen wir alle Betrachtungen im Schwerpunktsystem.

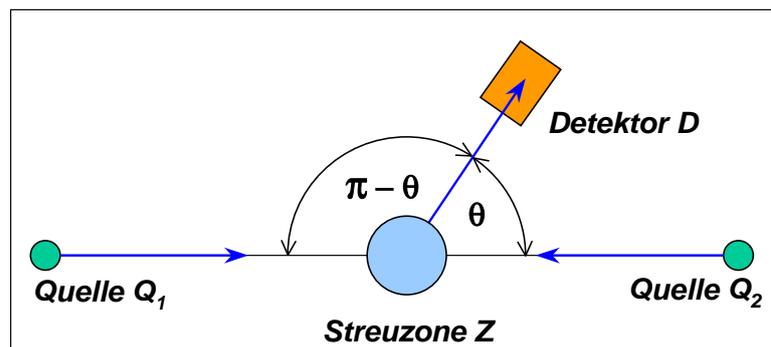


Abbildung 1.7: Anordnung zur Messung der Winkelverteilung zweier aneinander gestreuter, identischer Teilchen.

Es gibt offenbar zwei Möglichkeiten, wie ein gestreutes Teilchen in den Detektor gelangen kann (siehe Abb. 1.8):

- Teilchen 1 wird an Teilchen 2 um den Winkel θ gestreut.
- Teilchen 2 wird an Teilchen 1 um den Winkel $\pi - \theta$ gestreut.

Wie kann man nun zwischen diesen beiden Streuprozessen unterscheiden? Hierzu gibt es zwei Möglichkeiten:

1. Der Detektor ist in der Lage zu erkennen, ob es sich bei dem Nachweis um Teilchen 1 oder Teilchen 2 handelt.
2. Durch geeignete Hilfsmittel werden zu jedem Zeitpunkt die Orts- und Impulskoordinaten der beiden Teilchen bestimmt, so dass ihre Bahnen rekonstruiert werden können.

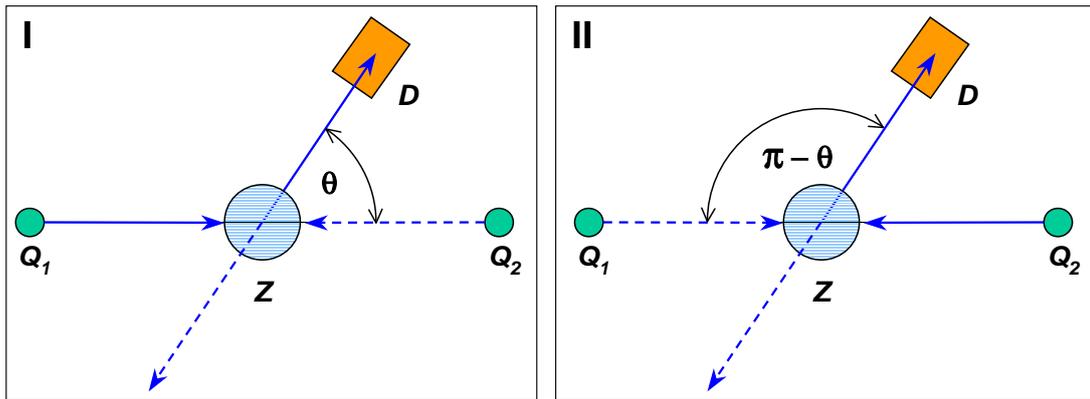


Abbildung 1.8: Streuung zweier identischer Teilchen aneinander.

Für klassische Teilchen ist Bedingung 1 ohne Probleme zu erfüllen. Zum Beispiel könnten wir anderweitig ununterscheidbare Kugeln farblich markieren. Auch Bedingung 2 können wir für klassische Teilchen erfüllen.

Wie sieht es nun für Quantenteilchen aus? Wir können Bedingung 1 erfüllen, wenn die beiden Teilchen unterschiedlich in einem Eigenwert sind, der auf den Streuprozess keinen Einfluss hat, aber am Detektor registriert werden kann. Eine solche Möglichkeit bietet z.B. im Falle eines Elektrons dessen z -Komponente des Spins. Die Spin-Spin-Wechselwirkung innerhalb der Streuzone ist verschwindend klein, die Streuung erfolgt praktisch ausschließlich am Coulomb-Potenzial der Elektronen. Damit bleibt die Ausrichtung der Spins erhalten. Wir benutzen also als Quellen zwei Stern-Gerlach Apparaturen, die Teilchen mit einer festen Orientierung der z -Komponente des Spins erzeugen, d.h. wir verwenden zwei spin-polarisierte Teilstrahlen. Für Elektronen sind nur zwei Einstellmöglichkeiten $S_z = +\hbar/2$ und $S_z = -\hbar/2$ möglich. Vor den Detektor schalten wir einen Stern-Gerlach-Filter, der nur Teilchen mit einer bestimmten Orientierung von S_z durchlässt. Die experimentelle Anordnung dafür ist in Abb. 1.9 skizziert.

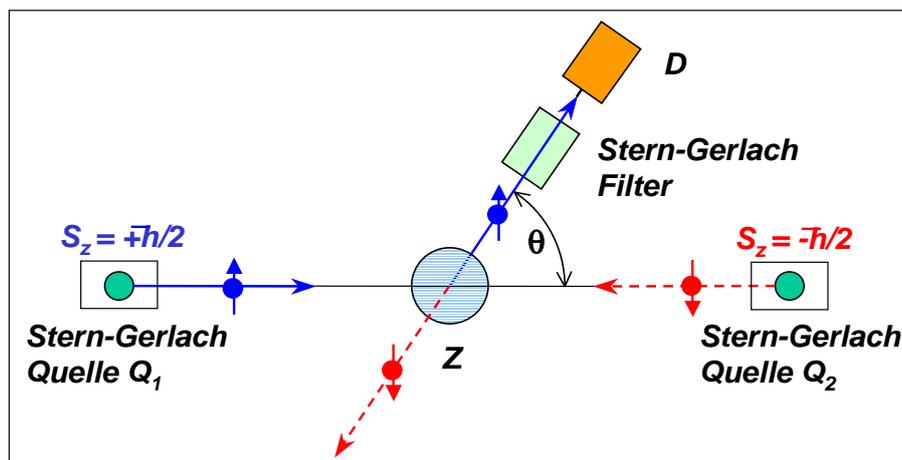


Abbildung 1.9: Streuung zweier Teilchen mit orientiertem Spin $S_z = \pm\hbar/2$.

Schalten wir in diesem Beispiel den Stern-Gerlach-Filter auf $S_z = +\hbar/2$, so stammen die nachgewiesenen Elektronen aus Quelle Q_1 und die Streuung erfolgte um den Winkel θ . Schalten man den Stern-Gerlach-Filter dagegen auf $S_z = -\hbar/2$, so war der Streuwinkel $\pi - \theta$. Sind nun aber die beiden Quantenteilchen ununterscheidbar, was der Fall ist, wenn Teilchen 1 und 2 die gleiche Spinrichtung haben, so kann der Detektor nicht mehr zwischen den beiden Fällen I und II in Abb. 1.8 unterscheiden. Dasselbe gilt natürlich auch, wenn wir gar keine Stern-Gerlach-Apparatur verwenden würden, wenn also Q_1 und Q_2

unpolarisierte Strahlung aussenden.

Die Möglichkeit 2 zur Unterscheidung der beiden Streuparameter ist für Quantenteilchen aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation generell nicht gegeben.

Insgesamt finden wir also, dass für identische Quantenteilchen, d.h. für Teilchen, die in all ihren Quantenzahlen übereinstimmen, durch eine physikalische Messung nicht unterschieden werden kann, ob die Streuung um θ oder $\pi - \theta$ erfolgt ist.

Streuprozesse kennzeichnet man gewöhnlich durch eine Streuamplitude $f(\theta)$. Dabei gilt, dass die Wahrscheinlichkeit der Streuung um einen Winkel θ proportional zum Absolutquadrat $|f(\theta)|^2$ der Streuamplitude ist. Liegt eine Unterscheidungsmöglichkeit zweier Teilchen vor, so ist die im Detektor registrierte Gesamtstreuintensität P durch die Summe der Absolutquadrate der einzelnen Streuamplituden gegeben, da die beiden Streuprozesse I und II völlig unkorreliert sind. Es gilt dann

Für unterscheidbare Teilchen ist die Gesamtstreuintensität durch die Summe der Einzelstreuintensitäten der möglichen Prozesse gegeben.

$$P_u = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 = P_1 + P_2 . \quad (1.4.1)$$

Für den Fall, dass die beiden Streuprozesse I und II nicht unterschieden werden können (identische Teilchen), ist die Streuung um θ und $\pi - \theta$ ein und derselbe Streuvorgang. Es liegt volle Korrelation der Streuvorgänge vor. Dies bedeutet, dass die beiden entsprechenden Streuamplituden $f(\theta)$ und $f(\pi - \theta)$ erst addiert oder subtrahiert werden müssen, bevor zur Berechnung der Gesamtstreuintensität das Betragsquadrat der Gesamtstreuamplitude gebildet werden darf (auf das Vorzeichen gehen wir im nächsten Abschnitt ein). Es gilt dann

Bei der Streuung ununterscheidbarer Teilchen ist in der Gesamtstreuintensität zusätzlich ein Interferenzterm I zwischen den verschiedenen Einzelstreuprozessen zu berücksichtigen.

$$\begin{aligned} P_i &= |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \pm I \\ &= P_1 + P_2 \pm I . \end{aligned} \quad (1.4.2)$$

Um den Unterschied zwischen den Streuintensitäten im Fall von Streuung ununterscheidbarer und unterscheidbarer Teilchen deutlich zu machen, betrachten wir die Streuamplitude für $\theta = \pi/2$. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \text{identische Teilchen:} & \quad P_i = 4|f(\pi/2)|^2 & \quad \text{für positives Vorzeichen} \\ \text{identische Teilchen:} & \quad P_i = 0 & \quad \text{für negatives Vorzeichen} \\ \text{unterscheidbare Teilchen:} & \quad P_u = 2|f(\pi/2)|^2 & \quad . \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

Rutherford- und Mott-Streuung

Für elastische Streuung am Coulomb-Potenzial erhält man nach **Rutherford** die Streuamplitude (siehe Abschnitt 2.4.1)

$$f(\theta) \propto \frac{1}{\sin^2(\theta/2)} . \quad (1.4.4)$$

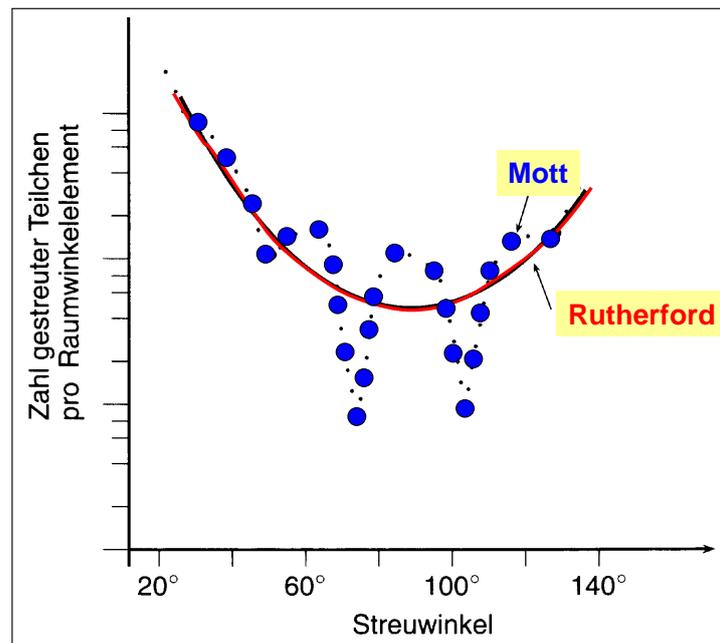


Abbildung 1.10: Winkelabhängigkeit der Streuwahrscheinlichkeit im Schwerpunktsystem für die Streuung von ^{12}C an ^{12}C Kernen. Die Messpunkte zeigen deutlich das Interferenzverhalten.

Sind die Teilchen unterscheidbar, so folgt

$$P_R(\theta) \propto \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)}. \quad (1.4.5)$$

Dies ist eine glatte Winkelabhängigkeit der Streuwahrscheinlichkeit symmetrisch zu $\theta = \pi/2$ (falls die beiden Teilchen die gleiche Masse haben).

Sind die Teilchen jedoch ununterscheidbar, so tritt ein zusätzlicher Interferenzterm auf und wir erhalten

$$P_M(\theta) \propto P_R(\theta) \pm I(\theta)f(\theta)f(\pi - \theta). \quad (1.4.6)$$

Man spricht von *Mott-Streuung*. Auf die Berechnung von $I(\theta)$ wollen wir hier nicht eingehen. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, sind die Spineigenschaften der beteiligten Teilchen entscheidend. Generell beobachtet man, dass die Streuintensität oszillatorisches Verhalten als Funktion des Streuwinkels besitzt, wie dies für Interferenzterme typisch ist (siehe hierzu Abb. 1.10).

1.5 Fermionen und Bosonen

1.5.1 Der Spin von Quantenteilchen

Quantenteilchen können neben dem Bahndrehimpuls eine weitere dreimpulsartige Eigenschaft, den Spin \mathbf{S} besitzen. Der Spin wird oft als ein Eigendrehimpuls der Teilchens dargestellt. Dies ist zwar hilfreich für die Anschauung, aber nicht korrekt. So besitzen z.B. die Fundamentarteilchen (Leptonen, Quarks) keine räumliche Ausdehnung (echte Massepunkte), aber dennoch einen Spin. Für ein punktförmiges Teilchen macht aber ein Eigendrehimpuls keinen Sinn. Wir geben deshalb folgende Definition für den Spin eines Quantenteilchens:

Der Spin ist eine Quanteneigenschaft, die an der Drehimpulserhaltung teilnimmt und sich wie ein Drehimpuls transformiert, aber kein klassisches Analogon besitzt.

Der Spin ist im Schrödinger-Formalismus nicht enthalten, er erscheint jedoch zwanglos aus der Anwendung der Dirac-Gleichung. Der Spin ist also eine an die Lorentz-Invarianz gekoppelte Quanteneigenschaft. Gemäß den Bedingungen für quantenmechanische Drehimpulse (siehe hierzu Physik III und Abschnitt 3.3.4, eine ausführlichere Diskussion des Spins erfolgt später in Abschnitt 3.4) finden wir für den Betrag des Spinvektors

$$|\mathbf{S}| = S = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad (1.5.1)$$

und seine z-Komponente

Enrico Fermi (1901 - 1954), Nobelpreis für Physik 1938:

Enrico Fermi wurde am 29. September 1901 in Rom geboren. Er ist bekannt für seine Beiträge zur Kernphysik und Entwicklung der Quantenmechanik.

Fermi studierte an der Universität Pisa, wo er 1922 graduierte. Er wurde anschließend für 2 Jahre Dozent an der Universität von Florenz und dann Professor für theoretische Physik in Rom. Im Jahr 1934 begann Fermi an der Universität von Rom Experimente, in denen er eine Reihe von Elementen mit Neutronen beschoss. Er entdeckte, dass langsame Neutronen besonders effektiv bei der Erzeugung radioaktiver Elemente sind. Da er nicht realisierte, dass er Atome gespalten hat, verkündete Fermi die Erzeugung von Elementen jenseits des Urans. Fermi erhielt 1938 für seine Arbeiten zu nuklearen Prozessen den Nobelpreis für Physik. Ebenfalls im Jahr 1938 führten Lise Meitner und Otto Frisch ähnliche Experimente durch, bei denen sie Uran spalteten. Sie bezeichneten diesen Prozess als Kernspaltung.

1938 verließ Fermi Italien. Der offizielle Grund war, dass er um die Sicherheit seiner hebräischen Frau fürchtete. Die inoffizielle Geschichte war, dass er Geld für die Fortsetzung seiner kernphysikalischen Forschungsarbeiten brauchte. Fermi war einer der vielen Intellektuellen, die nach dem Aufkommen des Nationalsozialismus in Deutschland Europa verließen. Fermi ließ sich 1939 in den USA nieder und wurde Professor an der Columbia University in New York.

Fermi setzte seine Experimente zur Kernspaltung dort fort. 1940 bestätigte Fermi's Arbeitsgruppe, dass die Absorption eines Neutrons durch einen Uran-Kern diesen spalten kann, wobei mehrere Neutronen und eine Menge Energie freigesetzt werden. Damit war eine potentielle nukleare Kettenreaktion in den Bereich der Möglichen gerückt.

1942 wurde Fermi mit dem Manhattan Project an der University of Chicago betraut. Seine Arbeitsgruppe erzeugte die erste nukleare Kettenreaktion. Das Projekt wurde 1944 nach New Mexico verlegt und am 16. Juli 1945 wurde die erste Atombombe auf der Alamogordo Air Base gezündet.

Nach dem 2. Weltkrieg setzte Fermi seinen Pionearbeiten zur Kern und Teilchenphysik fort. Er starb am 28. November 1954 an Krebs.



Satyendranath Bose (1894 - 1974):

Satyendranath Bose wurde am 1. Januar 1894 in Kalkutta, Indien, geboren. Er studierte an der Universität Kalkutta, wo er von 1916 an auch lehrte. Von 1921 bis 1945 war er Dozent an der University of Dacca und kehrte dann nach Kalkutta zurück (1945-56). Er leistete wichtige Beiträge zur Quantentheorie, insbesondere zum Planck'schen Strahlungsgesetz.

Bose schickte seinen wohlbekannten Artikel "Planck's Law and the Hypothesis of Light Quanta" im Jahr 1924 direkt zu Einstein. Er schrieb in dem Begleitbrief: *Respected Sir, I have ventured to send you the accompanying article for your perusal and opinion. You will see that I have tried to deduce the coefficient .. in Planck's law independent of classical electrodynamics.* Die Arbeit wurde von Einstein mit Enthusiasmus aufgenommen, da er sofort erkannte, dass Bose einen wesentlichen Einspruch gegen seine Quantenhypothese des Lichtes aus dem Weg geräumt hatte. Der Artikel wurde durch Einstein ins Deutsche übersetzt und bei der Zeitschrift für Physik eingereicht. Einstein erweiterte Bose's Betrachtung auf Materieteilchen und publizierte mehrere Artikel über diese Erweiterung.

Bose publizierte auch mehrere Artikel zur statistischen Mechanik die zur Bose-Einstein Statistik führten. Dirac prägte daraufhin den Ausdruck "Boson" für Teilchen, die dieser Statistik gehorchen.

Bose starb am 4. Februar 1974 in Kalkutta.



$$S_z = m_s \hbar \quad \text{mit } m_s = -s, -(s-1), \dots, +(s-1), s . \quad (1.5.2)$$

Hierbei ist m_s die Orientierungsquantenzahl. Sind $|\mathbf{S}|$ und S_z festgelegt, so bleiben S_x und S_y unbestimmt.

Der Stern-Gerlach-Versuch hat gezeigt, dass das Elektron $s = 1/2$ und somit $m_s = -1/2, +1/2$ besitzt. Da es nur zwei Einstellmöglichkeiten für die z -Komponente gibt, spricht man oft lax von Spin \uparrow ("auf") und Spin \downarrow ("ab") Elektronen, obwohl ja der Spinvektor niemals die Länge $\hbar/2$ haben kann und somit niemals parallel oder antiparallel zur z -Achse steht. Die Fundamentalbausteine der Materie, Leptonen und Quarks, besitzen alle halbzahligen Spin. In zusammengesetzten Teilchen kann durch antiparallele Kopplung der Spins der Gesamtspin Null entstehen. Ein Beispiel hierfür ist das π -Meson, das aus einem Quark-Antiquark-Paar besteht (z.B. $\pi^- = u\bar{d}$).

Im Gegensatz dazu besitzen Photonen eine ganzzahlige Spinquantenzahl ($s = 1$). Es gibt also sowohl Quantenteilchen mit *halbzahligem* und solche mit *ganzzahligem* Spin. Wir werden sehen, dass der Spin einen entscheidenden Einfluss auf die Streuintensität für identische Teilchen hat.

1.5.2 Quantenteilchen mit ganz- und halbzahligem Spin

Wir haben gesehen, dass die Streuintensität für identische Teilchen durch (vergleiche (1.4.2))

$$P_i(\theta) = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad (1.5.3)$$

gegeben ist. Es zeigt sich, dass beide Vorzeichen vorkommen und dass das Vorzeichen davon abhängt, ob die identischen Teilchen halbzahligen oder ganzzahligen Spin besitzen. Es gilt:

$$\text{Teilchen mit ganzzahligem Spin: } P_i(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (1.5.4)$$

$$\text{Teilchen mit halbzahligem Spin: } P_i(\theta) = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 . \quad (1.5.5)$$

Bei Teilchen mit ganzzahligem Spin sprechen wir von Bosonen,^a bei Teilchen mit halbzahligem Spin von Fermionen.^b

^aBenannt nach dem indischen Physiker Satyendranath Bose.

^bBenannt nach dem italienischen Physiker Enrico Fermi.

Die Berechnung des Interferenzterms bei der Mott-Streuung hängt also davon ab, ob wir es mit Bosonen oder Fermionen zu tun haben. Als weitere Schwierigkeit kommt hinzu, dass wir unterscheiden müssen, ob wir es mit polarisierten Teilchenstrahlen zu tun haben oder nicht.²⁵ Der in Abb. 1.10 gezeigte Fall ist relativ einfach, da es sich bei den verwendeten ¹²C-Kernen um Bosonen mit $s = 0$ handelt.

²⁵Für eine ausführlichere Darstellung dieses Problems siehe **R. P. Feynman**, *Vorlesungen über Physik*, 4. Auflage, Band III, Kapitel 3 und 4, Oldenbourg Verlag, München (1996).

1.6 Austauschsymmetrie und Pauli-Verbot

1.6.1 Die Austauschsymmetrie

Der fundamentale Unterschied zwischen Fermionen und Bosonen macht sich in einer weiteren wichtigen Größe bemerkbar, der so genannten *Austauschsymmetrie* der Wellenfunktion. Diese wollen wir im Folgenden kurz erläutern.

Gegeben sei ein System von zwei identischen Quantenteilchen 1 und 2 mit den Koordinaten \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 . Die Zustandsfunktion, die dieses System beschreibt, sei $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Für den Fall, dass zwischen den Teilchen keine Wechselwirkung besteht, kann die Gesamtwellenfunktion als Produkt der beiden Teilchen beschrieben werden:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_a(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi_b(\mathbf{r}_2) . \quad (1.6.1)$$

Dabei definieren a und b die Quantenzustände der beiden Teilchen. Wir vertauschen nun die Teilchen 1 und 2, das heißt, wir bilden $\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Da es sich um identische Teilchen handelt, darf sich an der Zustandsfunktion nichts ändern, was durch den Ansatz (1.6.1) auch gewährleistet wird. Eine physikalische Bedeutung kommt aber nur dem Absolutquadrat der Zustandsfunktion bei, also muss $|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2$ sein. Hierfür gibt es aber zwei Möglichkeiten:

$$\text{symmetrischer Austausch: } \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = +\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (1.6.2)$$

$$\text{antisymmetrischer Austausch: } \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) . \quad (1.6.3)$$

Ob symmetrischer oder antisymmetrischer Austausch vorliegt, hängt vom Spin des Quantenteilchens ab. Er ist symmetrisch für ganzzahligen Spin (Bosonen) und antisymmetrisch für halbzahligen Spin (Fermionen).

Der Produktansatz (1.6.1) liefert nicht das gewünschte Austauschverhalten. Es ist vielmehr erforderlich, die Linearkombination

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C [\Psi_a(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \Psi_a(\mathbf{r}_2) \cdot \Psi_b(\mathbf{r}_1)] \quad (1.6.4)$$

zu bilden, um die Gesamtwellenfunktion zu erhalten. C ist hierbei ein Normierungsfaktor. Für Bosonen gilt das Plus-, für Fermionen das Minuszeichen.

Insgesamt sehen wir, dass mit dem Spin ein grundsätzlich unterschiedliches Verhalten von Quantenteilchen verbunden ist. Im nächsten Abschnitt werden wir noch einen weiteren Unterschied im Verhalten von Bosonen und Fermionen kennenlernen, der aus der Austauschsymmetrie folgt. Wir haben bereits erwähnt, dass im Schrödinger-Formalismus der Spin eines Teilchens gar nicht enthalten ist. Um den Spin eines Teilchens zu berücksichtigen, müssen wir die Zustandsfunktion eines Teilchens als das Produkt einer Ortsfunktion $\Psi(\mathbf{r})$, die aus der Schrödinger-Gleichung folgt, und einer Spinfunktion τ , die den Spinzustand charakterisiert, schreiben:

$$\Phi(\mathbf{r}, \sigma) = \Psi(\mathbf{r}) \cdot \tau(m_s) . \quad (1.6.5)$$

Für das Elektron kann die Spinfunktion τ nur zwei Eigenwerte $\sigma_{\uparrow} = +\hbar/2$ und $\sigma_{\downarrow} = -\hbar/2$ annehmen (siehe hierzu Abschnitt 3.4).

Entscheidend ist nun, dass die Gesamtzustandsfunktion $\Phi(1, 2) = \Psi(1, 2)\tau(1, 2)$ das richtige Austauschverhalten zeigt. Hierbei charakterisieren die beiden Zahlen die beiden Teilchen in ihren Zuständen. Es kommt also auf die Austauschsymmetrie von Φ an, die den Spin mit einschließt, und nicht auf diejenige von Ψ , die nur den Ort enthält. Für Bosonen und Fermionen gilt:

$$\text{symmetrischer Austausch: } \Phi(1, 2) = +\Phi(2, 1) \quad \text{für Bosonen} \quad (1.6.6)$$

$$\text{antisymmetrischer Austausch: } \Phi(1, 2) = -\Phi(2, 1) \quad \text{für Fermionen.} \quad (1.6.7)$$

Wichtig ist, dass für ein System aus gleichartigen Mikroobjekten die Zustandsfunktionen entweder alle symmetrisch oder alle antisymmetrisch sein müssen. Wäre das nicht der Fall, dann könnten durch die Überlagerung symmetrischer und antisymmetrischer Zustände solche entstehen, die weder das eine noch das andere Symmetrieverhalten zeigen und damit dem Prinzip der Ununterscheidbarkeit widersprechen würden. Welche der beiden Möglichkeiten vorliegt, hängt von der Art der Teilchen ab. Aus der relativistischen Quantenmechanik lässt sich begründen, dass dafür der Spin maßgebend ist. Teilchen mit halbzahligen Spin (*Fermionen*) sind antisymmetrische Zustandsfunktionen, solchen mit ganzzahligen Spin einschließlich dem Wert Null (*Bosonen*) sind symmetrische Zustandsfunktionen zuzuordnen.

Zur Illustration betrachten wir noch ein System aus drei Fermionen 1, 2 und 3 in den Zuständen i, k und l . Die zugehörigen Zustandsfunktionen seien $\Phi_i(1)$, $\Phi_k(2)$ und $\Phi_l(3)$. Wir müssen jetzt die Zustandsfunktion $\Phi(1, 2, 3)$ des Gesamtsystems finden. Es liegt zunächst nahe $\Phi(1, 2, 3) = \Phi_i(1) \cdot \Phi_k(2) \cdot \Phi_l(3)$ zu setzen. Wir müssen aber noch berücksichtigen, dass jede Vertauschung zweier beliebiger Teilchen ebenso wie $\Phi(1, 2, 3)$ eine Lösung der dem Problem entsprechenden Eigenwertgleichung sein muss. Es existieren also wegen der sechs möglichen Permutationen sechs spezielle Lösungen Φ , die bezüglich der Vertauschung weder symmetrisch noch antisymmetrisch sind. Die allgemeine Lösung Φ_a ist nun eine Linearkombination der speziellen Lösungen, die aber (für Fermionen) der Antisymmetriebedingung genügen müssen. Das ist erfüllt, wenn sich bei jeder Permutation das Vorzeichen umkehrt:

$$\begin{aligned} \Phi_a(1, 2, 3) = & \Phi_i(1) \cdot \Phi_k(2) \cdot \Phi_l(3) - \Phi_i(1) \cdot \Phi_k(3) \cdot \Phi_l(2) + \Phi_i(2) \cdot \Phi_k(3) \cdot \Phi_l(1) - \\ & \Phi_i(3) \cdot \Phi_k(2) \cdot \Phi_l(1) + \Phi_i(3) \cdot \Phi_k(1) \cdot \Phi_l(2) - \Phi_i(2) \cdot \Phi_k(1) \cdot \Phi_l(3) . \end{aligned} \quad (1.6.8)$$

Diese Gleichung lässt sich auch als Determinante schreiben:

$$\Phi_a(1, 2, 3) = \begin{vmatrix} \Phi_i(1) & \Phi_i(2) & \Phi_i(3) \\ \Phi_k(1) & \Phi_k(2) & \Phi_k(3) \\ \Phi_l(1) & \Phi_l(2) & \Phi_l(3) \end{vmatrix} . \quad (1.6.9)$$

Wolfgang Pauli (1900 - 1958), Nobelpreis für Physik 1945:

Wolfgang Pauli wurde am 25. April 1900 in Wien geboren.

Grundschule und Gymnasium besuchte er in seiner Geburtsstadt. Nach bestandener Matura zog er nach München und schrieb sich an der dortigen Ludwig-Maximilian-Universität ein. Hier hörte er Physik bei Wilhelm Wien und Arnold Sommerfeld. Sommerfeld übertrug Pauli die zusammenfassende Darstellung der Relativitätstheorie für die Enzyklopädie der Mathematischen Wissenschaften, welche er als Student des 5. Semesters abschloss. Noch 1921 erschien es als eigenständiges Buch und wurde ein Klassiker. Ebenfalls 1921 wurde er promoviert und ging für ein Semester als Assistent zu Max Born nach Göttingen. Ab 1922 war er dann als Assistent bei Wilhelm Lenz in Hamburg tätig. Hier lieferte er 1924 das „Ausschlussprinzip“ (heute als Pauli-Prinzip bekannt) und damit die Erklärung für den Schalenaufbau der Elektronen im Periodischen System der Elemente. 1945 wurde ihm hierfür der Nobelpreis verliehen.

Die 1926 von Pauli zur Erklärung des Paramagnetismus eingeführten Spin-Matrizen bildeten den Ausgangspunkt für die 1928 von Dirac aufgestellte relativistische Wellengleichung des Elektrons. 1927 zeigte Pauli auf, wie der Elektronenspin, der bis dahin nicht unmittelbar in die Quantentheorie einbezogen war, durch Erweiterung der Schrödinger-Gleichung berücksichtigt werden konnte. 1928 erhielt Wolfgang Pauli einen Ruf an die ETH Zürich. Bei der Suche nach einer Erklärung der Kernbindungskräfte postulierte er bereits 1930 ein neutrales (später Neutrino genanntes) Teilchen, dessen Existenz erst 1956 experimentell nachgewiesen werden konnte. Sein Aufenthalt in Zürich wurde durch Professuren am Institute for Advanced Study in Princeton in den Jahren 1935/36 und 1940 bis 1946 unterbrochen. Hier wurde er 1946 amerikanischer Staatsbürger kehrte jedoch noch im gleichen Jahr endgültig nach Zürich zurück, wo er 1949 zusätzlich die Schweizer Staatsbürgerschaft annahm. Bis zu seinem Tode gehört er der Eidgenössischen Technischen Hochschule an.

Wolfgang Pauli verstarb am 15. Dezember 1958 in Zürich.



Für ein System aus N Fermionen erhält man statt einer Determinante dritter eine solche N -ter Ordnung. Die Determinante ändert bei Vertauschen von zwei Spalten oder zwei Zeilen ihr Vorzeichen. Auf die Spalten der Slater-Determinante angewandt garantiert diese Eigenschaft die Antisymmetrie der Wellenfunktion bei Teilchenpermutation. Des weiteren ist die Determinante Null, falls zwei Zeilen oder Spalten identisch sind. Aus dieser Determinantendarstellung ist ersichtlich, dass die Zustandsfunktion Φ_a für das Gesamtsystem verschwindet, wenn zwei Fermionen die gleiche Zustandsfunktion besitzen.

1.6.2 Das Pauli-Verbot

Bereits aus (1.6.4) erkennt man leicht, dass aus dem antisymmetrischen Austauschverhalten für zwei Fermionen im gleichen Quantenzustand $a = b$ wir $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 0$ erhalten, das heißt, die Wahrscheinlichkeit dafür, zwei Fermionen im gleichen Quantenzustand ($a = b$) am gleichen Ort ($\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$) zu finden, ist gleich Null. Für Bosonen gilt dagegen $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 2C\Psi_a^2$.

Pauli hat diesen Sachverhalt unter Berücksichtigung des Spins allgemeiner formuliert:

Pauli-Verbot für Fermionen:

In einem abgeschlossenen System können keine zwei Fermionen existieren, die einen völlig identischen Satz von Quantenzahlen besitzen.

Das Pauli-Verbot gilt insbesondere für Elektronen, die mit $s = 1/2$ ja Fermionen sind, und beeinflusst somit entscheidend den Aufbau der Atome und die Physik von Festkörpern.²⁶ Für Bosonen gilt dieses

²⁶Pauli hat das Pauli-Verbot zunächst rein empirisch aus dem Aufbau der Atome abgeleitet. Die Verbindung zum antisymmetrischen Austauschverhalten konnte erst später gezeigt werden.

| | Fermionen | Bosonen |
|--------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| Spinquantenzahl | halbzahlig | ganzzahlig |
| Streu-Interferenz | $ f(\theta) - f(\pi - \theta) ^2$ | $ f(\theta) + f(\pi - \theta) ^2$ |
| Austauschsymmetrie | antisymmetrisch | symmetrisch |
| Pauli-Verbot | wirksam | nicht wirksam |

Tabelle 1.4: Eigenschaften von Fermionen und Bosonen.

Pauli-Verbot nicht. Mehrere Bosonen können in einem abgeschlossenen System identisch bezüglich aller ihrer Quantenzahlen sein.

1.7 Vertiefungsthema: Zur Axiomatik der Quantenmechanik

Wir haben in den vorangegangenen Abschnitten einen Formalismus entwickelt, mit dem wir die Eigenschaften von Quantenobjekten beschreiben können. Dabei sind wir so vorgegangen, dass die experimentell beobachteten Eigenschaften richtig wiedergegeben werden konnten. Diese Eigenschaften sind insbesondere (i) die Quantelung der Energie und anderer Observabler, (ii) die Wechselwirkung des Quantenobjekts mit der Messapparatur beim Messprozess und (iii) die prinzipielle Ununterscheidbarkeit gleichartiger Quantenobjekte. Wir haben also heuristisch einen Formalismus entwickelt, aus dem wir Ergebnisse ableiten konnten, die mit der experimentellen Erfahrung übereinstimmen. Für die Entwicklung einer fundierten theoretischen Beschreibung ist es aber unerlässlich, den Ausgangspunkt der Theorie axiomatisch zu formulieren.

Wir haben bereits gesehen, dass zur Entwicklung einer Quantentheorie ein erweiterter mathematischer Formalismus notwendig ist. Im Gegensatz zur klassischen Physik, wo die physikalischen Größen auf einfache Art der Messung zugänglich sind und ihr Wertevorrat dem Raum der reellen Zahlen entspricht, sind in der Quantenmechanik die ein System charakterisierenden Zustandsfunktionen Ψ und die verschiedenen Operatoren \hat{A} nicht unmittelbar durch eine Messung zu erfassen. Durch eine Messung erhält man nur die reellen Eigenwerte A_k der Operatoren (weshalb nur hermitesche Operatoren zulässig sind) und die Wahrscheinlichkeiten mit denen diese Eigenwerte auftreten. Die fundamentale Verschiedenheit des Messprozesses in der klassischen und der Quantenphysik wird dadurch ausgedrückt, dass zwischen verträglichen und nichtverträglichen Observablen unterschieden wird. Während man in der klassischen Physik annimmt, dass das Messobjekt einseitig auf die Messapparatur einwirkt, liegt in der Quantenphysik eine *wechselseitige Beeinflussung* von Messobjekt und Messapparatur vor.

Die Zustandsfunktionen Ψ werden in der Quantenmechanik im Allgemeinen als *Zustandsvektoren* $|\Psi\rangle$ eines *Hilbert-Raumes* aufgefasst.²⁷ Dies ist zulässig, da die Menge der Zustandsfunktionen alle Eigenschaften aufweist, durch die ein Hilbert-Raum definiert ist (Linearität, Normierung, Vollständigkeit, unbegrenzte Dimensionszahl). In der theoretischen Quantenmechanik hat sich die Betrachtung der quantenphysikalischen Zusammenhänge mit Hilfe von Zustandsvektoren im Hilbert-Raum durchgesetzt. Sie erfordert allerdings eine fundierte mathematische Basis, die wir hier nicht etablieren wollen. Wir werden deshalb im Folgenden bei der wellenmechanischen Form der Begriffsbildung bleiben.

Axiomensystem der Quantentheorie

Wir wollen auf der Basis der in den vorangegangenen Abschnitten dargelegten Gesetzmäßigkeiten ein *Axiomensystem der Quantentheorie* ableiten. Dieses hat für die Quantenmechanik dieselbe Bedeutung wie die *Newtonschen Axiome* für die klassische Mechanik, wie die *Hauptsätze der Thermodynamik* für die phänomenologische Thermodynamik, wie die *Maxwellschen Gleichungen* für die klassische Elektrodynamik, wie die *Gleichwertigkeit der Inertialsysteme* für die spezielle Relativitätstheorie oder wie das *Einsteinsche Äquivalenzprinzip* für die allgemeine Relativitätstheorie.

Das Axiomensystem der Quantentheorie besteht aus folgenden Axiomen:

1. Den Observablen A eines physikalischen Systems müssen lineare hermitesche Operatoren \hat{A} eines Hilbert-Raumes zugeordnet werden, die ein vollständiges System von Eigenfunktionen besitzen. Besteht zwischen zwei Observablen A und B ein durch eine stetige Funktion f gegebener Zusammenhang, $B = f(A)$, so besteht dieser Zusammenhang auch zwischen den Operatoren: $\hat{B} = f(\hat{A})$.

²⁷David Hilbert (1862 – 1943).

2. Die einem physikalischen System zugeordneten verallgemeinerten Orts- und Impulskordinaten genügen den Vertauschungsrelationen

$$\widehat{p}_i \widehat{q}_k - \widehat{q}_k \widehat{p}_i = \begin{cases} -i\hbar & \text{für } i = k \\ 0 & \text{für } i \neq k \end{cases} \quad (1.7.1)$$

$$\widehat{p}_i \widehat{p}_k - \widehat{p}_k \widehat{p}_i = 0 \quad (1.7.2)$$

$$\widehat{q}_i \widehat{q}_k - \widehat{q}_k \widehat{q}_i = 0 \quad (1.7.3)$$

3. Existiert in einem Quantensystem ein Hamilton-Operator \widehat{H} , so ist der zeitlichen Änderung dA/dt einer Observablen A der Operator

$$\frac{d\widehat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar}(\widehat{H}\widehat{A} - \widehat{A}\widehat{H}) + \frac{\partial \widehat{A}}{\partial t} \quad (1.7.4)$$

zuzuordnen.

4. Der Erwartungswert $\langle A \rangle$ einer Observablen A für ein System im Zustand Ψ ist durch

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \widehat{A} \Psi \, dV \quad (1.7.5)$$

gegeben.

Nach Axiom 1 muss in der Quantentheorie dem Ortsvektor \mathbf{q} der Ortsoperator $\widehat{\mathbf{q}}$, einer klassischen Feldgröße \mathbf{u} der Operator $\widehat{\mathbf{u}}$ zugeordnet werden. Die Quantisierung der klassischen Teilchenvorstellung führt deshalb zu dem gleichen Ergebnis wie die Quantisierung der klassischen Feldvorstellung. Diese Äquivalenz macht klar, dass in der Quantenmechanik das Problem des Welle-Teilchen-Dualismus nicht existent ist. Die Quantenmechanik berücksichtigt den Dualismus und kann entweder durch Quantisierung der klassischen Mechanik (dies wurde zuerst 1925 von Heisenberg gezeigt) oder durch die Quantisierung der klassischen Wellentheorie (dies wurde zuerst 1926 von Schrödinger gezeigt) erhalten werden.

Relativistische Erweiterungen

Die relativistische Erweiterung der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung gelang 1927 **Paul Andrien Maurice Dirac** (siehe hierzu auch Seite 130). Die von ihm entwickelte *Dirac-Gleichung* stellt eine relativistische Wellengleichung dar. Ein wichtiges Ergebnis der Diracschen Theorie war die zwanglose Erklärung der Existenz des Elektronenspins. Als weitere Folgerung ergaben sich aus dieser Theorie die Energiewerte

$$E = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2},$$

das heißt, sowohl positive als auch negative Werte. Bei einer nichtrelativistischen Betrachtung treten dagegen für freie Teilchen nur kontinuierliche Energiezustände mit Werten $E \geq m_0 c^2$ auf. Dirac nahm an,

dass die Zustände mit negativer Energie alle besetzt sind, so dass z.B. Elektronen mit einer positiven Energie aufgrund des Pauli-Verbots nicht in diese Zustände übergehen können. Haben wir ein Photon mit einer Energie größer $2m_0c^2$ zur Verfügung, so können wir ein Elektron aus dem Bereich negativer Energien in den Bereich positiver Energien bringen. Im Bereich negativer Energien bleibt dann ein positiv geladenes Loch zurück. Diese Leerstelle nennen wir *Positron*. Insgesamt haben wir mit dem energiereichen Photon ein *Elektron-Positron-Paar* erzeugt. Wir nennen diesen Prozess *Paarbildung*. Das Elektron-Positron-Paar ist allerdings nicht stabil, es zerstrahlt vielmehr nach sehr kurzer Zeit (ca. 10^{-8} s) unter Abgabe eines Photons. Wir sprechen von *Paarvernichtung*. Solche Prozesse werden tatsächlich beobachtet.

Die Dirac-Gleichung kann prinzipiell auf alle Objekte mit einer von Null verschiedenen Ruhemasse und einem halbzahligen Spin, also auf Fermionen angewendet werden.

Quantenelektrodynamik

In der Diracschen Theorie ist das Elektron gegenüber dem Positron ausgezeichnet. Die von **Feynman**, **Schwinger**, und **Tomonaga** entwickelte Quantenelektrodynamik (QED) beseitigt diesen Mangel durch eine völlig symmetrische Beschreibung durch Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen Elektron und Positron. Die QED ist eine streng relativistische Theorie.²⁸ Das die Wechselwirkung beschreibende Feld wird im Gegensatz zur Dirac-Gleichung nicht mehr durch Potenzialfelder beschrieben, sondern ebenfalls der Quantisierung unterworfen. Die Photonen werden zu Quanten des elektromagnetischen Feldes, Emissions- und Absorptionsprozesse werden durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren beschrieben. Die Ergebnisse der QED stehen in hervorragender Übereinstimmung mit dem Experiment. Durch die Wechselwirkung zwischen Elektron und Strahlungsfeld kann u.a. die Abweichung des magnetischen Moments des Elektrons von μ_B (bzw. die Abweichung des Spin-g-Faktors von 2) und die Lamb-Shift (siehe Abschnitt 4.4) erklärt werden.

Quantenfeldtheorie

Die QED erfasst nur die elektromagnetische Wechselwirkung der Quantenteilchen. Sie ist deshalb eine spezielle *Quantenfeldtheorie*. Mittlerweile wurden auch Quantenfeldtheorien für die der starken und der schwachen Wechselwirkung unterliegenden Quantenobjekte entwickelt. Während die Quantenmechanik heute als abgeschlossen gilt, trifft dies für die Quantenfeldtheorien nicht zu. Insbesondere sind die Theorien, die die starke und schwache Wechselwirkung der Teilchen erfassen, noch nicht vollständig entwickelt.

²⁸siehe z.B. R. P. Feynman, *Quantenelektrodynamik*, Oldenbourg Verlag (1997).

Zusammenfassung

Welle-Teilchen-Dualismus

- Das Verhalten von mikroskopischen Objekten kann nicht mit klassischen Teilchen oder Wellen alleine beschrieben werden. Mikroskopische Objekte zeigen sowohl Teilchen- als auch Wellencharakter.
- Komplementaritätsprinzip (Bohr 1927):

In einem Experiment können Teilchen- und Welleneigenschaften von mikroskopischen Objekten niemals gleichzeitig beobachtet werden. Teilchen und Welle schließen sich gegenseitig aus – sie sind *komplementär*.

Materiewellen und Wellenfunktionen

- Elektronen und andere massebehaftete Teilchen besitzen Wellencharakter, der experimentell durch Beugungs- und Interferenzeffekte nachgewiesen werden kann (z.B. Elektronenbeugung). Über die de Broglie Beziehungen

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

und

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

können Teilchen mit Impuls \mathbf{p} und Energie E eine Wellenlänge λ bzw. ein Wellenvektor \mathbf{k} und eine Frequenz ω zugeordnet werden.

- Materiewellen zeigen Dispersion, d.h. ihre Phasengeschwindigkeit v_{ph} hängt von der Frequenz ab:

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

- Teilchen können als Wellenpakete beschrieben werden. Die Teilchengeschwindigkeit v_{T} ist gleich der Gruppengeschwindigkeit v_{gr} des Wellenpakets. Es gilt $v_{\text{gr}} \cdot v_{\text{ph}} = c^2$.
- Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion:

Das Absolutquadrat $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ der Materiewellenfunktion gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Teilchen zur Zeit t in einem Volumenelement dV um den Ort \mathbf{r} zu finden.

- Heisenbergsche Unschärfe-Beziehung:

Ort und Impuls eines Teilchens können nicht gleichzeitig beliebig genau gemessen werden. Die Heisenbergsche Unschärfe-Beziehung

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$$

gibt eine untere Schranke für die Unschärfen des Orts und des Impulses bei gleichzeitiger Messung an.

Eine Unschärfe-Beziehung besteht auch für Energie und Zeit:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

Operatoren, Erwartungswerte, Eigenwerte, Eigenfunktionen

- Den Observablen A eines physikalischen Systems müssen in der Quantentheorie hermitesche lineare Operatoren \hat{A} zugeordnet werden, die auf die Zustandsfunktion Ψ wirken.
- Die möglichen Messwerte (Eigenwerte) A_k werden durch die Eigenwertgleichung

$$\hat{A}\Psi_k = A_k\Psi_k$$

bestimmt.

- Der Erwartungswert der Observablen A ist durch

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dV$$

gegeben.

- Die Eigenfunktionen Ψ_k bilden ein vollständiges orthonormiertes Funktionensystem:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_i^* \Psi_k dV = \delta_{ik}.$$

Die Zustandsfunktion Ψ ist nach den Eigenfunktionen entwickelbar:

$$\Psi = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \Psi_k.$$

Unterscheidbarkeit, Austauschsymmetrie, Pauli-Verbot

- Quantenteilchen mit einem identischen Satz von Quantenzahlen (identische Teilchen) sind prinzipiell nicht voneinander unterscheidbar.
- Klassische Teilchen sind unterscheidbar. Als klassische Teilchen können wir solche auffassen, bei denen die Unschärfe von Orts- und Impulskoordinaten vernachlässigbar klein gegen die Koordinatenwerte selbst sind.
- Bei Quantenteilchen muss zwischen Bosonen (ganzzahliger Spin) und Fermionen (halbzahliger Spin) unterschieden werden.
- Fermionen unterliegen im Gegensatz zu Bosonen dem Pauli-Verbot.