

Atome & Kerne

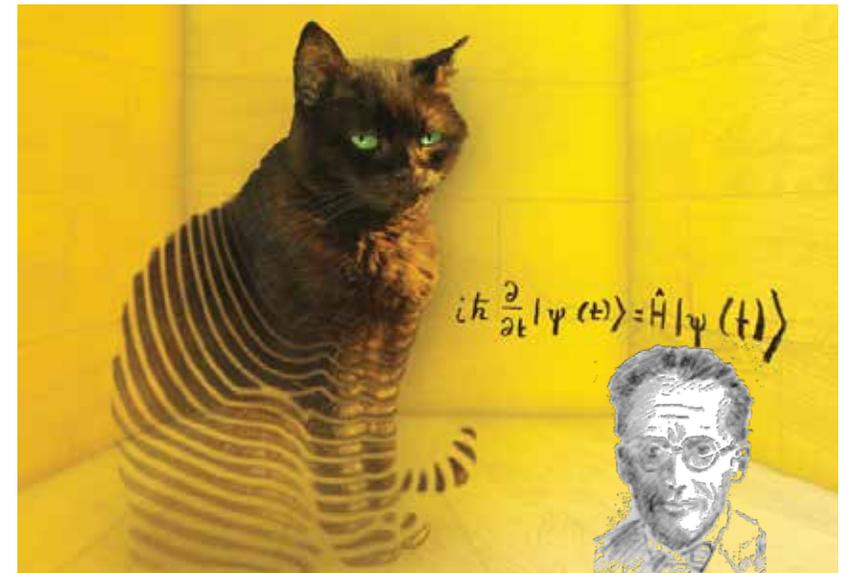
Sommersemester 2024
Vorlesung # 8, 14.05.24

Thomas Müller, Institut für Experimentelle Teilchenphysik, Fakultät für Physik

4.5 Exotische Atome & PET

5. Elemente der Quantenmechanik

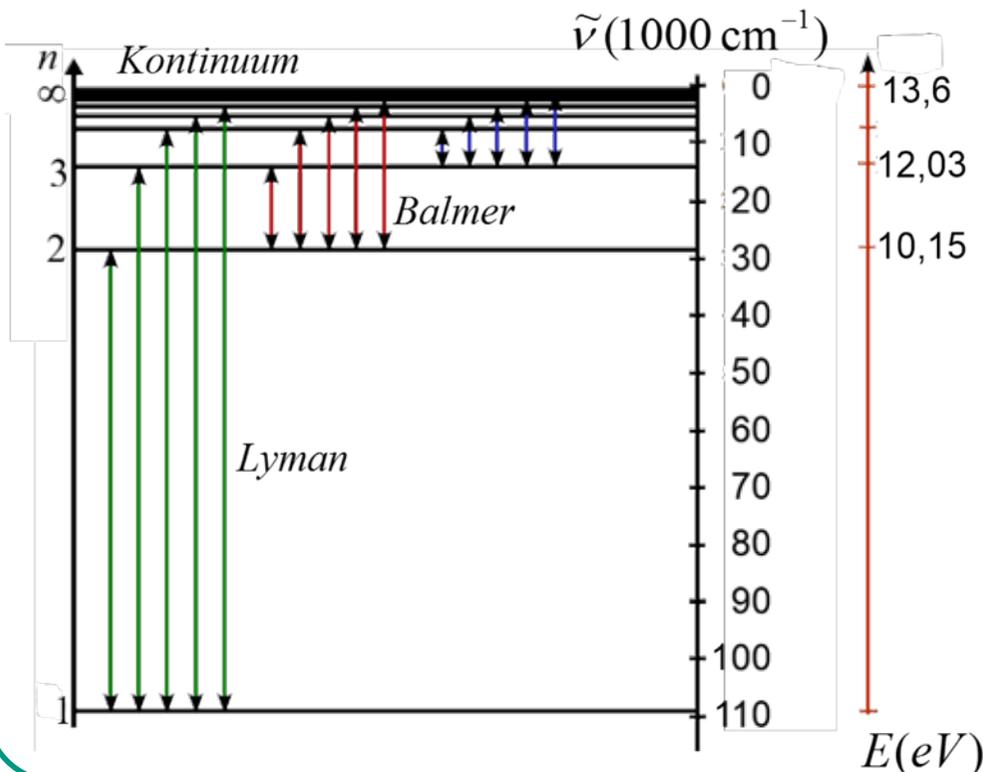
- 5.1 Schrödinger-Gleichung
- 5.2. Einfache quantenmechanische Systeme
- 5.3. Messungen in der Quantenmechanik



■ Niels Bohr: quasi-klassisches Modell für Atomorbitale

■ Termschema H-Atom:

$$\tilde{\nu} \sim R_H \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad n_1 = 1, 2, \dots; n_2 > n_1$$



■ Bohrsche Postulate:

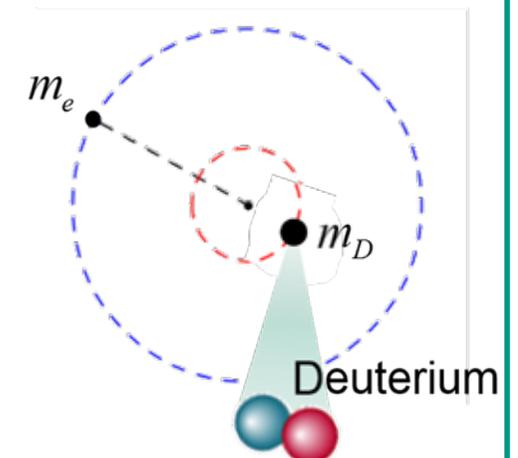
- diskrete Elektron-Orbitale
- stationärer Zustand: strahlungslos
- Korrespondenzprinzip für $n \rightarrow \infty$

■ Bohrsche Radien:

$$r_n = n^2 \cdot \underbrace{\hbar^2 \cdot \frac{4\pi \epsilon_0}{m_e \cdot e^2}}_{a_0} = n^2 \cdot 52,9 \text{ pm}$$

■ endliche Kernmasse: ($^2\text{H}=\text{D}$)

$$\mu_D = \frac{m_e \cdot m_D}{m_e + m_D}$$

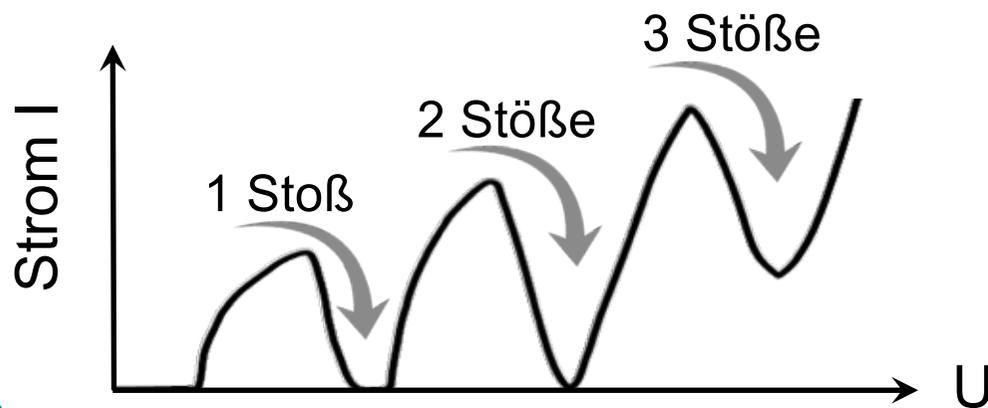
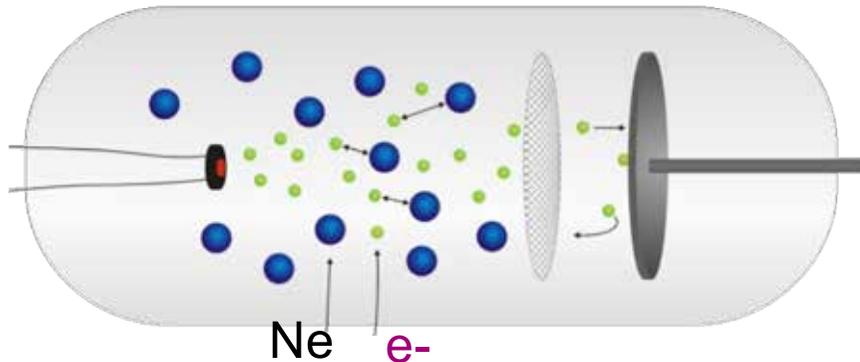


Wh: Streuprozesse & Bohr-Sommerfeld Theorie

■ Sommerfeld: Erweiterung des Bohrmodells durch Bahndrehimpuls

■ Elektronenstreuung:

- Anregung diskreter Niveaus
- Beispiel: Franck-Hertz Versuch

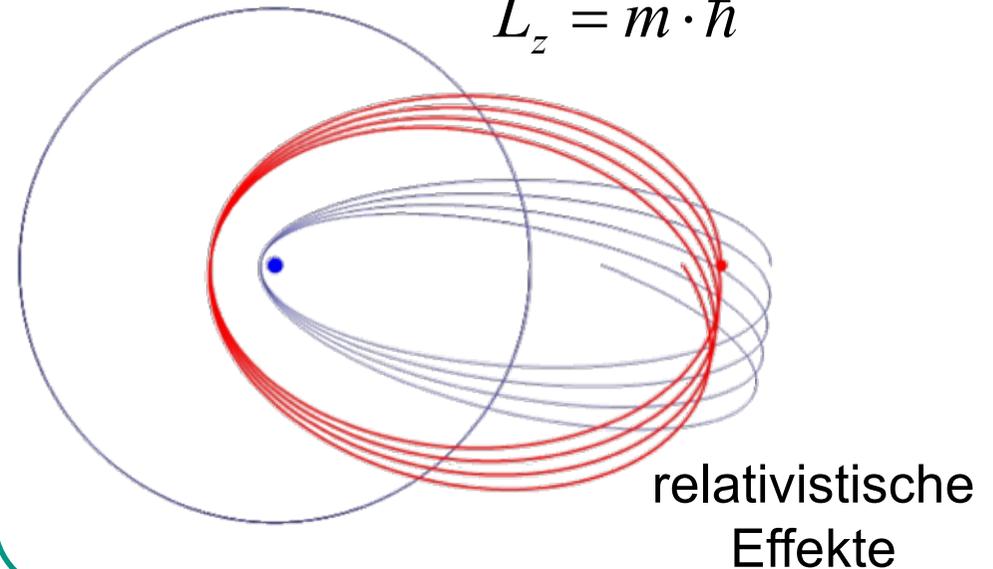


■ Bohr-Sommerfeld-Theorie:

- Quantenzahl: Bahndrehimpuls ℓ mit $\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$
- s,p,d,f,... Orbitale (elliptisch)

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{\ell \cdot (\ell + 1)} \cdot \hbar$$

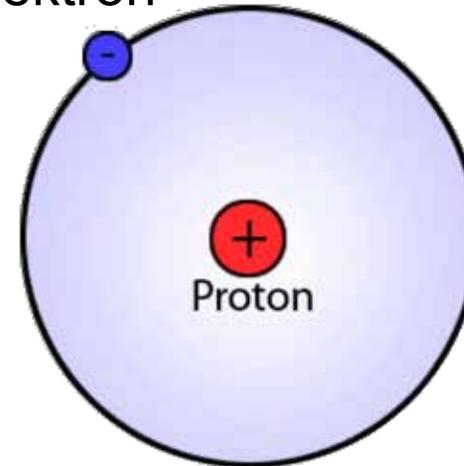
$$L_z = m \cdot \hbar$$



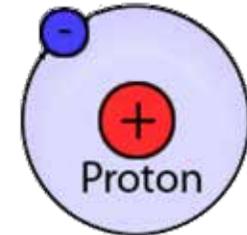
4.5 Exotische Atome

- **Myonische Atome** und **Positronium**:
exotische, instabile Atome zum Studium von elementaren Wechselwirkungen & Teilcheneigenschaften
- **Myonisches H-Atom**:
ersetze Elektron mit m_e durch schwereres Myon mit m_μ ($207 \times$ schwerer)
 - Erzeugung von Myonen (μ) in:
 - a) Teilchenbeschleuniger
 - b) kosmische Höhenstrahlung

Elektron



Myon



Myonische Atome

■ Myonische Atome

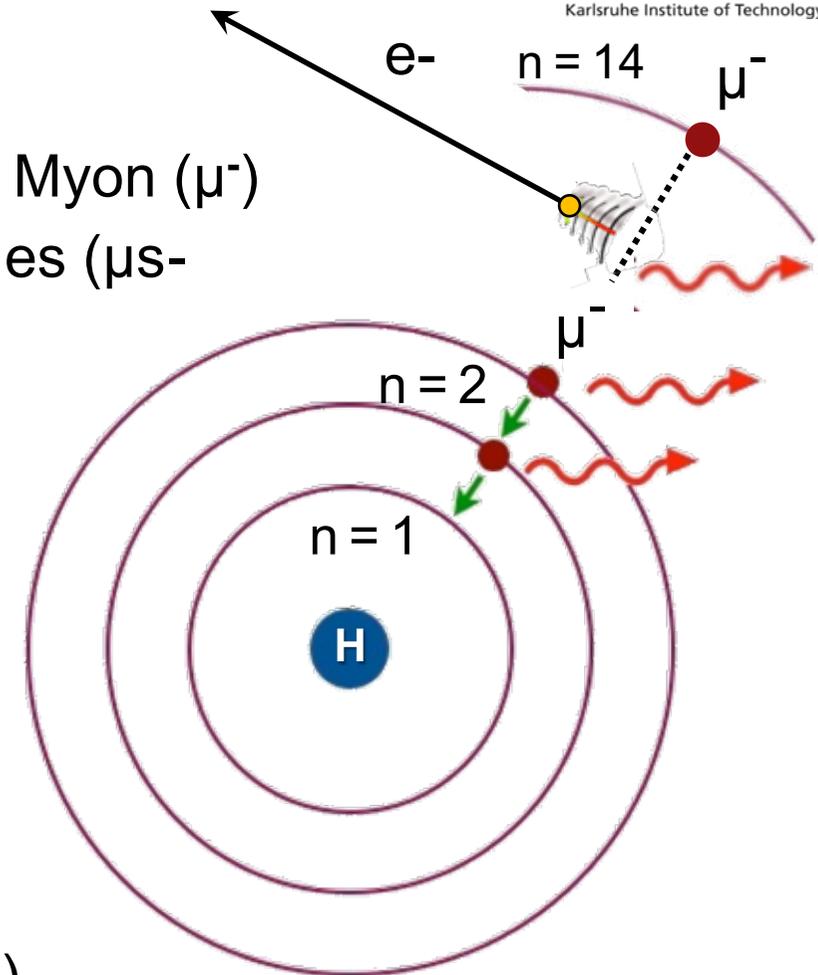
exotische, instabile Atome: ein negatives Myon (μ^-) kaskadiert auf innerste Schale, dort zerfällt es (μ s-Lebensdauer)

■ experimentelle Vorgehensweise:
 μ^- werden in ein H-Target geleitet

- μ^- wird in einem Zustand mit hohem n (≈ 14) und ℓ eingefangen

- μ^- kaskadiert auf das niedrigste Niveau 1s (Elektron wird dabei freigesetzt)

- bei den Übergängen werden Photonen emittiert, die Aufschluss geben über **Energie der Orbitale des Myons**



Myonische Atome

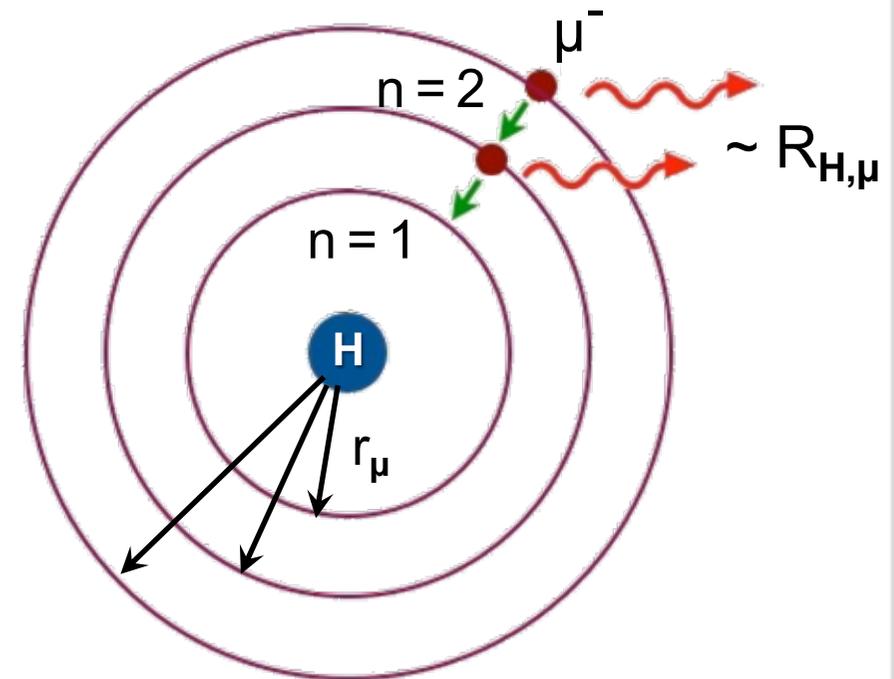
- **Bahnradien** r_μ des Myons im H-Atom sind $\sim 200 \times$ kleiner als beim Elektron:

$$r_\mu = n^2 \cdot \hbar^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0}{m_\mu \cdot e^2}$$

Myonmasse: 105,658 MeV

- **Übergangsenergien** des Myons ($\sim R_{H,\mu}$) im H-Atom sind $\sim 200 \times$ größer als beim Elektron:

$$R_{H,\mu} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot \frac{m_\mu}{2\hbar^2}$$



Myonmasse: 105,658 MeV

Myonischer Wasserstoff

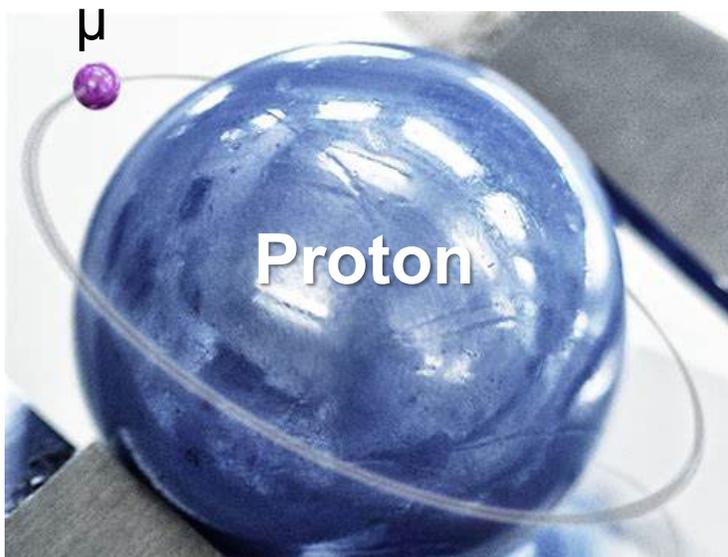
- Experimente mit myonischen H-Atomen am PSI (Schweiz)
 - Myonen-Orbitale verlaufen sehr nahe am zentralen Proton & geben Aufschluss über **mittleren Ladungsradius r_p**



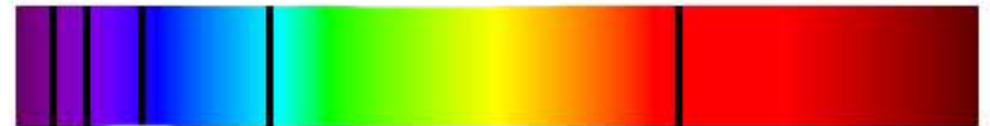
- myonische H-Atome: $r_p = 0,84184(67) \text{ fm}$
- klass. Spektroskopie : $r_p = 0,8768(69) \text{ fm}$



5 σ Diskrepanz



Absorptionsspektrum



Emissionsspektrum

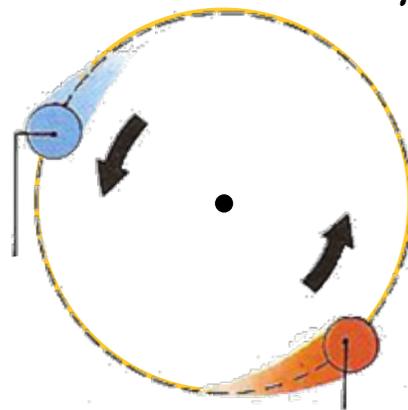


Positronium: Ortho- und Para-Zustand

- **Positronium:** gebundener, kurzlebiger Zustand eines Elektrons und eines Positrons (Anti-Teilchen des Elektrons)
 - ein H-Atom-ähnliches System mit charakteristischen Orbitalen

Positronium

$m_e = 511 \text{ keV}$
Elektron



$$\mu_{e^+e^-} = m_e / 2$$

Positron

$m_e = 511 \text{ keV}$



entdeckt von
Martin Deutsch

Radius: $2 \times$ H-Atom

$$r_{e^+e^-} \sim \frac{1}{\mu_{e^+e^-}}$$

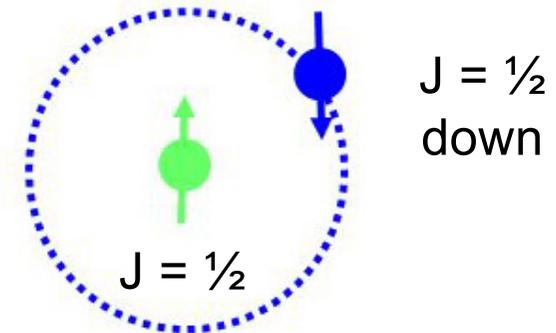
Energie: $\frac{1}{2} \times$ H-Atom

$$R_{H,e^+e^-} \sim \mu_{e^+e^-}$$

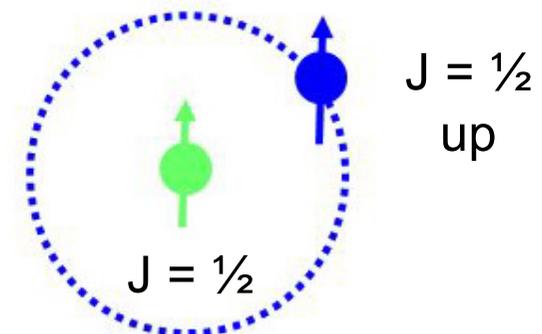
Positronium: Ortho- und Para-Zustand

- **Positronium-** kommt in 2 unterschiedlichen Zuständen vor:
Singulett-Zustand mit $J = 0$ Triplett-Zustand mit $J = 1$

- **Para-Positronium** ($\uparrow\downarrow$):
Gesamtdrehimpuls $J = 0$
 $\tau = 1,25 \cdot 10^{-10} \text{ s}$
„kurze“ Lebensdauer



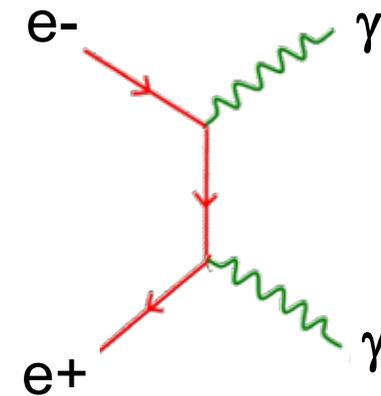
- **Ortho-Positronium** ($\uparrow\uparrow$):
Gesamtdrehimpuls $J = 1$
 $e^+ + e^- \rightarrow 3 \gamma$ (da γ einen Spin $S = 1$ hat)
 $\tau = 1,4 \cdot 10^{-7} \text{ s}$
„lange“ Lebensdauer



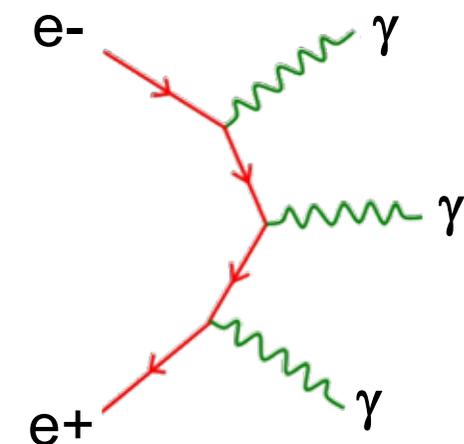
Positronium: Ortho- und Para-Zustand

- **Positronium-** Zustand annihiliert in 2 (3) Gammas $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma (+\gamma)$

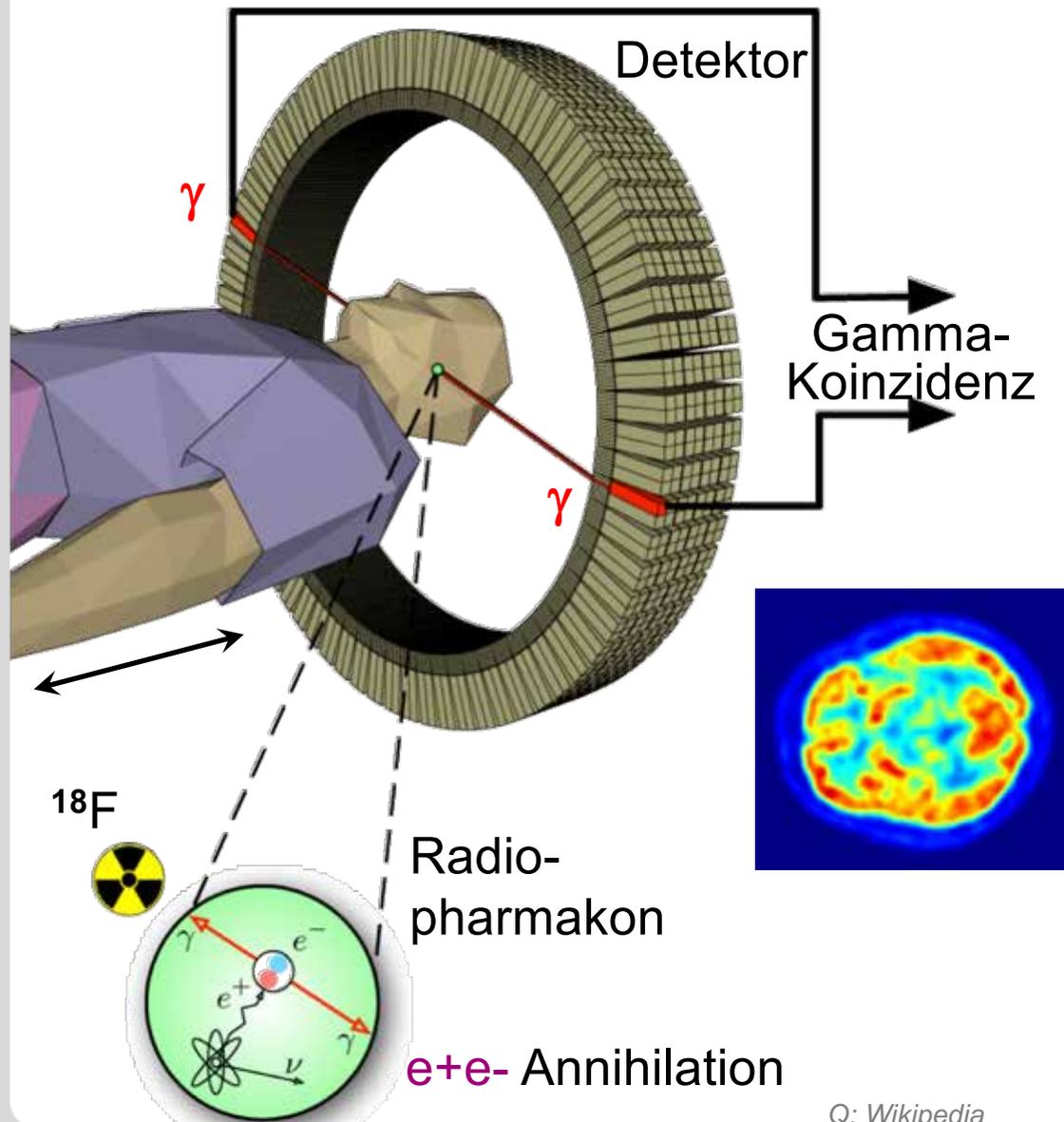
- **Para-Positronium** ($\uparrow\downarrow$):
Gesamtdrehimpuls $J = 0$
 $e^+ + e^- \rightarrow 2 \gamma$
da γ einen Spin $S = 1$ hat



- **Ortho-Positronium** ($\uparrow\uparrow$):
Gesamtdrehimpuls $J = 1$
 $e^+ + e^- \rightarrow 3 \gamma$
da γ einen Spin $S = 1$ hat



Positronium – Anwendung: PET



■ Positron-Emissions-Tomographie (PET):

- bildgebendes Verfahren in der Nuklearmedizin über den Nachweis der Gammas aus e^+e^- Annihilation
- Nachweis der Koinzidenz der beiden 511 keV Gammas (180°)
 - ⇒ räumliche Verteilung des Radiopharmakons (z.B. F-18)
 - ⇒ 3D Abbildung der Stoffwechselvorgänge (Onkologie)

Q: Wikipedia



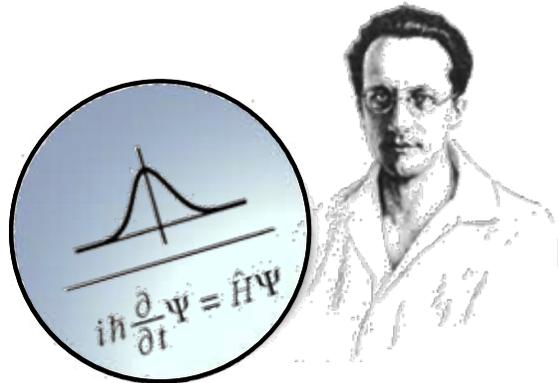
■ Positron-Emissions-Tomographie (PET):

- bildgebendes Verfahren in der Nuklearmedizin über den Nachweis der Gammas aus e^+e^- Annihilation
- Nachweis der Koinzidenz der beiden 511 keV Gammas (180°)

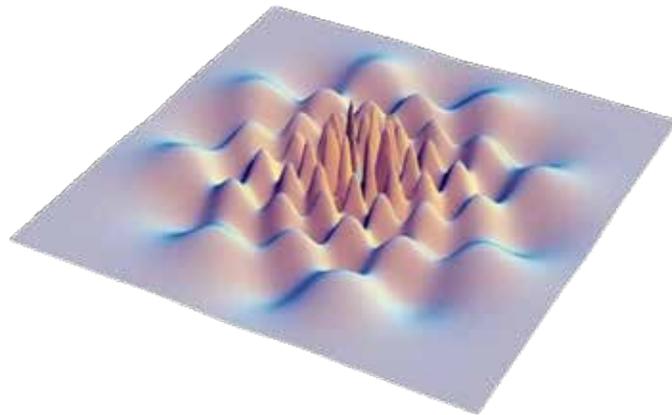
Science Advances Vol. 7, No. 42

<https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.abh4394>

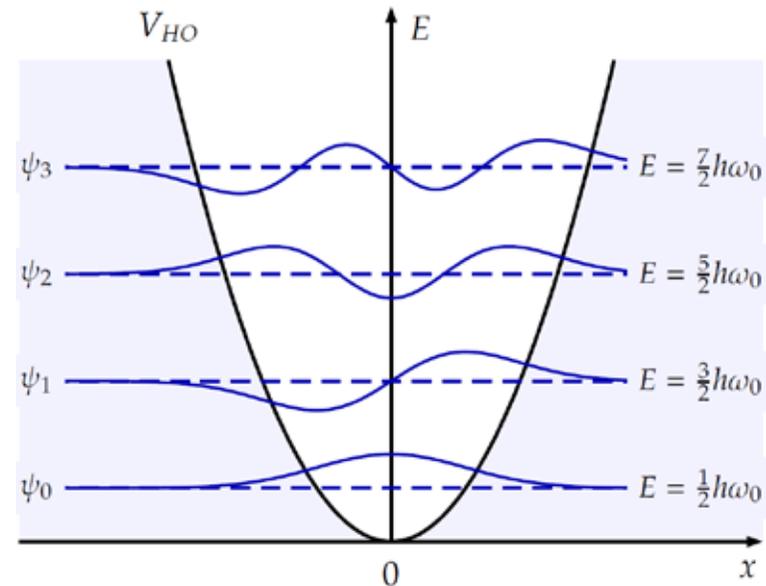
5. Elemente der Quantenmechanik



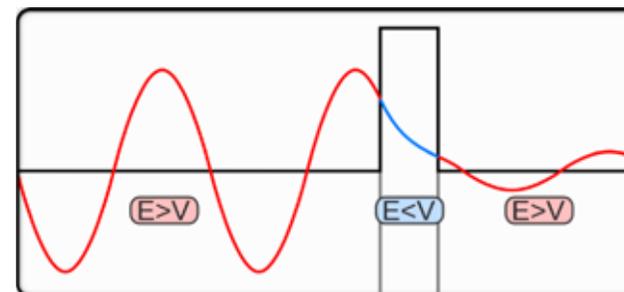
Schrödinger-
Gleichung



Messungen in der QM



einfache quantenmechanische
Systeme: harmon. Oszillator



Tunneleffekt

5.1 Schrödinger-Gleichung

- bisherige Atom-Modelle (Bohr-Sommerfeld) waren halb-klassisch, jetzt vollständig **quantenmechanische Beschreibung** von Prozessen

- Ausgangspunkt: **Wellenfunktion**, die die „Propagation von Materiewellen“ im Raum (Ortsvektor r) und der Zeit (t) beschreibt

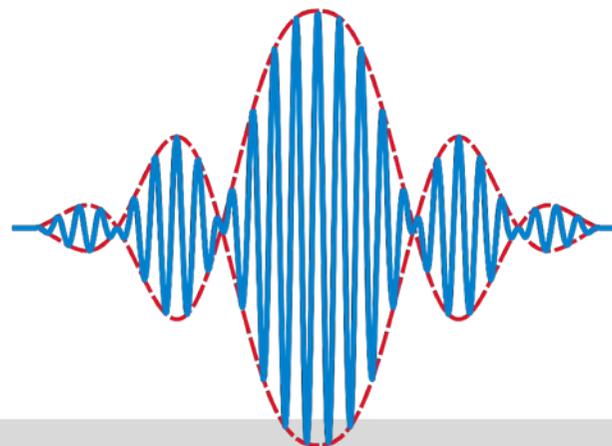
$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

Amplitude

$$E = \hbar \cdot \omega \quad \text{mit Kreisfrequenz} \quad \omega = 2\pi \cdot \nu$$

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k} \quad \text{mit Wellenzahl} \quad |\vec{k}| = 2\pi / \lambda$$



$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \cdot \Psi$$

\hat{H} = Hamilton-Operator (Energieoperator)

Hamilton-Operator \hat{H}

- \Rightarrow Zeitentwicklung des Systems
- oft aus Hamiltonfunktion des klassischen Systems, dabei Quantisierungsregeln für p , x



Nobelpreis 1933



Erwin Schrödinger

Schrödinger-Gleichung

- Wichtiger Spezialfall: stationäre Systeme, beschrieben durch die **zeitunabhängige Schrödingergleichung**

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$$

$$E = \hbar \cdot \omega$$

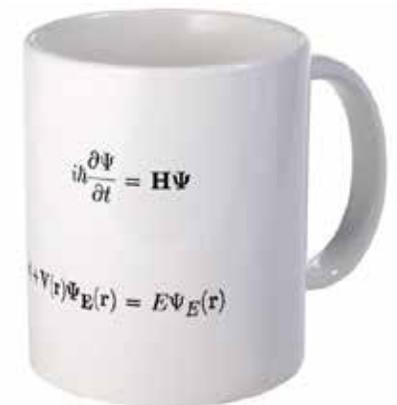
$$\Psi(\vec{r})$$

Eigenwert-Gleichung

quantisierte Energie-Eigenwerte

Eigenfunktion

**Grundpostulat der QM:
Eigenwerte identisch mit Meßwerten**



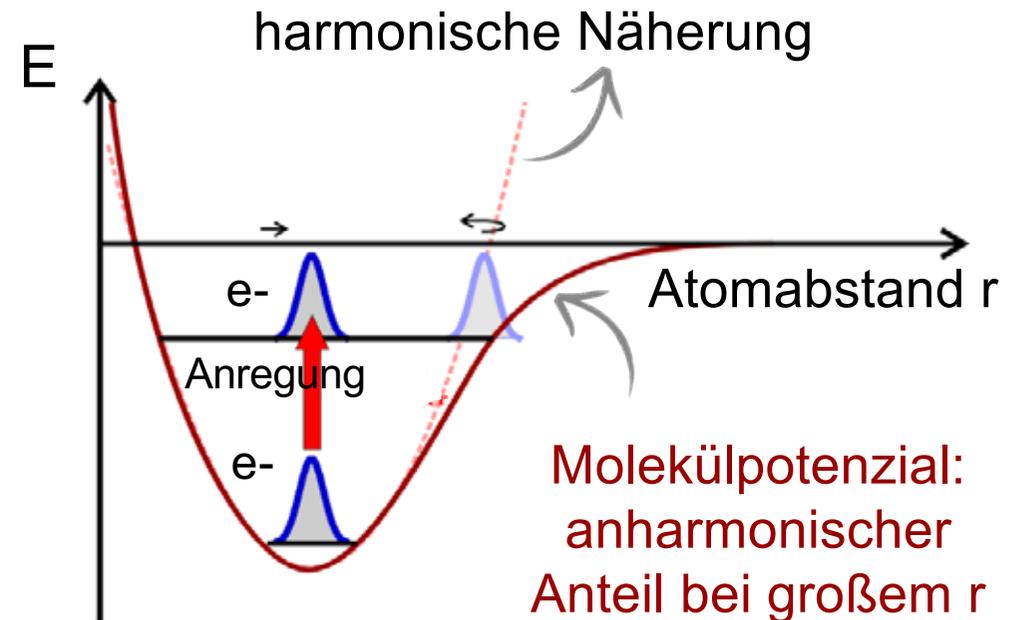
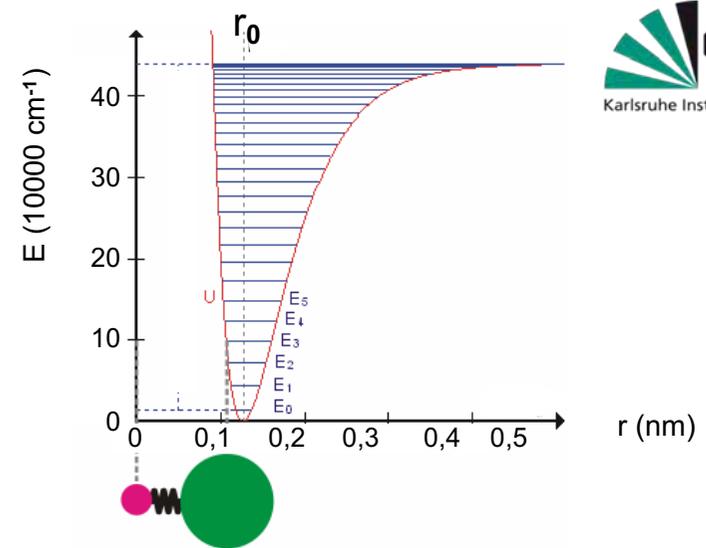
- mit der Schrödingergleichung lassen sich Atomorbitale über Elektronen-Wellenfunktionen in Potenzial V präzise berechnen

5.2 Einfache QM-Systeme

■ Wichtiges Modellsystem in der QM: **harmonischer Oszillator**

- typisches Potenzial in der Umgebung einer stabilen Gleichgewichtslage
- Beispiel: Schwingung von 2-atomigen Molekülen (mit anharmonischem Anteil!)

Vibration Molekül



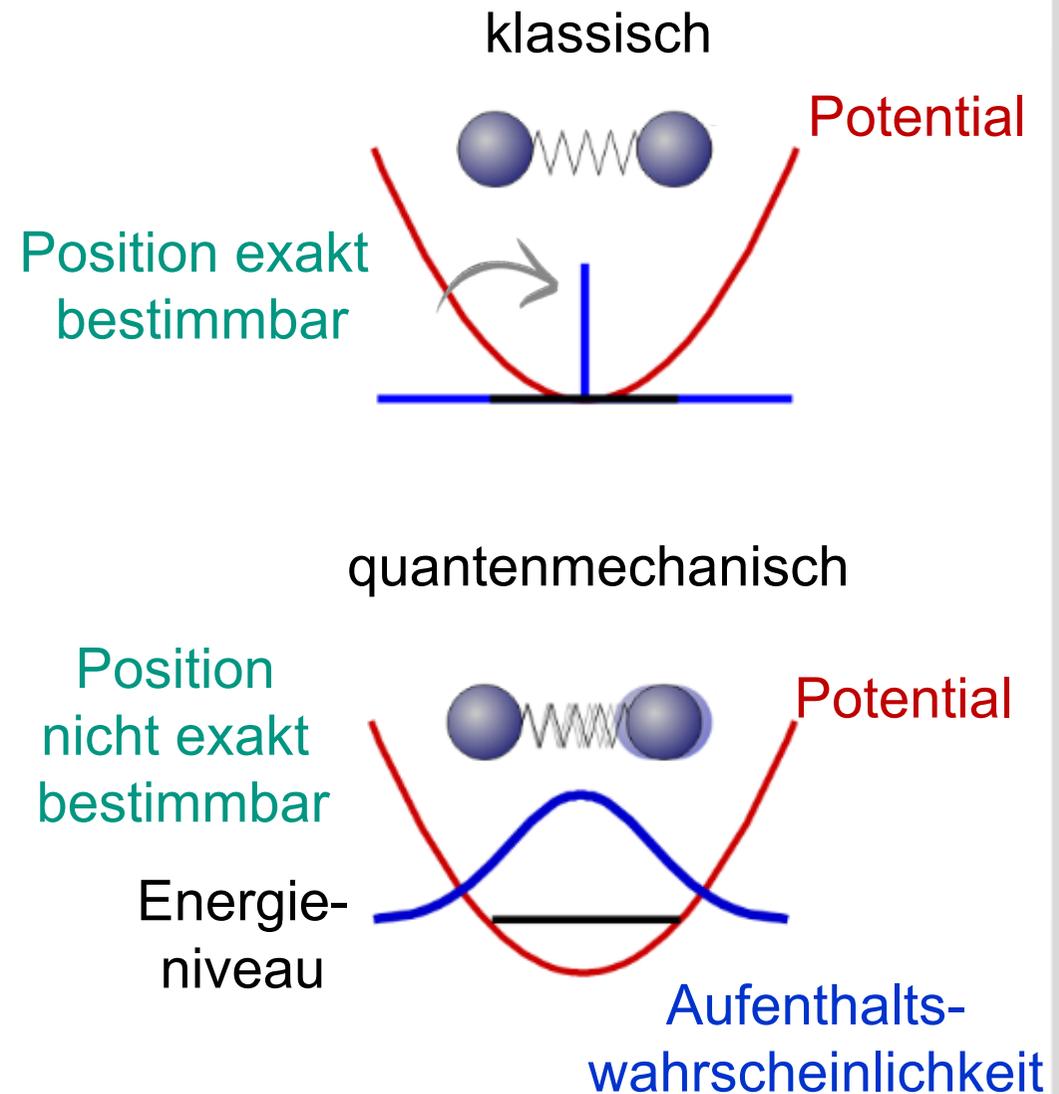
Harmonischer Oszillator in der QM

■ Wichtiges Modellsystem in der QM: **harmonischer Oszillator**

- genaue analytische Lösung verfügbar
- eindimensionaler harmonischer Oszillator mit Eigen(kreis-)frequenz ω :

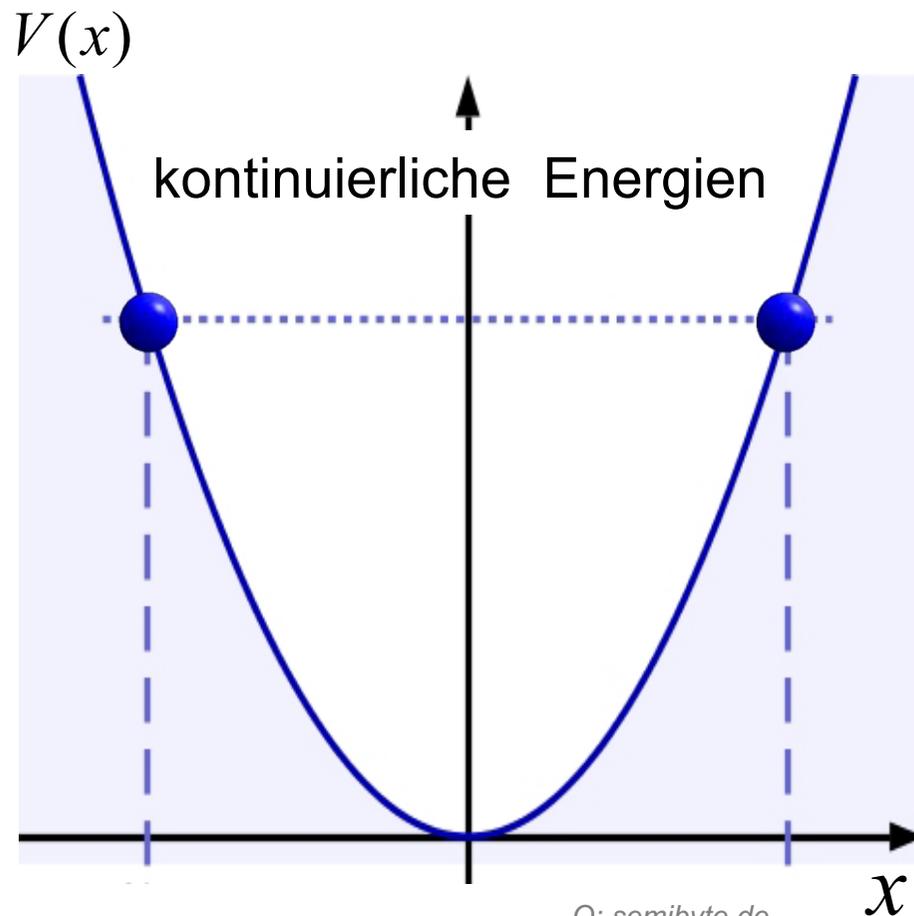
$$V(x) = \frac{1}{2} k \cdot x^2 = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2$$

klassische Beschreibung mit $\omega^2 = k / m$

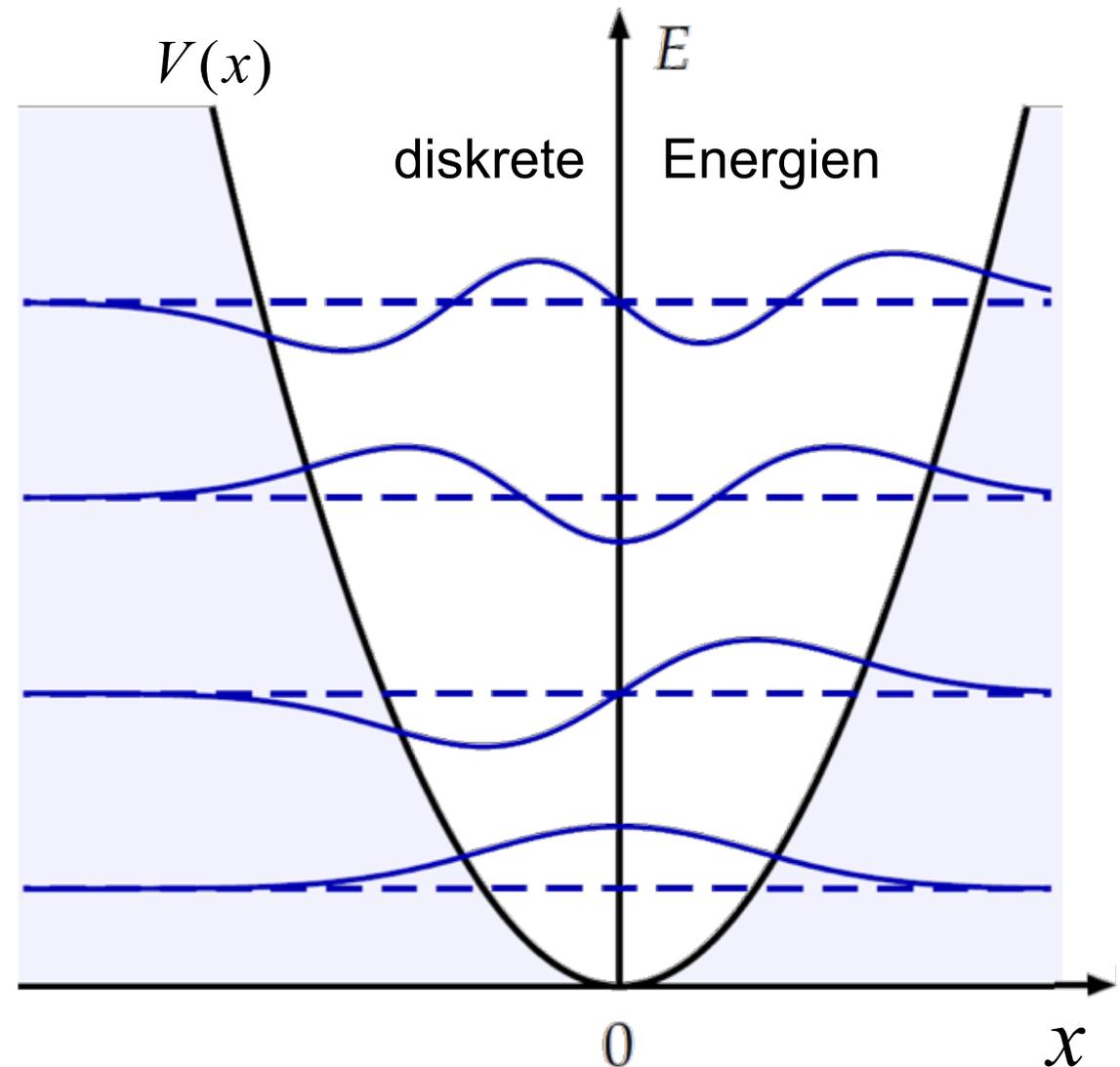


harmonischer Oszillator (1-dim)

- Harmonischer Oszillator: Unterschiede zwischen klassischem und QM Fall
 - klassisch: Kontinuum
 - **QM: diskrete Energiewerte**



Q: semibyte.de



Nullpunktenergie

■ Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik:

- Nullpunktenergie

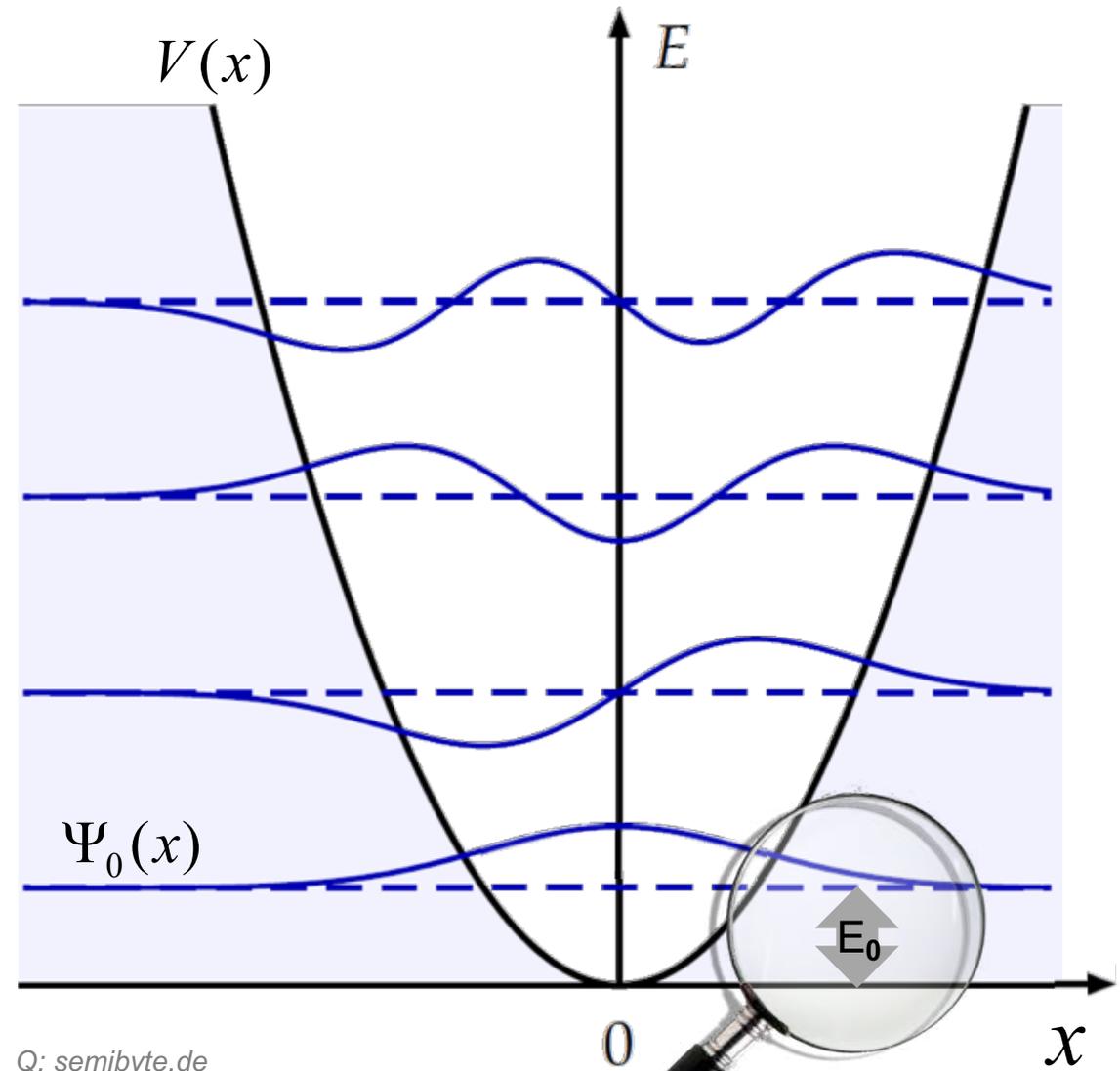
$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

- Heisenbergsche Unschärferelation:

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

- $\Psi_0(x)$: Gauß-förmige Wellenfunktion, die um $x = 0$ zentriert ist

Nullpunktenergie: $\frac{\hbar\omega}{2}$



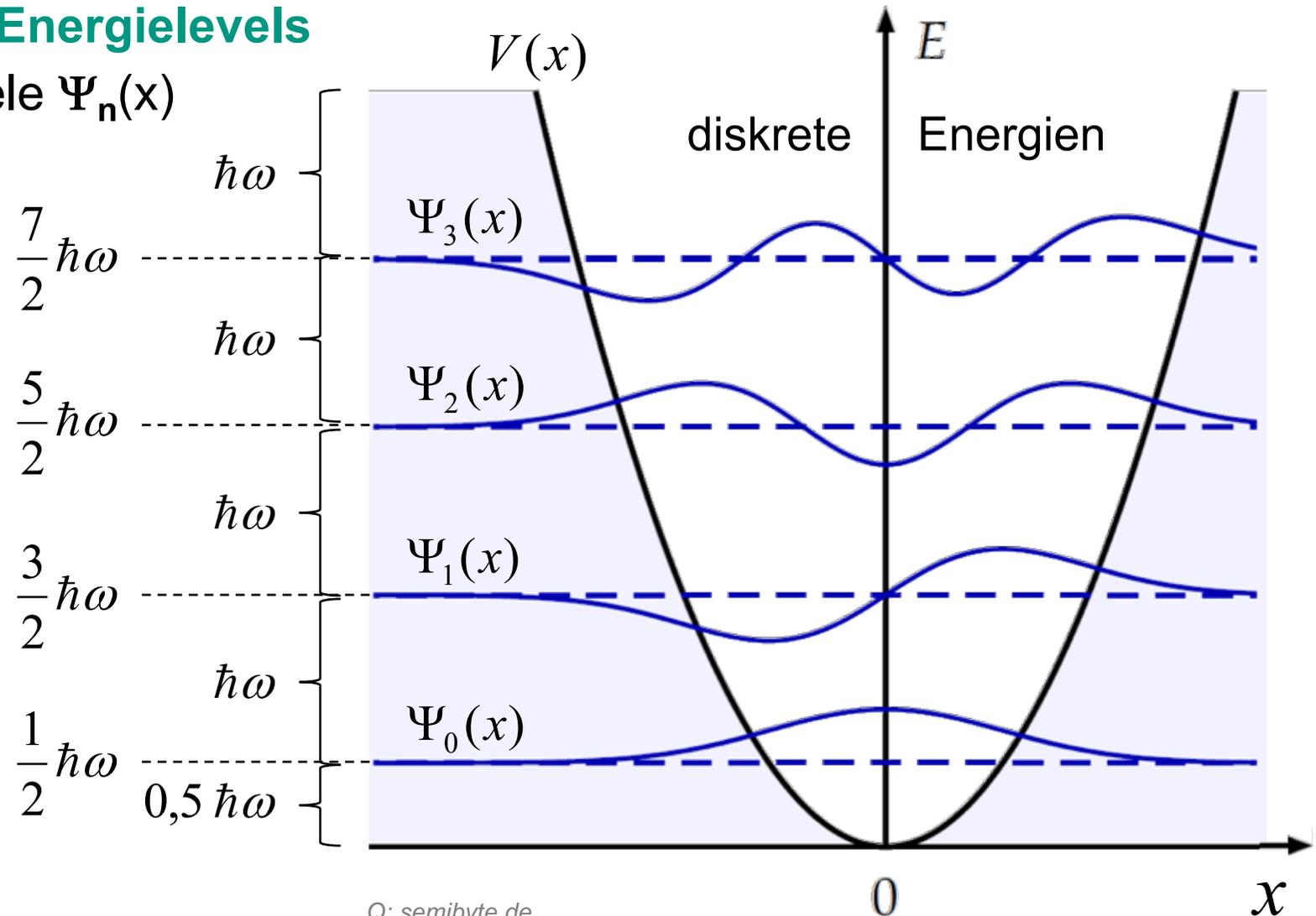
Q: semibyte.de

Energieniveaus

- jede Eigenfunktion $\Psi_n(x)$ hat ihren Energieeigenwert E_n :

- äquidistante Energielevels
- unendliche viele $\Psi_n(x)$

$$E_n = \hbar\omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



Q: semibyte.de

Einschub: Parität (1)

- **Parität P** = **Symmetrie** gegenüber einer **Spiegelung am Ursprung**

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi(-x) \quad (\text{hier: 1-dim.})$$

$$\text{Ortsvektor: } \hat{x} \rightarrow -\hat{x} \quad \text{Impulsvektor: } \hat{p} \rightarrow -\hat{p}$$

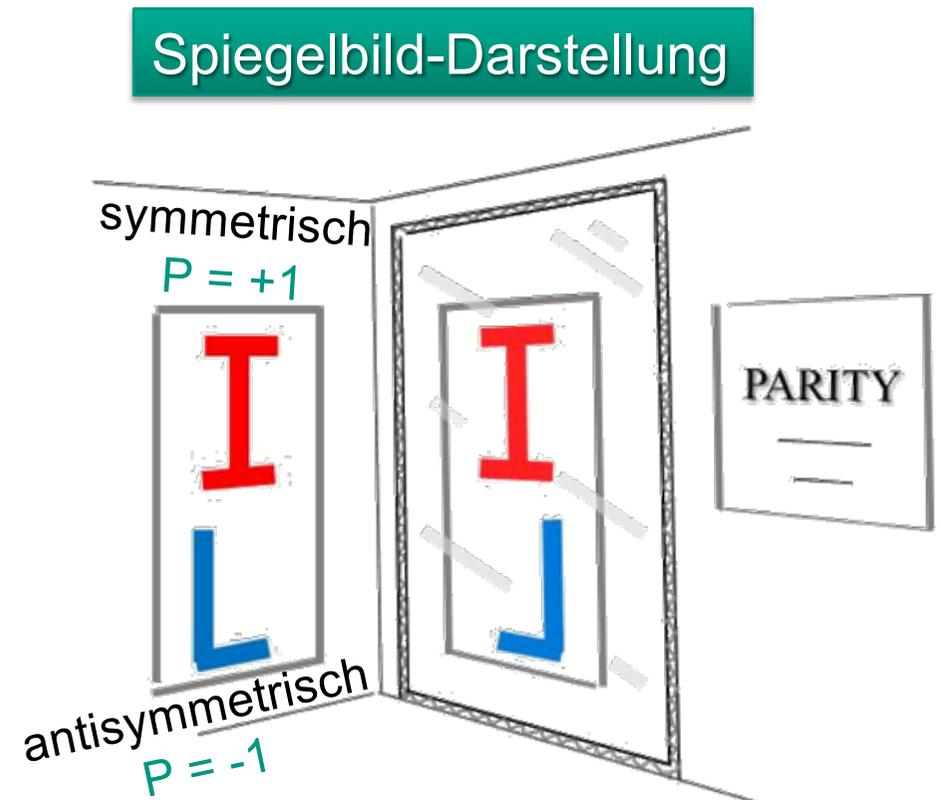
- **Parität P** allg. in 3-dim. - Koordinaten

$$P: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$

- **Parität P** - Eigenwerte

+1: gerade, even (symmetrisch)

-1: ungerade, odd (anti-symmetrisch)



Einschub: Parität (2)

- **Parität P** = **Symmetrie** gegenüber einer **Spiegelung am Ursprung**

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi(-x) \quad (\text{hier: 1-dim.})$$

- **Parität P** einer Wellenfunktion

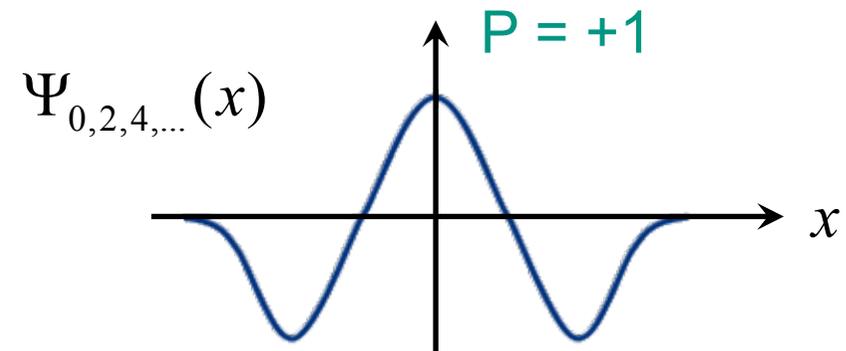
$$P \Psi(\vec{r}) = e^{i\phi/2} \cdot \Psi(-\vec{r})$$

↑
unitärer Operator

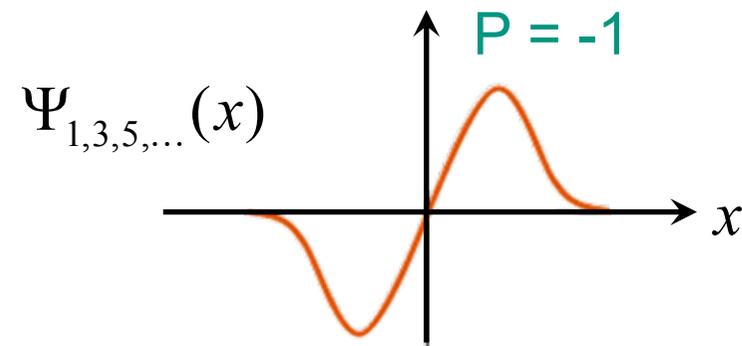
$$P = \pm 1$$

- symmetrisch: $P = +1$
- antisymmetrisch: $P = -1$

symmetrisch (gerade, **even**)



antisymmetrisch (ungerade, **odd**)



Einschub: Parität (3)

■ Parität P = multiplikative Symmetrie

$$P(\Psi_n) = \underbrace{P(\Psi_{n+1,n-1})}_{\text{Parität des Endzustands}} \cdot (-1)^1$$

Parität des
Anfangs-Niveaus

$P(\text{Photon/Photonen})$

Parität eines Photons: -1

Parität des
Endzustands

Parität bleibt erhalten bei
elektromagnetischer Ww.

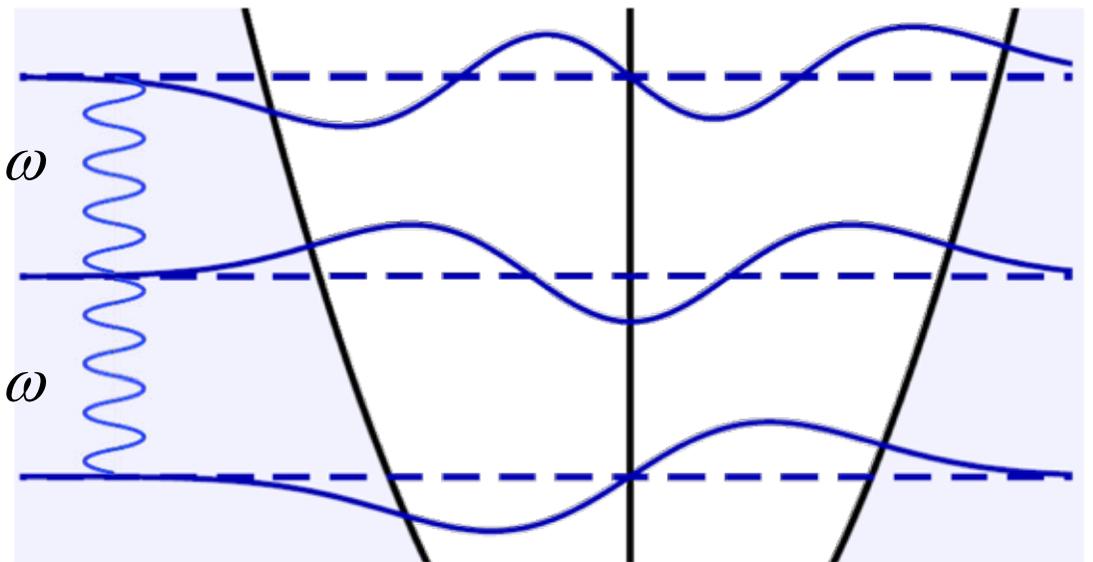
End-Niveau

$\hbar\omega$

Anfangs-Niveau

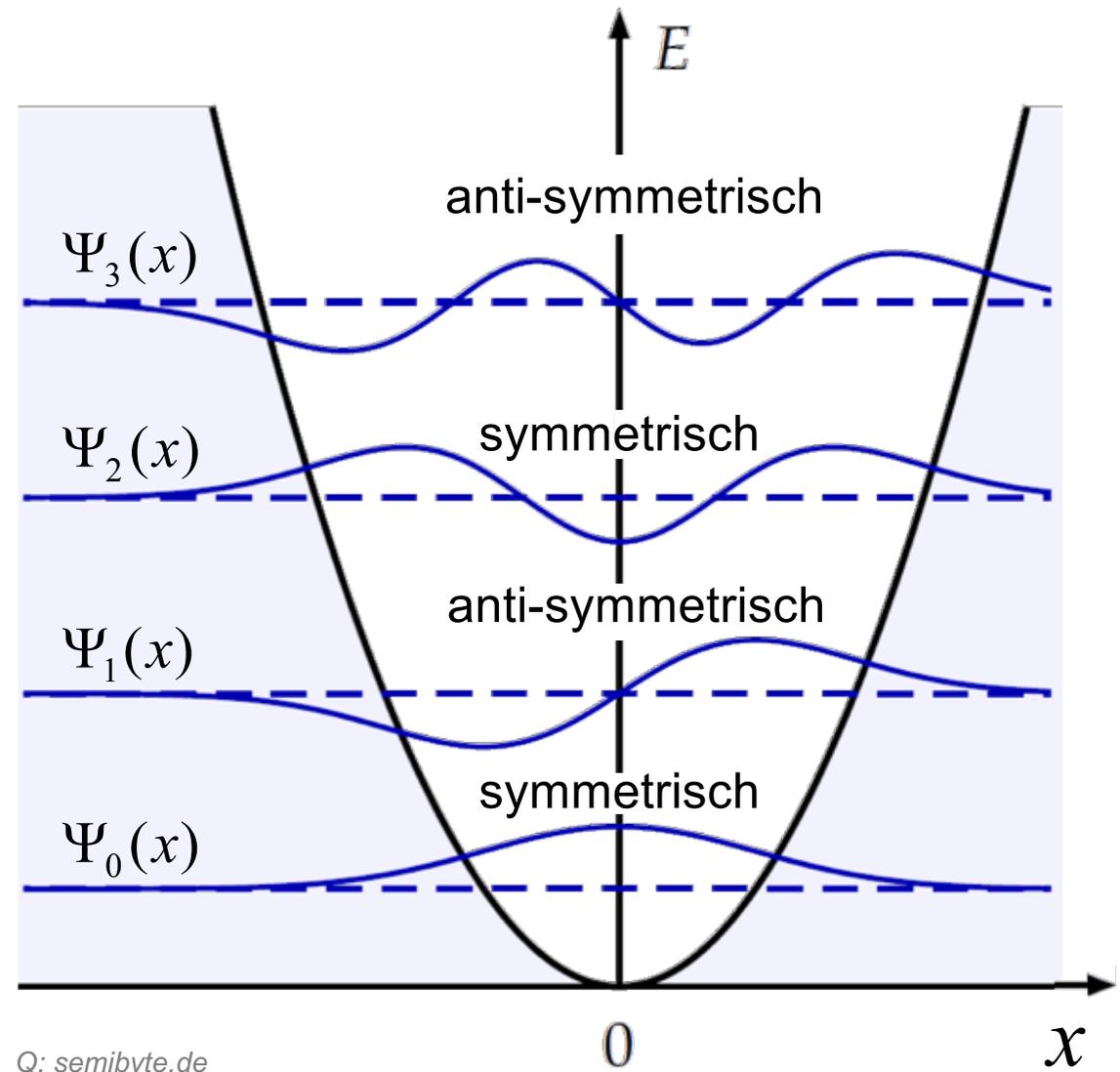
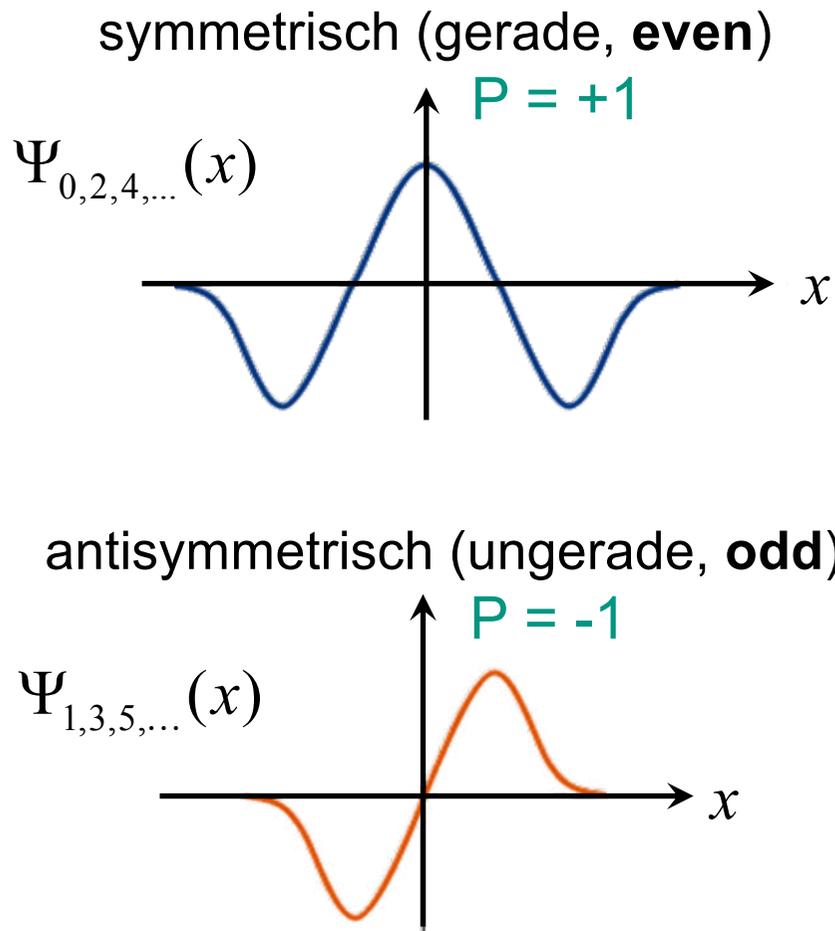
$\hbar\omega$

End-Niveau



Symmetrische/antisymmetrische WF

- Eigenfunktionen mit positiver bzw. negativer **Paritäts-Symmetrie P**



Q: semibyte.de

gerade/ungerade Wellenfunktion

■ Parität P = multiplikative Symmetrie

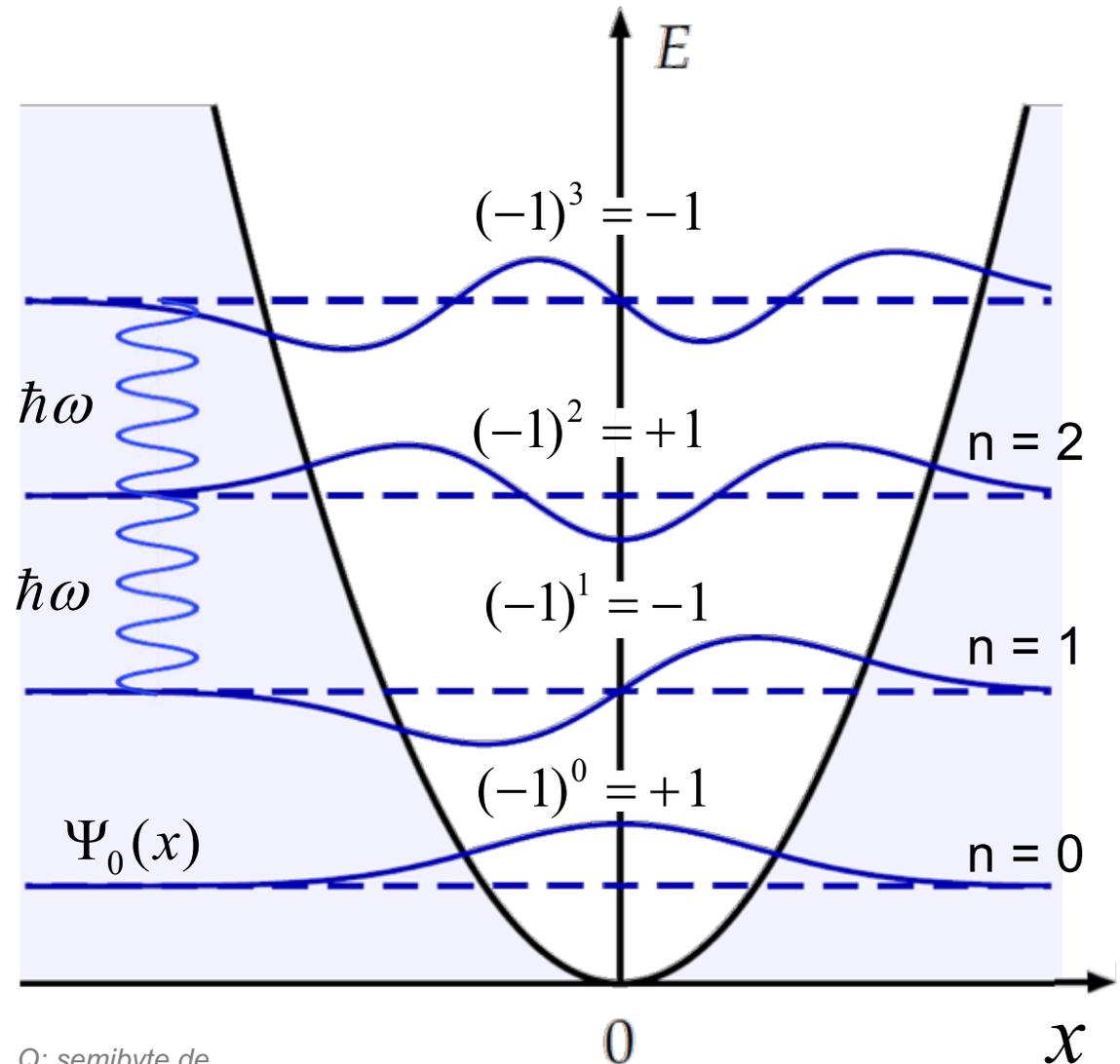
symmetrische &
antisymmetrische
Zustände
wechseln sich ab

$$P = (-1)^n$$

Photon vermittelt
jeweils den Übergang



Photon	
Masse	$m = 0$
Spin	$J = 1$
Parität	$P = -1$



Q: semibyte.de

Verlauf der Wellenfunktion bei $E < V(x)$

■ Wellenfunktion „dringt ein“ in klassisch verbotene Gebiete mit $E < V(x)$

- Wellenfunktion $\Psi_n(x)$ klingt im klassisch verbotenen Bereich mit $E < V(x)$

exponentiell ab

- daraus resultiert der

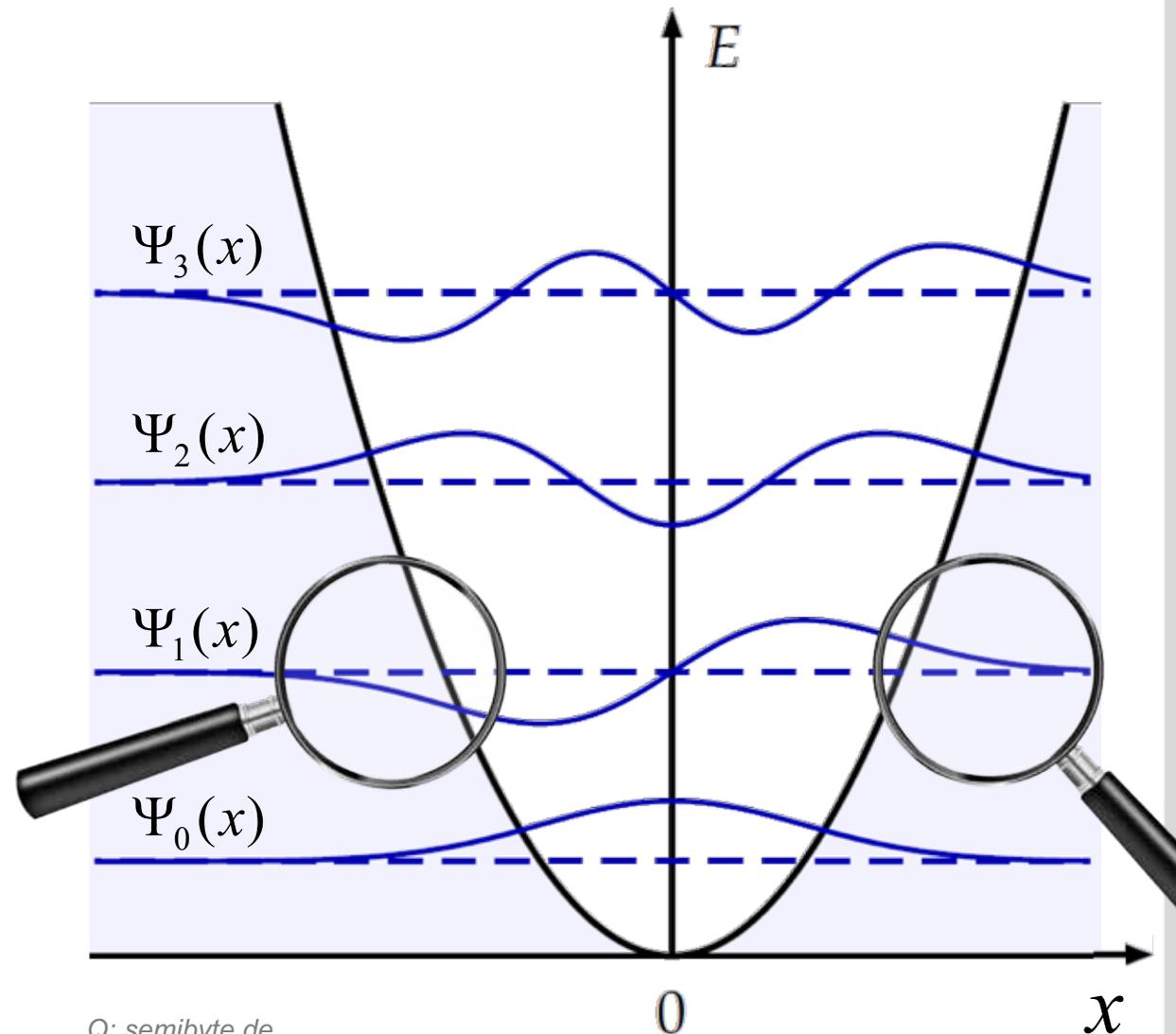
Tunneleffekt:

Teilchen können einen Potenzialwall

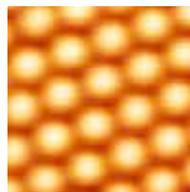
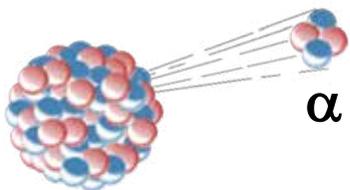
durchtunneln, z.B.

beim α -Zerfall (Kap. 11.2)

oder Elektron (Kap. 5.4)

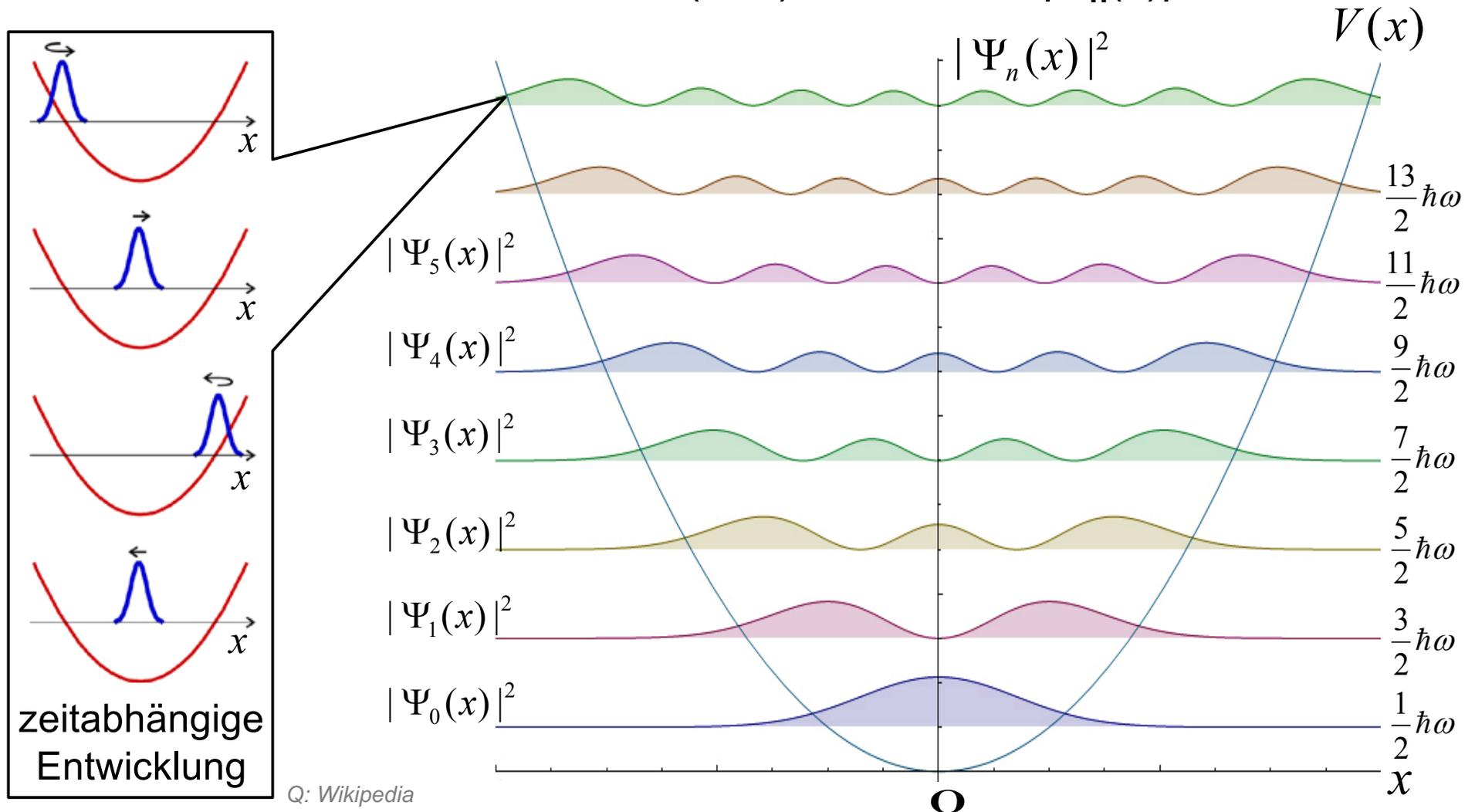


Q: semibyte.de

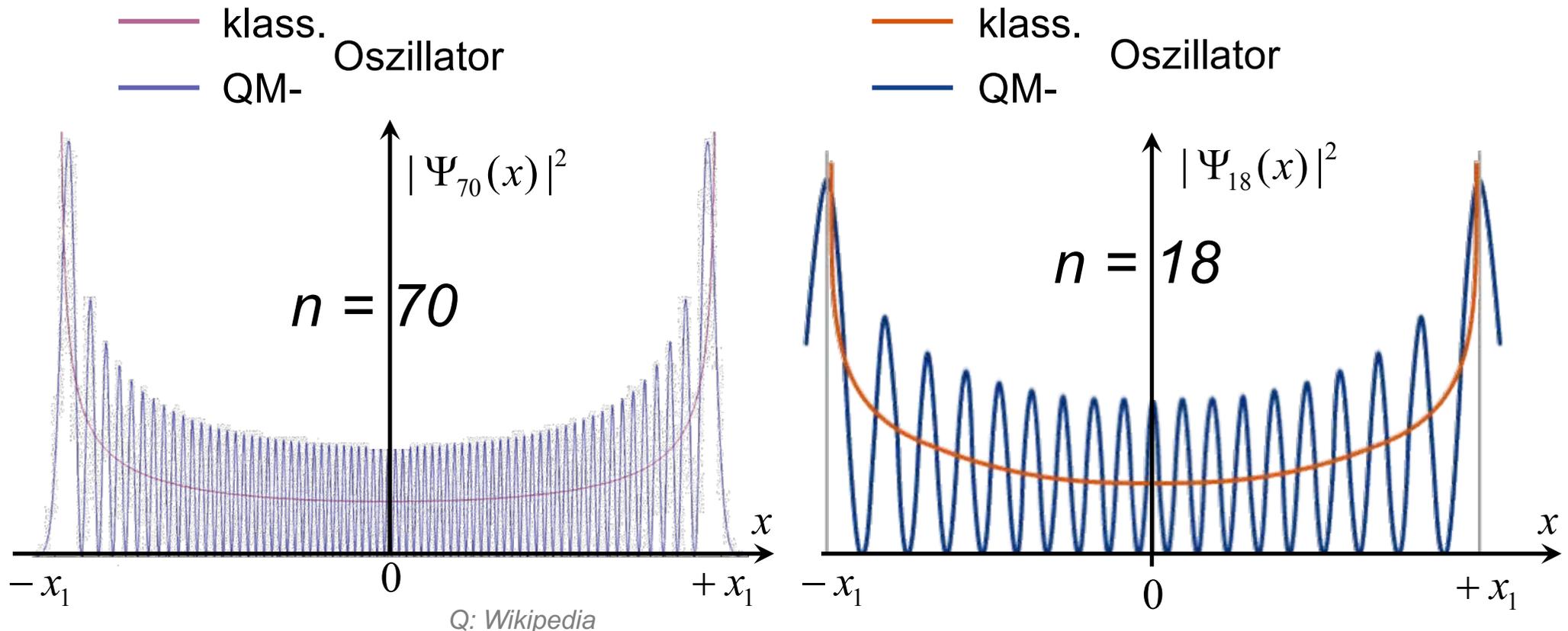


Aufenthaltswahrscheinlichkeit

- Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\Psi_n(x)|^2$ definiert die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens: $(n+1)$ Maxima für $|\Psi_n(x)|^2$



- **Korrespondenzprinzip:** im Grenzfall großer n ($n \rightarrow \infty$) erfolgt der Übergang zum klassischen harmonischen Oszillator
 - Hauptmaxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit wie im klassischen Oszillator an den beiden Umkehrpunkten $x = -x_1, +x_1$



5.3 Messungen in der QM

- Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation (1926):
 - **probabilistische** Deutung der Wellenfunktion $\Psi(r,t)$ für Quantenobjekte
 - Wahrscheinlichkeitsdichte ρ :

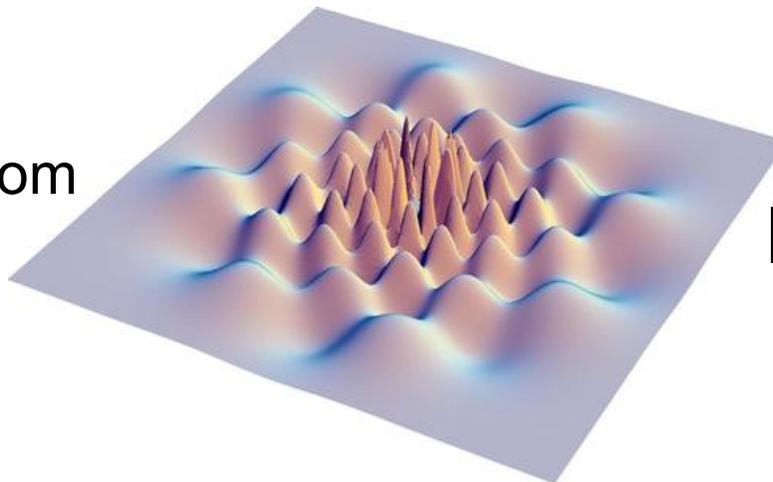
$$\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

= Wahrscheinlichkeit, ein Quantenobjekt räumlich zu lokalisieren (Wellen- und Teilchencharakter des Objekts)



Nobelpreis 1954

H-Atom



$$|\Psi(\vec{r},t)|^2$$



Max Born

■ **Observable** in der QM:

der einer Messgröße zugeordnete hermitische Operator

Beispiel: totale Energie **E** & Hamilton-Operator **\hat{H}**

$$\begin{array}{ccc} & & \text{Eigenfunktion} \\ & & | \\ & \hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r}) & \text{Eigenwertgleichung} \\ & | & | \\ \text{Operator} & & \text{Eigenwert} \\ & & \text{(Messgröße)} \end{array}$$

■ **Komplementäre Observable** in der QM:

Messgrößen, die nicht simultan bestimmt werden können

Beispiele: Ort **x** & Impuls **p_x** , Energie **E** und Zeit **dt**
entsprechen **nicht-kommutativen Operatoren**

Superpositionsprinzip

■ Interferenz von Elektronen am Doppelspalt

- Interferenz nur solange Superposition der Wellen aus Spalt 1 und Spalt 2 möglich, \Leftrightarrow n Spalte

- **Superpositionsprinzip** der QM:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot \Psi_i(\vec{r}, t)$$

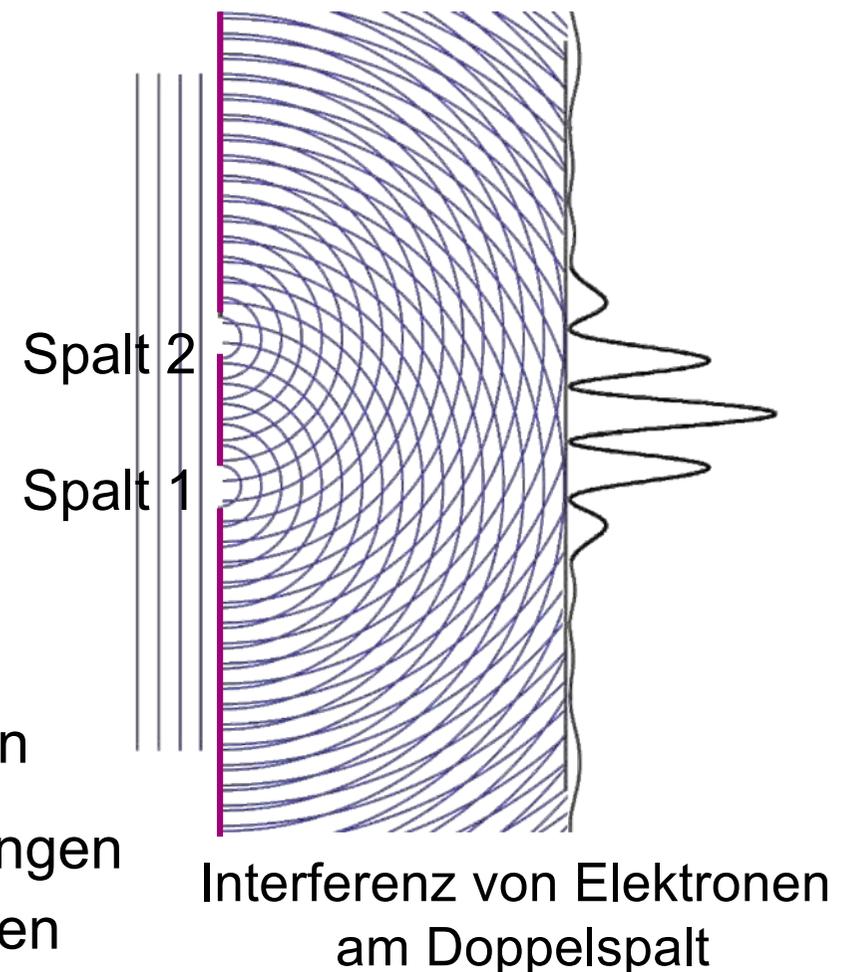
$$\text{mit } \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2 = 1$$

■ Superposition von Zuständen

- ein Quantensystem kann in einer

Superposition von Eigenzuständen sein

- **QM ist linear**: Superpositionen von Lösungen der Schrödinger-Gl. sind auch Lösungen



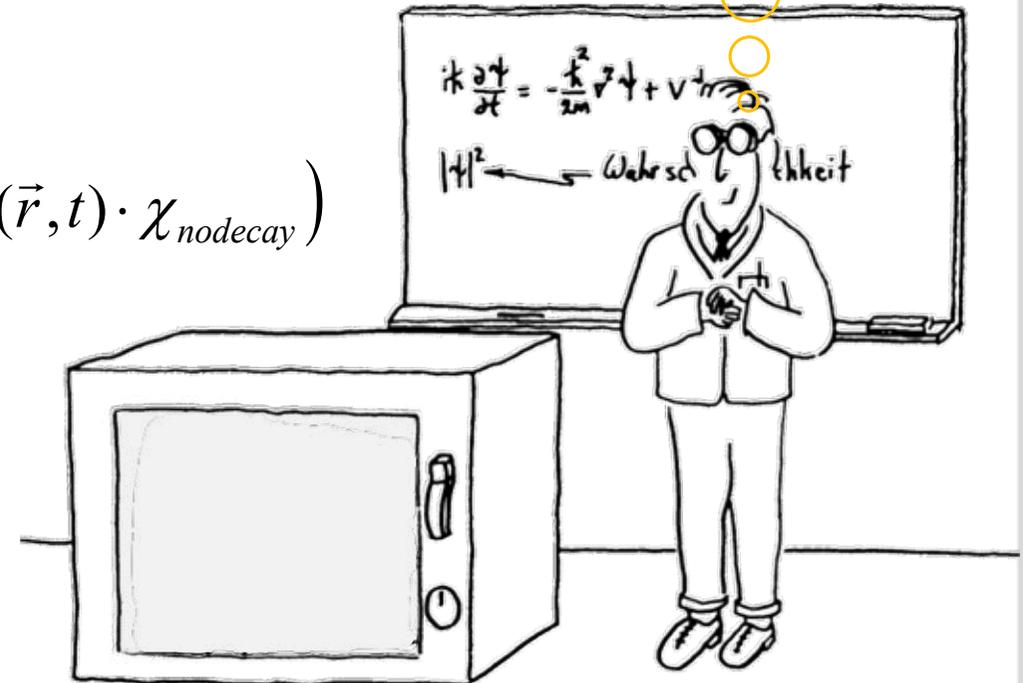
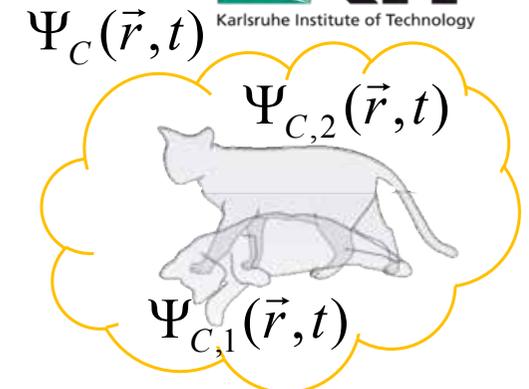
Beispiel: Schrödingers Katze

■ Berühmtes Beispiel der Superposition von Zuständen

- Gedankenexperiment von E. Schrödinger (1935)
- Zustand der Katze (makroskopisches System) wird korreliert mit dem radioaktivem Zerfall eines Kerns
- Überlagerung von 2 Zuständen:

$$\Psi_C(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{C,1}(\vec{r}, t) \cdot \chi_{decay} + \Psi_{C,2}(\vec{r}, t) \cdot \chi_{nodecay} \right)$$

- Interpretation einer QM-Messung:
Selektion eines der beiden
Zustände



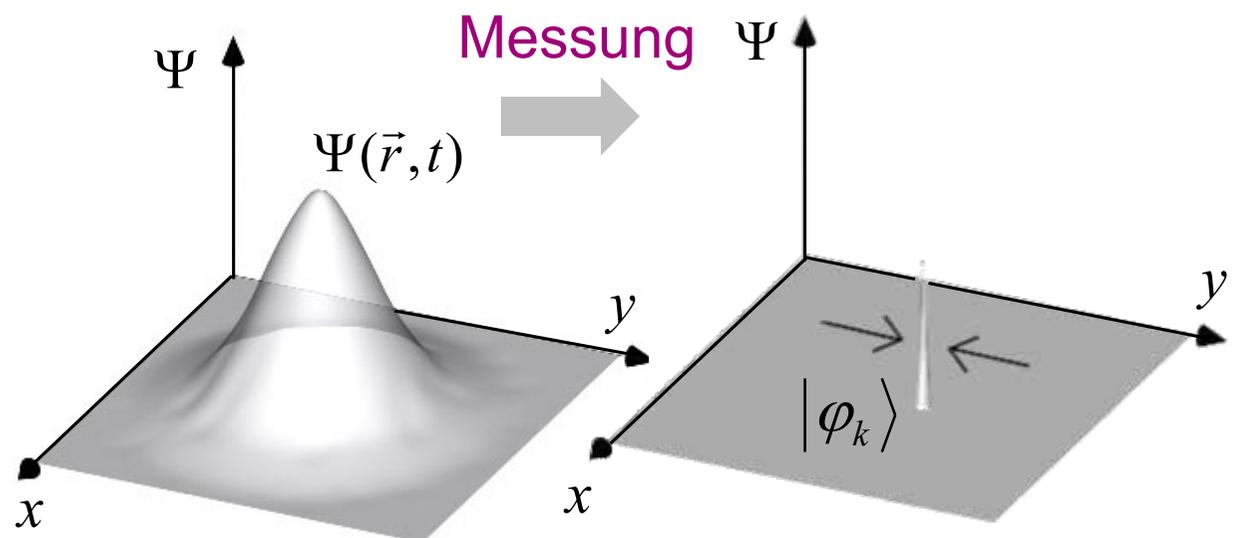
Interpretationen einer Messung - 1

■ Kopenhagen: Bei der Messung eines überlagerten Zustands kollabiert die Wellenfunktion instantan (nicht lokale Fernwirkung)

- System werde beschrieben durch orthonormale Eigenvektoren, z.B. $|1\rangle$ und $|2\rangle$
- Messung projiziert einen der möglichen Eigenzustände mit Bornscher Wahrscheinlichkeit P_k



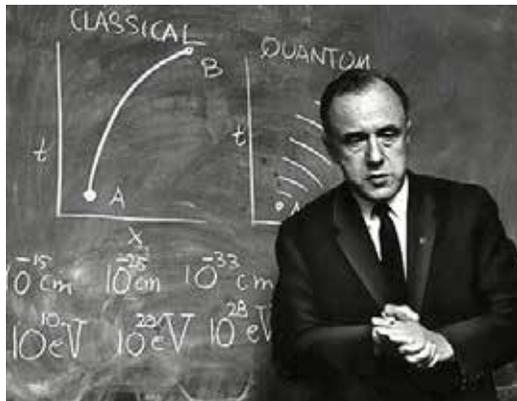
N. Bohr, W. Heisenberg, W. Pauli



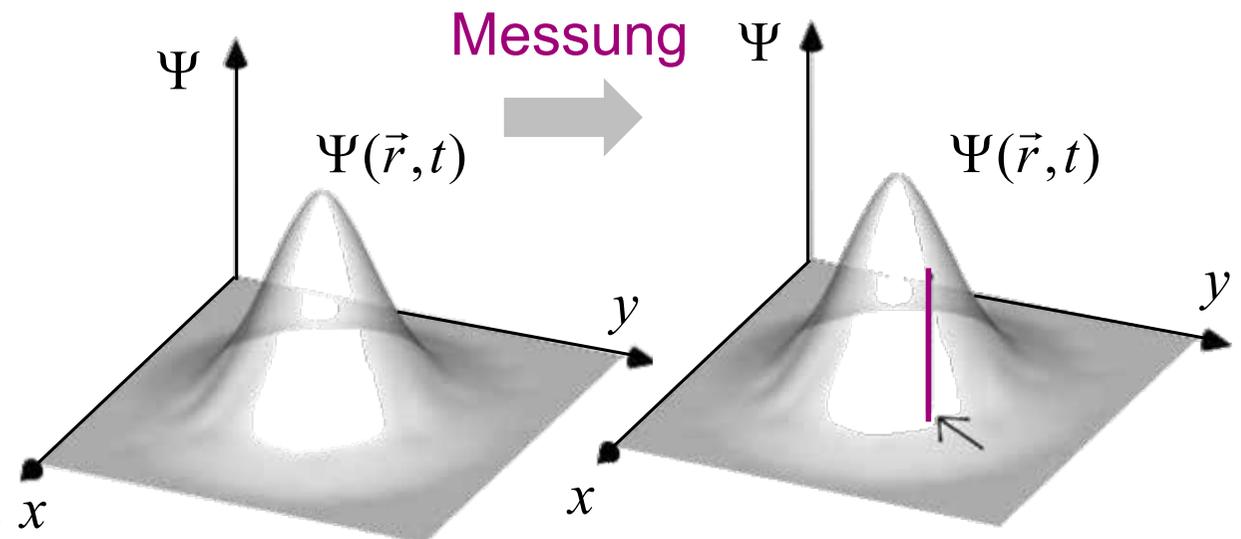
Interpretationen einer Messung - 2

- **Viele Welten:** Bei der Messung eines überlagerten Zustands wird einer der Zustände beobachtet (viele Welten), Wellenfunktion existiert weiter

- Existenz einer universellen deterministischen Wellenfunktion Ψ (kein Kollaps von Ψ)
- lokale Theorie: Splitting in parallele Welten ist nicht zeitsymmetrisch, aber kausal



H. Everett III John Archibald Wheeler



Buchempfehlungen zur Interpretation der QM

