

# Exphys IV - Mitschrieb

bei Prof. Dr. T. Pfau

Jan-Cornelius Molnar, Version: 24. Oktober 2009 11:28

## Inhaltsverzeichnis

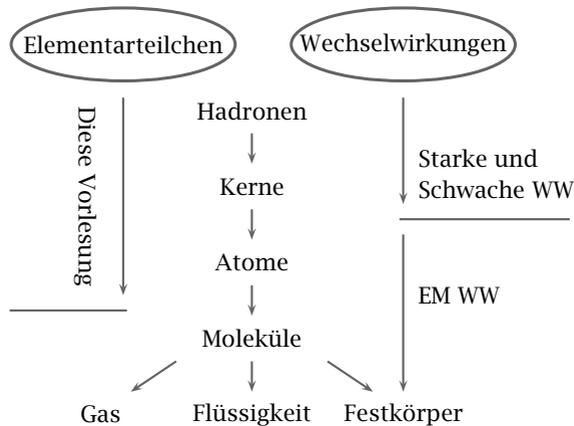
<b>1</b>	<b>Symmetrien in der Physik</b>	<b>3</b>
1-1	Aufbau der Materie . . . . .	3
■	Symmetriebrechung . . . . .	5
1-2	Symmetrien und Erhaltungssätze (klassisch) . . . . .	9
1-3	Symmetrien in der Quantenmechanik . . . . .	11
1-4	Relativistische Invarianz . . . . .	13
1-5	Der Spin . . . . .	15
1-6	Permutationssymmetrie von Bosonen und Fermionen . . . . .	18
■	Mathematische Formulierung . . . . .	19
■	Pauli-Verbot . . . . .	20
1-7	Parität . . . . .	21
■	Paritätserhaltung bei Übergängen von Zuständen . . . . .	23
■	Paritätserhaltung bei Reaktionen . . . . .	24
■	Paritätsverletzung bei Schwacher Wechselwirkung . . . . .	25
1-8	Zeitspiegelung . . . . .	26
1-9	Ladungsumkehr . . . . .	27
1-10	Zusammenfassung diskrete Symmetrien . . . . .	29
<b>2</b>	<b>Kerne- und Elementarteilchen</b>	<b>30</b>
2-1	Rutherford Streuung . . . . .	31
■	Rutherford'sche Streuformel . . . . .	36
■	Kernradienbestimmung . . . . .	38
2-2	Inelastische Streuung, Quarks und QCD . . . . .	44
2-3	Kernmassenbestimmung und Kernmodelle . . . . .	52
■	Ideales Fermigas im Kastenpotential . . . . .	56
■	Tröpfchenmodell . . . . .	61
■	Kernreaktionen . . . . .	71

2-4	Zerfälle und Radioaktivität . . . . .	73
■	Zusammenfassung . . . . .	75
■	Andere Strahlungseinheiten . . . . .	76
<b>3</b>	<b>Atome</b> . . . . .	<b>77</b>
3-1	Bohr'sches Atommodell . . . . .	78
■	Erweiterung des Bohr'schen Atommodells nach Sommerfeld	87
■	Zusammenfassung . . . . .	90
3-2	H-Atom á la Schrödinger . . . . .	91
■	Naives Modell der Wellennatur des Elektrons . . . . .	93
■	Quantenmechanische Behandlung des H-Atoms á la Schrö- dinger . . . . .	94
■	Azimutalgleichung . . . . .	97
■	Polargleichung . . . . .	98
■	Radialgleichung . . . . .	102
■	Anwendung der H-Atom Wellenfunktion . . . . .	105
3-3	Drehimpuls und Spin . . . . .	108
■	Klassische Betrachtung . . . . .	108
■	Quantenmechanische Betrachtung . . . . .	109
■	Addition von Drehimpulsen . . . . .	113
3-4	Atome im Magnetfeld - Zeeman Effekt . . . . .	115
■	Klassische Betrachtung . . . . .	115
■	Quantenmechanische Betrachtung . . . . .	117
3-5	Feinstruktur . . . . .	119
■	Spin-Bahn-Wechselwirkung . . . . .	119
■	Relativistische Massenzunahme . . . . .	122
■	Feinstrukturaufspaltung. . . . .	123
3-6	Hyperfeinstruktur . . . . .	124
3-7	Paschen-Back-Effekt vs. Zeeman-Effekt . . . . .	128
■	Paschen-Back-Effekt . . . . .	129
■	Paschen-Back-Effekt der Hyperfeinstruktur . . . . .	130
3-8	He-Atom . . . . .	133
■	Naiver Ansatz . . . . .	134
■	Qualitative Aussagen . . . . .	135
■	Das Periodensystem der Elemente . . . . .	139

# 1 Symmetrien in der Physik

## 1-1 Aufbau der Materie

In dieser Vorlesung werden wir uns mit den elementaren Bausteinen der Materie und ihren Wechselwirkungen befassen. Dadurch soll ein quantifizierbarer und nachvollziehbarer Zugang zur Wirklichkeit gefunden werden. Zunächst sollten wir jedoch die Frage klären, was "elementar" überhaupt bedeutet. In der Vergangenheit wurden zunächst die Atome für unteilbar gehalten, dann entdeckte man Elektronen, Neutronen, Protonen und heute sprechen wir von "Quarks" als Elementarteilchen. Im Folgenden werden wir uns mit diesem Postulat kritisch auseinandersetzen.



### 1 Übersicht Elementarteilchen, Wechselwirkungen.

Primär werden wir es mit der starken, schwachen sowie der elektromagnetischen Wechselwirkung zu tun haben. Die Gravitation wird in dieser Vorlesung nur eine untergeordnete Rolle spielen und kann so lange wir Elementarteilchen betrachten vernachlässigt werden.

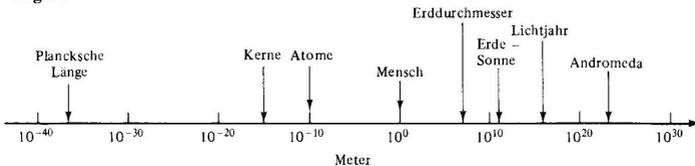
Wechselwirkung	Physikalisches Phänomen	Relative Stärke	Effektive Reichweite [m]	Wechselwirkungsfeld Quanten (Spin) Masse	Materiefeld Teilchen (Spin)	Art der Wechselwirkung zwischen identischen Teilchen
stark	Kernbindung	1	$10^{-15}$	Gluonen $1\hbar$ 0	Quarks $1/2\hbar$	abstoßend
elektromagnetisch	Elektrizität Magnetismus Optik aller Wellenlängen	$10^{-2}$	unendlich	Photonen $1\hbar$ 0	Quarks, geladene Leptonen $1/2\hbar$	abstoßend
schwach	radioaktiver Zerfall	$10^{-5}$	$10^{-18}$	W, Z Bosonen $1\hbar$ [ $\sim 100\text{ GeV}$ ]	Quarks Leptonen	abstoßend
Gravitation	gekrümmtes Raum-Zeit Kontinuum	$10^{-38}$	unendlich	Graviton $2\hbar$ 0	alle Teilchen	anziehend

K. Bethge, U. E. Schröder, Elementarteilchen und ihre Wechselwirkungen, S. 10

## 2 Charakteristische Eigenschaften der Wechselwirkungen.

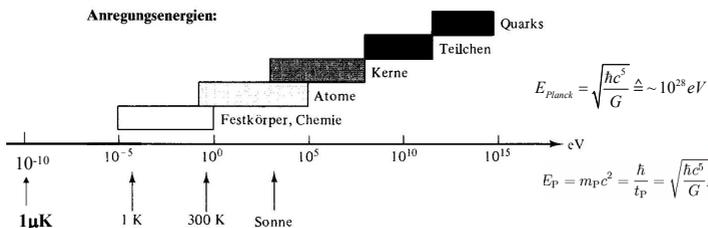
$$L_{\text{Planck}} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}}$$

**Längen:**



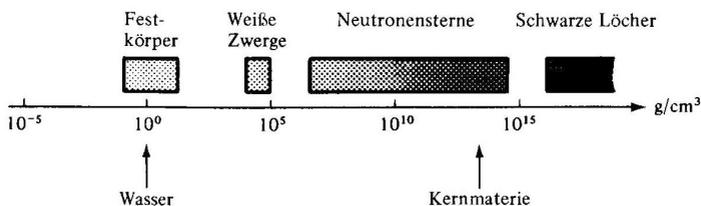
H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 2

## 3 Typische Längenskalen. Der Bereich unterhalb von $10^{-18}\text{m}$ ist unerforscht! Es ist nicht bekannt, ob dort neue Kräfte und Erscheinungen zu erwarten sind.



H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 2

- 4 Bereich der Anregungsenergien. Die angegebenen Temperaturen entsprechen den jeweiligen Energien.



H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 2

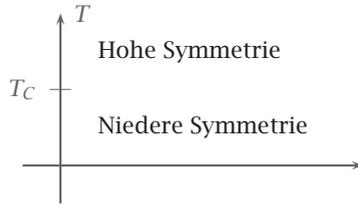
- 5 Dichtebereiche.

### ■ Symmetriebrechung

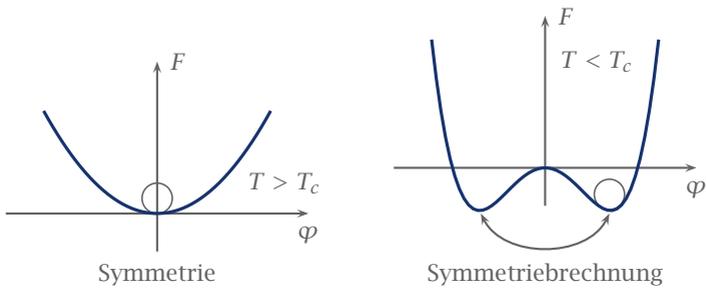
Es sei eine Temperaturskala mit Phasenübergang bei einer kritischen Temperatur  $T_C$  gegeben. In der Thermodynamik verwenden wir die freie Energie  $F$ , um den Zustand eines Systems zu beschreiben, wobei die freie Energie von einem Ordnungsparameter  $\varphi$  abhängt.

Generell erhält man für hohe Temperaturen bzw. Energien eine höhere Symmetrie welche bei niedrigeren Temperaturen gebrochen wird.

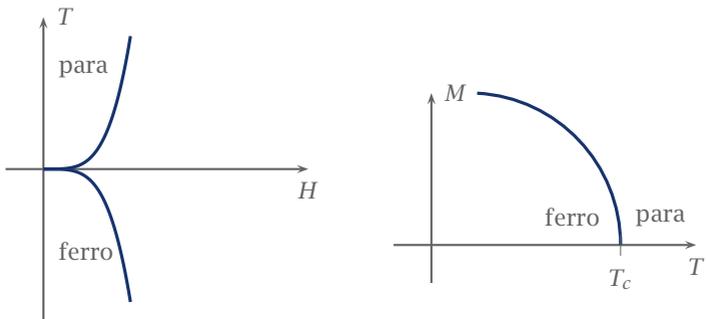
**BSP** Wir kennen dieses Verhalten bereits von Ferromagneten. Hier wird die Ordnung durch den Ordnungsparameter Magnetisierung ( $\varphi = M$ ) beschrieben. Wird eine kritische Temperatur überschritten (Curie-Temperatur), so haben die elementaren Dipole keine Vorzugsrichtung mehr und der Magnet wird zum Paramagneten.



6 Symmetriebrechung durch Temperaturänderung.



7 Symmetriebrechung in der Thermodynamik.



8 Verhalten eines Ferromagneten bei Curie-Temperatur.

Bei dieser Temperatur liegt eine höhere Symmetrie vor, denn der Magnetismus ist isotrop also Richtungsunabhängig. Kühlt man den Magneten ab, ordnen sich die Dipole wieder entlang ihrer Vorzugsrichtung starr an, die räumliche Symmetrie innerhalb der ferromagnetischen Domäne geht verloren. Diesen Vorgang nennt man spontane Symmetriebrechung.

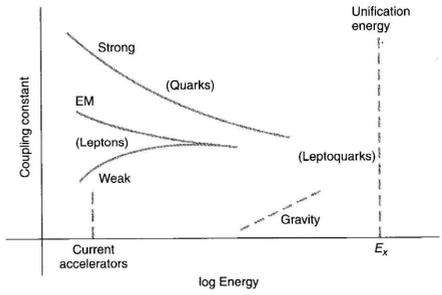
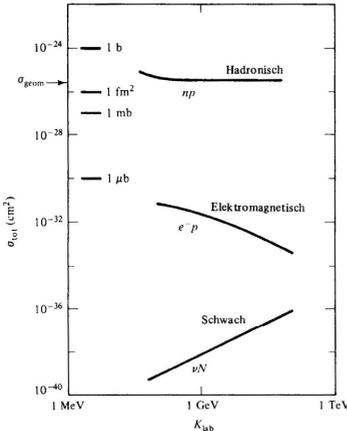
Betrachten wir die Welt um uns herum, so finden wir zahlreiche gebrochene Symmetrien, die bei hohen Energien bzw. Temperaturen wiederhergestellt werden. Kristalle schmelzen; gebundene Zustände werden in ihre Bestandteile zerlegt wie z.B. Gase gehen in Plasmen über etc.

Um die elementaren Bestandteile der Materie zu finden, ist es daher hilfreich, die Energie immer weiter zu erhöhen und die verbleibenden Symmetrien zu skizzieren. ■

Zur Beschreibung der Gravitation verfügen wir über die Einsteinschen Feldgleichungen und die Allgemeine Relativitätstheorie, für den Elektromagnetismus über die Maxwell Gleichungen. In beiden Fällen sind die Gleichungen lorentz-invariant, d.h. Lorentztransformationen sind elementare Symmetrioperationen. Für die starke und schwache Wechselwirkung sind (noch) keine Grundgleichungen verfügbar, man ist daher auf der Suche nach zusätzlichen Symmetrien.

Das Konzept der Symmetrie spielt eine wichtige Rolle bei hohen Energien, da dort neue Symmetrien auftreten. Man vermutet, dass sich bei sehr hohen Energien die starke, schwache und elektromagnetische Wechselwirkung und die Gravitation zu einer einzigen Wechselwirkung mit einer neuen Symmetrie vereinen. Diese Symmetrie wird im Niederenergiebereich gebrochen und führt zu den unterschiedlichen Wechselwirkungen, die wir mit niedriger Symmetrie heute beobachten.

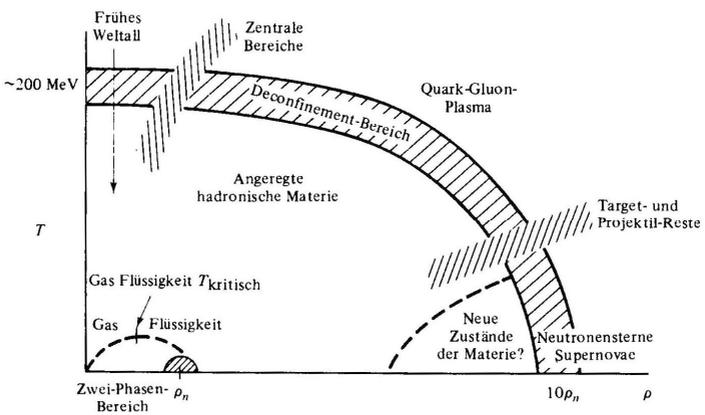
Die vermutete Symmetrie kann helfen, die Zustände zu erklären, die bei der Entstehung des Universums vorzufinden waren. Denn zu jeder neuen Symmetrie gehört auch ein neuer Erhaltungssatz. Aber auch das Verhalten komplexer Kernmaterie zeigt Phasenübergänge und Symmetriebrechung.



P. A. Tipler, R. A. Llewellyn, Modern Physics, Fifth Edition S. 605

H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 428

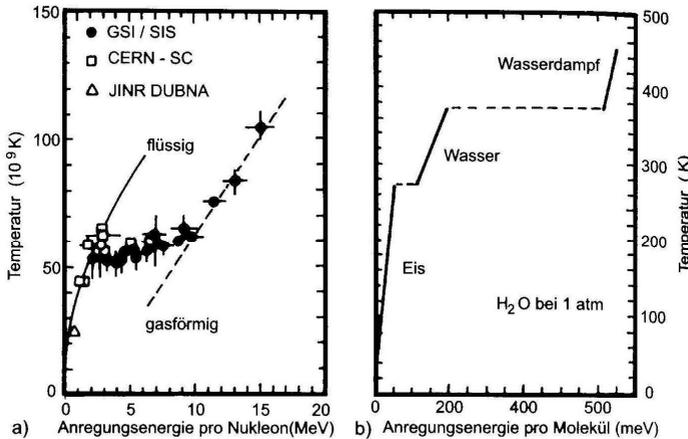
- 9 Vergleich der Gesamtwirkungsquerschnitte von hadronischen, elektromagnetischen und schwachen Prozessen an Nukleonen.  $\sigma$  bezeichnet den geometrischen Wirkungsquerschnitt eines Nukleons,  $K$  gibt die kinetische Energie an.



H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 514

- 10 Phasendiagramm für Kerne.

**BSP** Betrachten wir die Temperaturkurve von Kernmaterie in Abhängigkeit der Anregungsenergie pro Nukleon, so ergibt sich eine große Ähnlichkeit zum Verlauf der Temperaturkurve von Wasser in Abhängigkeit der Anregungsenergie pro Molekül. Solche Analogien helfen und dabei, das Verhalten der Kerne auf bekanntes zu übertragen und so ein Modell für die Kerne zu entwickeln. ■



K. Bethge, G. Walter, B. Wiedemann, Kernphysik – Eine Einführung, S. 216

11 Temperaturdiagramm für (a) Kernmaterie und (b) Wasser.

## 1-2 Symmetrien und Erhaltungssätze (klassisch)

In diesem Abschnitt sollen Symmetrien mathematisch formuliert werden. Durch diesen Formalismus lässt sich aus jeder Symmetrie ein Erhaltungssatz ableiten.

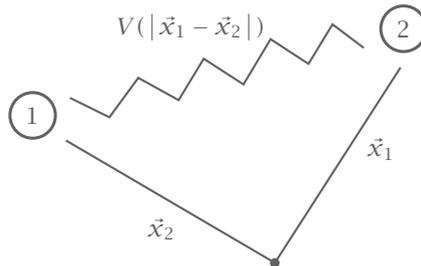
Unter einer Symmetrie versteht man eine Operation  $\hat{S}$ , die ein physikalisches Objekt oder Gesetz  $O$  invariant lässt,

$$\hat{S}(O) = O.$$

$O$  nennt man auch **Observable**.

**BSP Paritätssymmetrie.** Wir beobachten ein Phänomen bspw. eine Teilchenbewegung sowohl gewöhnlich als auch durch einen Spiegel. Eine Symmetrie liegt genau dann vor, wenn sich die Physik im Spiegelbild nicht ändert. ■

**Bsp Translationsymmetrie.** Wechseln zwei Teilchen in einem abgeschlossenen homogenen System miteinander, so ist die Wechselwirkung vom Koordinatenursprung unabhängig.



## 12 2-Teilchen-Translationsinvarianz.

Eine Symmetrieeoperation ist daher gegeben durch,

$$\hat{S} : \vec{x}_i \mapsto \vec{x}_i + \vec{a},$$

wobei  $\vec{a}$  für einen beliebigen Koordinatenursprung steht.  $\hat{S}$  verändert als Symmetrieeoperation die Wechselwirkung  $V$  zwischen den Teilchen nicht, d.h.  $\hat{S}(V) = V$ . Aufgrund dieser Symmetrie erhalten wir sofort die **Impulserhaltung**.

$$\vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2,$$

denn es gilt

$$\frac{d}{dt} \vec{p} = -\nabla V = -(\nabla_1 + \nabla_2)V = -\nabla_1 V - \nabla_2 V = 0. \Rightarrow \vec{p} = \text{const.} \quad \blacksquare$$

Um das letzte Beispiel zu verallgemeinern, führen wir die **Hamiltonfunktion**

$$H(p_i, q_i),$$

ein mit den generalisierten Koordinaten  $q_i$  und den kanonischen Impulsen  $p_i$ . Eine Translation hat nun die Form,

$$\hat{S} : q_i \mapsto q_i + \delta q_i.$$

Gilt  $\hat{S}(H) = H$ , so ist  $\hat{S}$  eine Symmetrieoperation, d.h.  $\hat{S}$  verändert die Hamiltonfunktion nicht. In diesem Fall gilt

$$0 = \delta H = \delta q \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\delta q \sum_i \dot{p}_i.$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \sum_i \dot{p}_i = 0.$$

Wir erhalten somit aus der Translationssymmetrie den Impulserhaltungssatz.

Analog erhält man aus der Rotationssymmetrie den Drehimpulserhaltungssatz und aus der zeitlichen Translationssymmetrie die Energieerhaltung.

### 1-3 Symmetrien in der Quantenmechanik

Wir wollen die in der klassischen Mechanik entwickelte Theorie nun auf die Quantenmechanik erweitern.

- 1.) Die verallgemeinerten Impulse und Koordinaten werden durch Operatoren ersetzt, die einer Vertauschungsrelation genügen.

$$[\hat{p}_i, \hat{q}_k] = i\hbar \delta_{ik}.$$

- 2.) Die zu messenden Größen werden durch Erwartungswerte ersetzt,

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \int dV \Psi^* \hat{\Omega} \Psi.$$

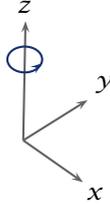
Ist  $\hat{\Omega}$  eine Erhaltungsgröße, verschwindet die zeitliche Ableitung. Es gilt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle &= \int dV i\hbar \frac{d}{dt} [\Psi^* \hat{\Omega} \Psi] \\ &= \int dV \left[ \left( -\Psi^* i\hbar \frac{d}{dt} \right) \hat{\Omega} \Psi + \Psi^* \hat{\Omega} \left( i\hbar \frac{d}{dt} \Psi \right) \right] \\ &= \int dV -(\Psi^* \hat{H}) \hat{\Omega} \Psi + \Psi^* \hat{\Omega} H \Psi \\ &= \int dV \Psi^* (\hat{\Omega} \hat{H} - \hat{H} \hat{\Omega}) \Psi \\ &= \langle [\hat{H}, \hat{\Omega}] \rangle. \end{aligned}$$

$\hat{\Omega}$  ist also genau dann eine Erhaltungsgröße wenn  $\hat{H}$  und  $\hat{\Omega}$  vertauschen.

**BSP** Drehung um die z-Achse.

$$\begin{aligned}\hat{S} : x &\mapsto x \cos \varphi - y \sin \varphi, \\ y &\mapsto x \sin \varphi + y \cos \varphi, \\ z &\mapsto z.\end{aligned}$$



13 Drehung um die z-Achse.

Für eine Drehung um  $\delta\varphi$  gilt daher,

$$\delta x = -y \delta\varphi,$$

$$\delta y = x \delta\varphi,$$

$$\delta z = 0,$$

$$\Rightarrow \hat{S}\Psi(\vec{x}) = \Psi(\vec{x}) - \delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \delta y \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \left( 1 - \delta\varphi \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \Psi(\vec{x}).$$

Die Drehung hängt also mit der z-Koordinate des Drehimpulses zusammen,

$$\hat{l}_z = [\hat{x} \times \hat{p}]_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Die Drehung um die z-Achse können wir damit schreiben als,

$$\hat{S}\Psi(\vec{x}) = \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{l}_z \right) \Psi(\vec{x}).$$

Da wir infinitesimale Winkel  $\delta\varphi$  betrachten, können wir dies als Taylor-Entwicklung 1. Ordnung des Exponential-Operators auffassen. Beim Übergang zur kontinuierlichen Drehung erhält man,

$$\hat{S} : \Psi(\vec{x}) \mapsto \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \varphi \hat{l}_z \right\} \Psi(\vec{x}).$$

Man bezeichnet  $\hat{l}_z$  als **Erzeugende** der Drehung um die z-Achse. Betrachten wir nun den Hamilton Operator unter einer infinitesimalen Drehung,

$$\begin{aligned}
 \hat{S}(\langle \hat{H} \rangle) &= \int dV \Psi^* \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{l}_z \right) \hat{H} \left( 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{l}_z \right) \Psi \\
 &= \int dV \Psi^* \hat{H} \Psi + \Psi^* \hat{H} \left( \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{l}_z \right) \Psi - \Psi^* \left( \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{l}_z \right) \hat{H} \Psi \\
 &\quad + \underbrace{\frac{1}{\hbar^2} \delta\varphi^2 \Psi^* \hat{l}_z \hat{H} \hat{l}_z \Psi}_{=0, \text{ da quadratisch in } \delta\varphi.} \\
 &= \int dV \Psi^* \left[ \hat{H} - \frac{i}{\hbar} (\hat{l}_z \hat{H} - \hat{H} \hat{l}_z) \right] \Psi \\
 &\stackrel{!}{=} \langle \hat{H} \rangle,
 \end{aligned}$$

dann gilt die Gleichheit genau dann, wenn  $\hat{l}_z$  mit dem Hamilton vertauscht,

$$[\hat{l}_z, \hat{H}] = 0.$$

Rotationssymmetrie um die z-Achse impliziert also wie in der klassischen Mechanik die Erhaltung des Drehimpulses um die z-Achse. ■

## 1-4 Relativistische Invarianz

Eine **Lorentztransformation**<sup>1</sup>, erhält den Abstand zweier Punkte in der Raumzeit. Eine Größe, die sich unter einer Lorentztransformation nicht ändert, heißt **lorentzinvariant**.

Die Lorentztransformation ist somit eine Symmetrieoperation  $\hat{S}$  mit einer Invarianten  $s$ , dem raumzeitlichen Abstand, gegeben durch,

$$s^2 = c^2(t_1 - t_2)^2 - (x_1 - x_2)^2 - (y_1 - y_2)^2 - (z_1 - z_2)^2 = \text{const.}$$

---

<sup>1</sup>Hendrik Antoon Lorentz (\* 18. Juli 1853 in Arnheim; † 4. Februar 1928 in Haarlem) war ein niederländischer Mathematiker und Physiker und Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1902.

**Bsp** Lineare Bewegung in  $x$ -Richtung mit Geschwindigkeit  $v$ ,

$$\hat{S} : ct' = c(\cosh \alpha)t - x(\sinh \alpha)$$

$$x' = x \cosh \alpha - c(\sinh \alpha)t$$

$$y' = y$$

$$z' = z$$

wobei

$$\cosh \alpha = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \sinh \alpha = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Da  $\sinh^2 \alpha - \cosh^2 \alpha = 1$  gilt  $\hat{S}(s^2) = s^2$ . ■

Um in der Raumzeit geschickt rechnen zu können, führen wir verallgemeinerte Vektoren ein, die **Vierervektoren**,

$$\vec{x}^\mu = \{ct, x, y, z\}.$$

Für diese Vektoren definieren wir ein neues Skalarprodukt

$$|\vec{x}|^2 = \langle \vec{x}_\mu, \vec{x}^\mu \rangle = \sum_{\mu=0}^3 x_\mu x^\mu = c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2.$$

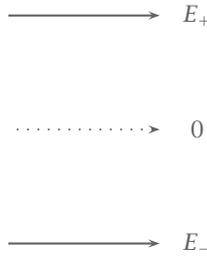
Die Energie  $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}$  und der Impuls  $\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}}$  bilden den Viererimpuls,

$$\vec{p}^\mu = \left\{ \frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right\}.$$

Durch obige Definition ist das Skalarprodukt invariant unter Lorentztransformationen. Insbesondere gilt

$$\langle \hat{S} p_\mu, \hat{S} p^\mu \rangle = \langle p_\mu, p^\mu \rangle = \sum_{\mu=0}^3 p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2 = mc^2 = \text{const.} \quad (*)$$

Insbesondere erhalten wir für  $p = 0$  die Ruheenergie  $E_0 = mc^2$ . Durch Lorentztransformationen kann somit Ruhemasse in kinetische Energie umgewandelt werden und umgekehrt.



14 Energie-Masse-Äquivalenz.

**Bsp** Bei einem Stoßprozess sind  $E_{\text{tot}}$  und  $\vec{p}_{\text{tot}}$  erhalten, aber  $m_{\text{tot}} = \sum_i m_i \neq \text{const.}$  Insbesondere kann kinetische Energie in Ruhemasse und Ruhemasse in kinetische Energie umgewandelt werden. *Zahlenbeispiel:*  $10^{-4}g \hat{=} 2500\text{kWh.}$

Aus (\*) folgt,

$$E = \pm c\sqrt{p^2 + m^2c^2}.$$

Dass zwei Vorzeichen  $\pm$  möglich sind, kündigt die Existenz von Antiteilchen an. Beispielsweise kann für  $E_{\text{kin}} > 2m_e c^2$  bei einem Stoßprozess ein  $e^+, e^-$ -Paar erzeugt werden. ■

## 1-5 Der Spin

Zur Charakterisierung eines Teilchens benötigt man folgende Größen:

$m_{\text{träge}}, m_{\text{schwer}}$	Gravitation
$Q$	Elektromagnetismus
Farbladungen	Starke + Schwache WW
$\vec{p}, \vec{L}, E$	Beschreiben Bewegung des Schwerpunkts
Spin	innerer Freiheitsgrad.

Wir wollen nun der Frage nachgehen wie viele "Sorten" Spin es geben kann. Klassisch wird der Spin eines Objekts oft mit dem Eigendrehimpuls identifiziert. Bei Elementarteilchen mit verschwindender Ausdehnung ( $r \rightarrow 0$ ) versagt jedoch die Vorstellung. Außerdem würde eine klassisch rotierende Ladung ein anderes magnetisches Moment erzeugen als das experimentell beobachtete (siehe  $g$ -Faktor des Elektrons  $g = 2.001 \dots$ ).

In der Quantenmechanik definiert man daher **Spinoperatoren**, die den selben Vertauschungsrelationen wie Drehimpulsoperatoren folgen.

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k, \quad \varepsilon_{123} = \begin{cases} 1, & \text{zyklische Vertauschung von (1,2,3),} \\ -1, & \text{antizyklische Vertauschung,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

**BSP** Im dreidimensionalen Fall erhalten wir,

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar \varepsilon_{xyz} \hat{s}_z. \quad \blacksquare$$

Das skalare Quadrat des Spins ist gegeben durch,

$$\hat{s}^2 = \underbrace{\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2}_{\geq 0}. \quad (*)$$

Die Eigenwerte von  $\hat{s}$  werden mit  $s$  die von  $\hat{s}_z$  mit  $m_s$  bezeichnet. Man kann zeigen dass die gemeinsamen Eigenzustände  $|s, m_s\rangle$  von  $\hat{s}$  und  $\hat{s}_z$  ein VONS bilden. Da die Eigenwerte von  $\hat{s}^2$  positiv sind (siehe (\*)), lassen sie sich als  $s(s+1)$  schreiben, womit wir folgende Eigenwertgleichungen erhalten,

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 |s, m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle, \\ \hat{s}_z |s, m_s\rangle &= m_s \hbar |s, m_s\rangle. \end{aligned}$$

*Bemerkung.* Da  $[\hat{s}^2, \hat{s}_z] = 0$ , sind  $\hat{s}^2$  und  $\hat{s}_z$  zwei gleichzeitig beobachtbare Erhaltungsgrößen.  $\rightarrow$

Wir wollen nun mit Hilfe der Eigenwertgleichungen  $s$  und  $m_s$  konkret berechnen. Dazu halten wir fest,

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 |s, m_s\rangle &= f(s, m_s) |s, m_s\rangle, \\ \hat{s}^2 - \hat{s}_z^2 &= \underbrace{\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2}_{\geq 0}. \end{aligned}$$

Es gilt also  $f(s, m_s) \geq \hbar^2 m_s^2$ , d.h.  $m_s$  hat einen Maximalwert.

Oft ist es geschickt anstatt mit  $\hat{s}_x$ ,  $\hat{s}_y$  oder  $\hat{s}_z$  mit einer der folgenden Linearkombinationen zu rechnen.

**Definition Leiteroperatoren**

$$\hat{s}_+ := \hat{s}_x + i\hat{s}_y, \quad \text{“Aufsteigeoperator”},$$

$$\hat{s}_- := \hat{s}_x - i\hat{s}_y, \quad \text{“Absteigeoperator”}.$$

Als Linearkombinationen von  $\hat{s}_x$  und  $\hat{s}_y$  erfüllen sie die Vertauschungsrelationen,

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_\pm] = 0, \quad \text{d.h. } \hat{s}_\pm \text{ ändert } s \text{ nicht.}$$

$$[\hat{s}_z, \hat{s}_\pm] = \pm \hbar \hat{s}_\pm, \quad \text{d.h. } \hat{s}_\pm \text{ ändert } m_s. \quad \times$$

Betrachten wir nun die zwei Zustände  $\hat{s}_\pm |s, m_s\rangle$  und die Wirkung von  $\hat{s}_z$  und  $\hat{s}^2$ ,

$$\begin{aligned} \hat{s}_z \hat{s}_\pm |s, m_s\rangle &= (\hat{s}_\pm \hat{s}_z + [\hat{s}_z, \hat{s}_\pm]) |s, m_s\rangle = (\hat{s}_\pm \hat{s}_z \pm \hbar \hat{s}_\pm) |s, m_s\rangle \\ &= (\hbar m_s \hat{s}_\pm \pm \hbar \hat{s}_\pm) |s, m_s\rangle = \hbar(m_s \pm 1) \hat{s}_\pm |s, m_s\rangle, \end{aligned}$$

$$\hat{s}^2 \hat{s}_\pm |s, m_s\rangle = \hat{s}_\pm \hat{s}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) \hat{s}_\pm |s, m_s\rangle.$$

Da  $m_s$  einen Maximalwert besitzt, erhalten wir so:

$\hat{s}_+ |s, m_s\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{s}^2$  und  $\hat{s}_z$  mit den Eigenwerten  $\hbar^2 s(s+1)$  bzw.  $\hbar(m_s + 1)$  oder der Nullvektor.

$\hat{s}_- |s, m_s\rangle$  ist Eigenzustand zu  $\hat{s}^2$  und  $\hat{s}_z$  mit den Eigenwerten  $\hbar^2 s(s+1)$  bzw.  $\hbar(m_s - 1)$  oder der Nullvektor.

Betrachten wir die Norm  $\|\hat{s}_\pm |s, m_s\rangle\|^2 = \langle s, m_s | \hat{s}_\mp \hat{s}_\pm |s, m_s\rangle$  und verwenden,

$$\hat{s}_\mp \hat{s}_\pm = (\hat{s}_x \mp i\hat{s}_y)(\hat{s}_x \pm i\hat{s}_y) = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 \pm i[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = \hat{s}^2 - \hat{s}_z^2 \mp \hbar \hat{s}_z$$

erhalten wir,

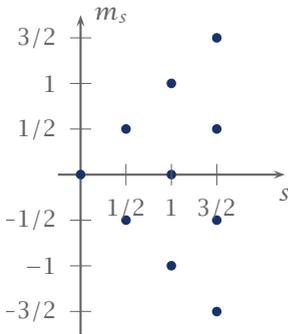
$$\|\hat{s}_\pm |s, m_s\rangle\|^2 = [l(l+1) - m_s(m_s \pm 1)] \hbar^2 \geq 0. \quad (**)$$

D.h.  $-s \leq m_s \leq s$ .

Aufgrund der Einschränkung der möglichen  $m_s$  muss  $\hat{s}_+ |s, s\rangle$  der Nullvektor sein, denn  $\hat{s}_+$  erhöht  $m_s$ . Daher ist  $\|\hat{s}_+ |s, s\rangle\|^2 = 0 \Rightarrow m_{s,\max} = s$ .

Analog folgt  $m_{s,\min} = -s$ . Alle möglichen  $m_s$  haben daher einen ganzzahligen Abstand zu  $l$ , denn die Leiteroperatoren erhöhen bzw. erniedrigen stets um ganze Zahlen und müssen die Gleichung (\*\*) erfüllen.

Daher muss  $-s = m_{s,\min}$  ganzzahligen Abstand zu  $s$  haben. D.h.  $2s$  ist ganzzahlig und daher sind für  $s$  nur halbe oder ganze Zahlen zugelassen.



$s$	0	$\frac{1}{2}$	1	...
$m_s$	0	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-1, 0, 1$	...

15 **Mögliche Wertepaare für  $(s, m_s)$ .**

Teilchen mit geradzahligem Spin  $s = 0, 1, 2, \dots$  werden als **Bosonen** bezeichnet, Teilchen mit halbzahligem Spin  $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$  als **Fermionen**.

*Bemerkung.* Bei dieser Überlegung haben wir nicht über die Interpretation von  $m_s$  und  $s$  gesprochen, sondern nur ausgehend von der Isotropie in 3 Dimensionen mögliche "Arten" von Punktteilchen diskutiert, die diese Isotropie nicht verletzen. Da die Drehimpulsoperatoren Erhaltungsgrößen beschreiben, haben wir ihre Struktur als "Vorbild" für die Spinoperatoren hergenommen.

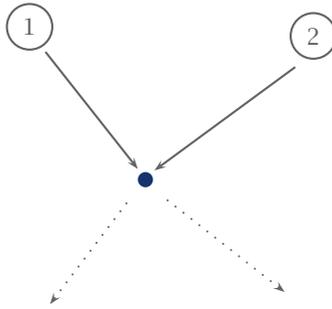
Ein Punktteilchen mit Spin  $s$  kommt also im Prinzip in  $2s + 1$  "Arten" vor. Teilchen, welche in einer (un)geraden Anzahl von "Arten" vorkommen, nennt man **Fermionen (Bosonen)**. In zwei Dimensionen würden die Überlegungen übrigens zu einem anderen Schluss führen, denn dort gibt es ein Kontinuum von Teilchen (Anyonen). Die Spinoperatoren in 2 Dimensionen sind trivial.  $\rightarrow$

## 1-6 Permutationssymmetrie von Bosonen und Fermionen

Aus der Sicht der klassischen Mechanik lassen sich alle Teilchen zu jeder Zeit genau unterscheiden.

Da man den Ort beliebig genau auflösen kann, lässt sich determinieren, ob Teilchen 1 oder Teilchen 2 nach rechts abgelenkt wird.

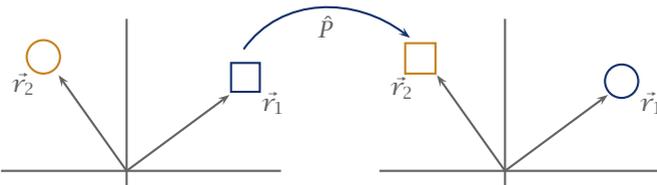
In der Quantenmechanik sind Teilchen 1 und Teilchen 2 bei gleicher Konfiguration jedoch ununterscheidbar, d.h. eine Vertauschung ändert die Physik nicht, weshalb die Streuung im klassischen Sinn einen nicht determinierbaren Ausgang hat, es kommt zu Überlagerungszuständen.



16 Stoßprozess in der klassischen Mechanik.

### ■ Mathematische Formulierung

Wir wollen nun die Vertauschung von Objekten mathematisch formulieren.



17 Vertauschungsoperation bei zwei Objekten.

Dabei ist zu berücksichtigen, dass eine zweifache Vertauschung wieder zum Ausgangszustand zurückführt. Die Eigenwertgleichung des Vertauschungsoperators hat daher die Gestalt,

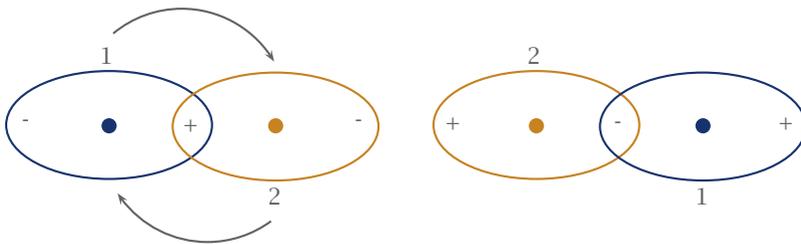
$$\hat{P}(\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)) = p\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1).$$

$$\hat{P}^2(\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)) = p\hat{P}(\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)) = p^2\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2).$$

Es muss gelten  $p = \pm 1$  weshalb wir zwei Arten von Parität erhalten,

$$\hat{P}\Psi = +\Psi, \quad \text{symmetrisch,}$$

$$\hat{P}\Psi = -\Psi, \quad \text{antisymmetrisch.}$$



18 Zur Permutationssymmetrie.

**Bsp** Im Fall von zwei Teilchen ist die Eigenfunktion des Vertauschungsoperators gegeben durch,

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) \pm \Psi_1(\vec{r}_2)\Psi_2(\vec{r}_1)),$$

wobei bei Bosonen ein + und bei Fermionen ein – auftritt. ■

*Bemerkung.* Von Teilchen 1 aus gesehen entspricht die Vertauschung mit Teilchen 2 gerade einer Rotation um  $\pi$ . Wie wir auf S. 97 sehen werden, sind die  $m_s$  Eigenfunktionen von der Form,

$$\Psi \sim e^{im_s\varphi}.$$

Für  $m_s = \frac{1}{2}$  bedeutet das für ein Teilchen, dass man  $\varphi = 4\pi$  (d.h. zwei Umdrehungen) benötigt, um zum gleichen Zustand zurückzukommen. Für zwei Teilchen, die jeweils um  $\pi$  umeinander rotiert werden (Vertauschung), bedeutet das, dass ihre relative Phase  $\exp\left(i\frac{1}{2}(\pi_1 + \pi_2)\right) = -1$  beträgt.  $\rightarrow$

■ **Pauli-Verbot**

Betrachtet man zwei Fermionen, die durch die Wellenfunktionen

$$\Psi_1(\vec{r}_1), \Psi_2(\vec{r}_2),$$

beschrieben werden, am gleichen Ort  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}$ , so gilt aufgrund der Parität für die Zweiteilchenwellenfunktion

$$\Psi_-(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(\vec{r})\Psi_2(\vec{r}) - \Psi_2(\vec{r})\Psi_1(\vec{r})) = 0.$$

Die Wahrscheinlichkeit bei einer Messung beide Teilchen am gleichen Ort vorzufinden ist also Null!

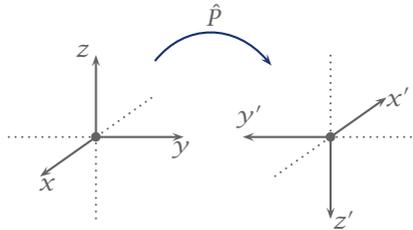
	<b>Fermionen</b>	<b>Bosonen</b>
<b>Parität</b>	$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ ungerade	$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ gerade
<b>Spin</b>	$s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ halbzahlig	$s = 0, 1, 2, \dots$ ganzzahlig
	$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1) = -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1) \Rightarrow \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1) \equiv 0$ Pauli Prinzip	$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1) \neq 0$ (Durchdringen erlaubt)
	$e^-, p^+, n^0, \gamma_e, \mu$ $D, {}^3\text{He}, {}^6\text{Li}, {}^{53}\text{Cr}$	Photon $\gamma$ , Schwache WW $W^\pm, Z$ $H, {}^4\text{He}, {}^{87}\text{Rb}, {}^{52}\text{Cr}, \text{C}_{60}, \text{O}_2$

19 Übersicht Fermionen, Bosonen.

## 1-7 Parität

Mit Parität wird eine Symmetrieeigenschaft eines Systems unter Punktspiegelung bezeichnet. Der Paritätsoperator ist gegeben durch

$$\hat{P} : \vec{r} \mapsto -\vec{r}.$$



20 Paritätsspiegelung eines rechtshändigen Koordinatensystem in ein linkshändiges.

Zweifache Anwendung der Symmetrieoperation führt das System in sich selbst über,

$$\hat{P}^2 = \mathbb{1}, \quad \Rightarrow \text{Eigenwerte } \pm 1.$$

Polare Vektoren ändern unter der Paritätsoperation ihr Vorzeichen,

$$\hat{P}\vec{r} = -\vec{r},$$

$$\hat{P}\vec{p} = -\vec{p},$$

während das Vorzeichen axialer Vektoren invariant ist,

$$\hat{P}\vec{L} = \hat{P}(\vec{r} \times \vec{p}) = -\vec{r} \times -\vec{p} = \vec{L}.$$

Magnetische und elektrische Felder und Dipole transformieren wie folgt,

$$\hat{P}\vec{E} = -\vec{E},$$

$$\hat{d} = e\hat{r} \mapsto -\hat{d}$$

$$\hat{P}\vec{B} = \vec{B},$$

$$\hat{\mu} = e(\hat{r} \times \hat{p}) \mapsto \hat{\mu}$$

Falls  $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ , so ist  $\hat{P}$  eine Symmetrieoperation und die Parität erhalten, d.h. die Physik im Spiegel betrachtet ist nicht von der Realität unterscheidbar.

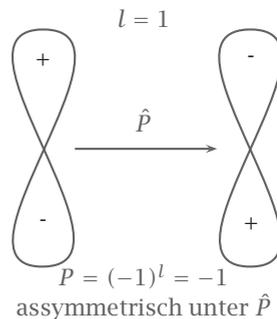
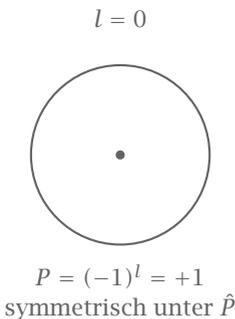
**Bsp** 1.) Die elektromagnetische Wechselwirkung erhält die Parität. Z.B.

$$\hat{H} = \dots \hat{B}^2 + \dots \hat{E}^2$$

$$\hat{H} \sim \vec{d}\vec{E}, \quad \hat{H} \sim \vec{\mu}\vec{B}.$$

2.) Für die schwache Wechselwirkung ist  $[\hat{H}, \hat{P}] \neq 0$ , d.h. die Parität ist keine universelle Symmetrie.

3.) Im Wasserstoff-Atom ist die elektromagnetische Wechselwirkung dominant, daher sind die Wasserstoff-Zustände Eigenfunktionen zu  $\hat{P}$ .



## ■ Paritätserhaltung bei Übergängen von Zuständen

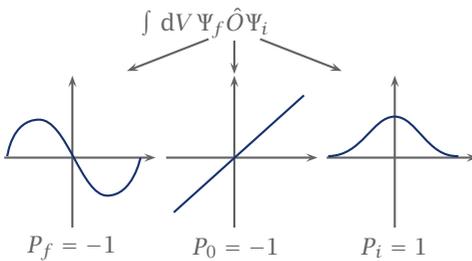
Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang vom Zustand  $i$  in den Zustand  $f$  unter  $\hat{O}$  ist gegeben durch das Matrixelement,

$$A_{i \rightarrow f} = \int dV \Psi_f \hat{O} \Psi_i.$$

Ob ein Übergang möglich ist, kann man an der Symmetrie der Wellenfunktion erkennen. Ist  $\hat{P} \Psi_f \hat{O} \Psi_i = -1$ , so ist die Wellenfunktion ungerade und das Integral verschwindet, der Übergang ist also verboten!

Betrachten wir nun die Eigenwerte  $P_f$ ,  $P_O$  und  $P_i$  von  $\hat{P}$  bezüglich  $\Psi_f$ ,  $\hat{O}$  und  $\Psi_i$ , so ergibt sich als Auswahlkriterium

$$\begin{cases} P_f P_O P_i = 1, & \text{Übergang möglich,} \\ P_f P_O P_i = -1, & \text{Übergang unmöglich.} \end{cases}$$



Für das magnetische und das elektrische Dipolmoment gilt,

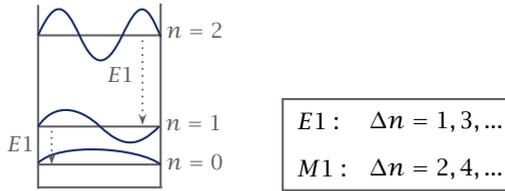
$$\begin{aligned} \vec{d} = e\vec{r} &\mapsto -\vec{d}, & \Rightarrow \vec{H} = \vec{d} \cdot \vec{E} = \vec{d} \cdot \vec{E} \\ \vec{\mu} = e(\vec{r} \times \vec{p}) &\mapsto \vec{\mu}, & \Rightarrow \vec{H} = \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \vec{\mu} \cdot \vec{B}. \end{aligned}$$

Wir erhalten somit die Auswahlregeln

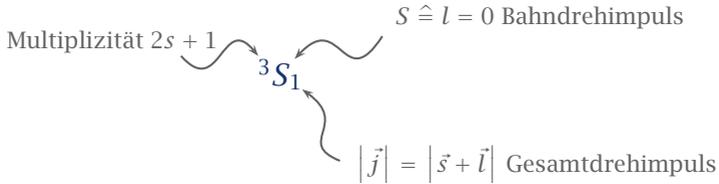
$$\langle f | \vec{d} | i \rangle \neq 0 \Leftrightarrow P_i \neq P_f \quad (\text{E1})$$

$$\langle f | \vec{\mu} | i \rangle \neq 0 \Leftrightarrow P_i = P_f \quad (\text{M1})$$

**BSP** Betrachten wir den Übergang von  ${}^3P_2$  zu  ${}^3S_1$  im Wasserstoffatom.



22 Mögliche Übergänge mit  $\Delta n$  ungerade.



23 Notation der Atom-Zustände.

Die Wahrscheinlichkeit ist proportional zum Dipolmatrixelement

$$\text{Wsk} \propto \left| \langle {}^3S_1 | \hat{d}\hat{E} | {}^3P_2 \rangle \right|^2 = \left| \int dV \Psi_{3S_1}^* \hat{r} \Psi_{3P_2} \right|^2 \neq 0,$$

d.h. der Übergang ist erlaubt. Betrachten wir hingegen den Übergang von  ${}^3P_2$  zu  ${}^3P_0$ , dann ist das Integral antisymmetrisch,

$$\langle {}^3P_0 | \hat{r} | {}^3P_2 \rangle = 0,$$

d.h. ein Übergang aufgrund elektrischer Dipolstrahlung ist nicht erlaubt. ■

### ■ Paritätserhaltung bei Reaktionen

Da die Parität keine kontinuierliche Transformation wie bspw. eine Drehung ist, ist die Parität eine multiplikative Erhaltungsgröße, d.h.  $\prod_i P_i$  ist erhalten und nicht wie bspw.  $\sum_i l_i$  wie bei der Drehung.

Betrachte eine chemische Reaktion

$$a + b \mapsto c + d.$$

Aufgrund der multiplikativen Erhaltung gilt für die Reaktion,

$$P_a P_b \cdot (-1)^l = P_c P_d \cdot (-1)^{l'},$$

wobei  $P_i$  die Eigenparität des Reaktionspartners  $i$  und  $l, l'$  den Bahndrehimpuls vor bzw. nach der Reaktion beschreiben.

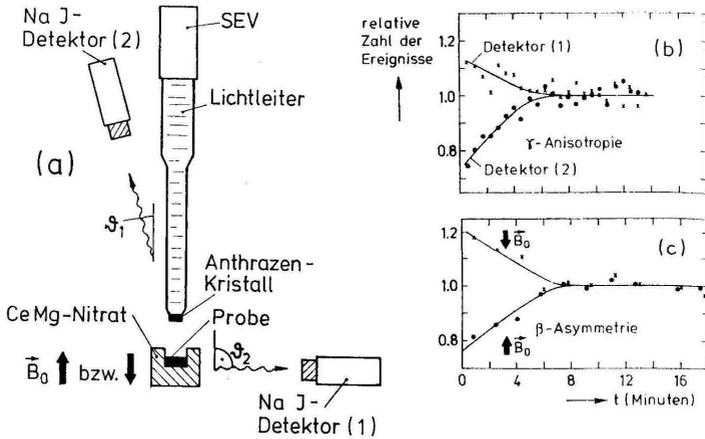
### ■ Paritätsverletzung bei Schwacher Wechselwirkung

Die physikalischen Gesetze, welche die starke und elektromagnetische Wechselwirkung beschreiben, sind invariant unter einer räumlichen Spiegelung des betrachteten Systems, dies wurde in der ersten Hälfte des 20. Jhd. in einer Vielzahl von Experimenten bestätigt. Jedoch äußerten T.D. Lee und C.N. Yang 1956 Bedenken, dass die Paritätsinvarianz auch für die schwache Wechselwirkung gilt und schlugen Experimente zur Überprüfung vor.

1957 wurde im Experiment von C.S. Wu die Paritätsverletzung der Schwachen Wechselwirkung nachgewiesen. Dabei wurde der  $\beta$ -Zerfall von  $^{60}\text{Co}$  untersucht,

$$n \mapsto p^+ + e^- + \bar{\nu}_e.$$

Es wurde festgestellt, dass es bei der Emission der Elektronen relativ zur Kernspinachse eine Vorzugsrichtung gibt. D.h. die schwache Wechselwirkung koppelt nur an "linkshändige" Elektronen (z.B. Spin  $\downarrow$ ).



G. Otter, R. Honecker, Atome -Moleküle -Kerne: Band II, Molekül-und Kernphysik, S. 378

- 24 Experimentelle Anordnung des Wu-Experiments. b) Zählraten der  $\gamma$ -Detektoren. c) relative  $\beta^-$ -Zählraten für zwei entgegengesetzte  $\vec{B}_0$ -Richtungen.

## 1-8 Zeitspiegelung

Die Zeitspiegelung ist eine weitere diskrete Symmetrieoperation, die den Ablauf der Zeit umkehrt.

$$\begin{aligned}
 T : t &\rightarrow -t, & \vec{x} &\rightarrow \vec{x}, \\
 \vec{p} &\rightarrow -\vec{p}, & \vec{L} &\rightarrow -\vec{L}, \\
 \vec{E} &\rightarrow \vec{E}, & \vec{B} &\rightarrow -\vec{B}.
 \end{aligned}$$

Die Newtonschen Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik enthalten nur 2. Ableitungen nach der Zeit. Daher ist die klassische Mechanik invariant unter Zeitspiegelung so lange keine Dämpfung auftritt.

Die Maxwell Gleichungen enthalten ebenfalls nur 2. Ableitungen nach der Zeit und sind somit ebenfalls invariant.

Wir wollen nun den Zeitspiegelungsoperator in der Quantenmechanik "naiv" durch

$$\hat{T} : \Psi(x, t) \rightarrow \Psi(x, -t),$$

definieren und die Schrödingergleichung betrachten.

$$i\hbar \frac{\partial \hat{T}\Psi(x, t)}{\partial t} \stackrel{!}{=} \hat{H}\hat{T}\Psi(x, t) \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)}\Psi(x, -t) = \hat{H}\Psi(x, -t).$$

Wir sehen, dass die zeitgespiegelte Wellenfunktion  $\hat{T}\Psi$  die Schrödingergleichung *nicht* erfüllt. Die korrekte Definition des Zeitspiegelungsoperators ist daher,

$$\hat{T} : \Psi(x, t) \mapsto \Psi^*(x, -t).$$

Nun erfüllt  $\hat{T}\Psi$  die Schrödingergleichung. Aufgrund der komplexen Konjugation ist  $\hat{T}$  kein unitärer Operator und besitzt weder Eigenwerte noch Eigenfunktionen!

*Bemerkungen.* 1.) Es ist nicht möglich,  $\hat{T}$  nur durch einen Wechsel des Bezugssystems zu realisieren.

2.) Experimentell wurde  $\hat{T}$  durch Reversibilitätsexperimente getestet. Bei der schwachen Wechselwirkung ( $K^0$ -Zerfall) wurden Hinweise auf eine  $\hat{T}$ -Verletzung gefunden.  $\hat{T}$  ist also keine universelle Symmetrie.  $\rightarrow$

## 1-9 Ladungsumkehr

Die innere Symmetrie basiert auf Konventionen. Z.B. ist die Ladung des Elektrons negativ definiert, während die des Protons positiv definiert ist. Die **Ladungsumkehr**  $\hat{C}$  beschreibt die Umkehrung dieser Konvention:

$$\hat{C} \left| \underbrace{m, \vec{p}, s, m_s}_{\text{äußere}}, \underbrace{q, B, L, S \dots}_{\text{innere Eigenschaften}} \right\rangle = \underbrace{e^{i\phi}}_{\text{Phase}} |m, \vec{p}, s, m_s, -q, -B, -L, -S, \dots\rangle$$

$q$  steht hier für die Ladung bezüglich der elektromagnetischen Wechselwirkung, während  $B$  und  $S$  Ladungen bezüglich der starken Wechselwirkung und  $L$  Ladung bezüglich der schwachen Wechselwirkung sind. Man spricht hier auch von Farbladungen.

Die Ladungsumkehr spiegelt sowohl elektrische als auch magnetische Felder,

$$\vec{E} \mapsto -\vec{E}, \quad \vec{B} \mapsto -\vec{B}.$$

**BSP** Betrachten wir ein linkshändiges Neutrino  $\nu_L$  unter Ladungsumkehr

$$\hat{C} |\nu_L\rangle = e^{i\phi} |\bar{\nu}_L\rangle,$$

ergibt sich ein linkshändiges Antineutrino. Es existieren jedoch keine linkshändigen Antineutrinos bzw. sie koppeln nicht mit der schwachen Wechselwirkung. Es findet also eine vollständige Symmetriebrechung bei der schwachen Wechselwirkung statt. Für  $\hat{C}\hat{P}$  gilt

$$\hat{C}\hat{P} |\nu_L\rangle = e^{i\phi'} |\bar{\nu}_R\rangle.$$

$\bar{\nu}_R$  existiert und koppelt mit der Schwachen Wechselwirkung. Jedoch wird auch  $\hat{C}\hat{P}$  beim  $K^0$ -Zerfall verletzt und ist daher ebenso keine universelle Symmetrie.

■

Für neutrale Teilchen gilt,

$$\hat{C} |m, \vec{p}, s, m_s, q = 0, B = 0, \dots\rangle = e^{i\phi} |m, \vec{p}, s, m_s, q = 0, B = 0, \dots\rangle$$

Es muss daher gelten  $\hat{C}^2 = \mathbb{1}$  und daher sind die Eigenwerte von  $\hat{C}$  gerade  $e^{i\phi} = \pm 1$ . Wir erhalten somit gerade und ungerade Ladungsparität.

**BSP** Da  $\hat{C}\vec{E} = -\vec{E}$  und  $\hat{C}\vec{B} = -\vec{B}$  besitzt das Photon eine ungerade Ladungsparität.

■

Wir erhalten dadurch Auswahlregeln, die uns bei Aussagen über Zerfallsprozesse unterstützen.

**BSP** Ein neutrales  $\pi^0$  zerfällt durch Emission von 2 Photonen,

$$\begin{aligned} \pi^0 &\rightarrow 2\gamma, \\ \hat{C} |\pi^0\rangle &= + |\pi^0\rangle. \end{aligned}$$

Die Emission von einem oder drei Photonen ist daher verboten. ■

## 1-10 Zusammenfassung diskrete Symmetrien

	$\hat{P}$	$\hat{T}$	$\hat{C}$
$\vec{x}$	$-\vec{x}$	$\vec{x}$	$\vec{x}$
$\vec{p}$	$-\vec{p}$	$-\vec{p}$	$\vec{p}$
$\vec{L}$	$\vec{L}$	$-\vec{L}$	$\vec{L}$
$\vec{E}$	$-\vec{E}$	$\vec{E}$	$-\vec{E}$
$\vec{B}$	$\vec{B}$	$-\vec{B}$	$-\vec{B}$
$\vec{q}$	$\vec{q}$	$\vec{q}$	$-\vec{q}$

Bisher wurde die  $\hat{C}\hat{P}\hat{T}$  Symmetrie als *grundlegende Symmetrie* identifiziert. Es ist kein Experiment bekannt bei dem eine  $\hat{C}\hat{P}\hat{T}$  Symmetriebrechung einer Wechselwirkung nachgewiesen werden kann. D.h. Teilchen und Antiteilchen haben gleiche Masse, gleiche Lebensdauern und gleich starke aber entgegengesetzte magnetische Momente bzw. elektrische Ladungen.

# 2 Kerne- und Elementarteilchen

Das Verständnis vom Aufbau der Materie basiert auf 4 Schlüsselversuchen der Kernphysik.

- 1.) **Rutherford Streuung** (elastische Streuung). Rutherford<sup>2</sup> beschoss eine Goldfolie mit einem dünnen Strahl von Heliumkernen und analysierte die Winkelabhängigkeit. Zu diesem Zeitpunkt ging man noch davon aus, dass das Atom selbst eine homogene Ladungsverteilung aufweist. Die Messung zeigte jedoch auch bei großen Winkeln noch deutliche Streuung, was Rutherford auf einen sehr kleinen Kerndurchmesser ( $\approx 1\text{fm} = 10^{-15}\text{m}$ ) schließen lies. Die Formulierung des Rutherford'schen Atommodells revolutionierte die damalige Modellvorstellung.

Präzise elastische Streuversuche liefern Aufschluss über Kerngröße und Dichteverteilung.

- 2.) **Inelastische Streuung**. Verfeinert man das Experiment der Rutherford Streuung dahingehend, dass man neben der Winkelablenkung auch die Energie der gestreuten Teilchen misst, kann man feststellen, welche Anregungszustände ein Kern hat.

Bei höheren Energien, als die bei der Rutherfordstreuung notwendig sind. Stellt man ähnlich wie in der Optik bei bestimmten Energien Resonanz fest, was darauf schließen lässt, dass die Protonen bzw. Neutronen eine innere Struktur d.h. Anregungszustände haben, die auf die Quarks schließen lassen.

- 3.) **Massenspektroskopie**. Wir kennen bereits die Energie-Masse-Äquivalenz  $E = mc^2$ . Das heißt aber auch, dass die Masse eines Teilchens Informationen über seine Bindungen enthält. Dies nutzt man bei der Massenspektroskopie aus, um durch hochpräzise Massenmessung Informationen über den Aufbau der Kerne und ihrer Bindungszustände zu erhalten. (Siehe Literaturaufgabe Übung 3)

---

<sup>2</sup>Ernest Rutherford, 1. Baron Rutherford of Nelson, OM (\* 30. August 1871 in Brightwater bei Nelson/Neuseeland; † 19. Oktober 1937 in Cambridge) war ein neuseeländischer, in England wissenschaftlich arbeitender Atomphysiker und Nobelpreisträger für Chemie des Jahres 1908.

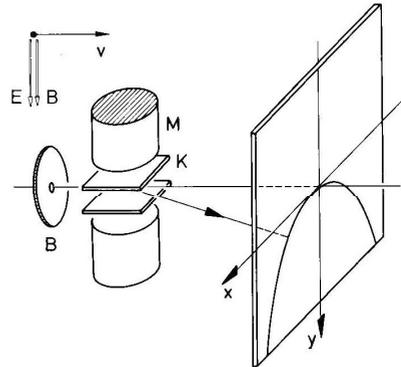
- 4.) **Experiment von C.S. Wu.** In den 50ern wurde anhand des  $\beta$ -Zerfalls von  $^{60}\text{Co}$  nachgewiesen, dass die Paritätssymmetrie für die schwache Wechselwirkung gebrochen ist.

## 2-1 Rutherford Streuung

Mitte des 19. Jahrhunderts gab es einen Innovationsschub, der erstmals den Bau annehmbarer Vakuumpumpen ermöglichte. 1859 konstruierte Plücker die Gasentladungsröhre und untersuchte als erster Gasentladungen, gefolgt von Goldstein 1886.

1897 untersuchte Thomson<sup>3</sup> Kathodenstrahlen  $\hat{=}$  Elektronenstrahlen mit Hilfe der Thomson'schen Parabelmethode. Dabei verwendete er  $E$ - und  $B$ -Felder, um den Strahl abzulenken.

- 25 **Parabelmethode, schematische Darstellung.** Der durch die Blende  $B$  kollimierte Ionenstrahl wird durch den Magneten  $M$  und den Kondensator  $K$  in  $x$ - und  $y$ -Richtung abgelenkt. Bei größerer Entfernung des Schirms vom Kondensator werden die Parabeln durch die Projektion entsprechend verzerrt.



*H. Haken, H. C. Wolf, Atom- und Quantenphysik, S. 30*

Der Teilchenstrahl durchquert einen Kondensator der Länge  $L$ , der von einem Magneten umgeben ist. Elektrisches und Magnetisches Feld zeigen in  $y$ -Richtung. Durch das elektrische Feld wirkt auf das Elektron die Coulombkraft in  $y$ -Richtung,

$$\vec{F} = e\vec{E} \Rightarrow \ddot{y} = \frac{e}{m}E \Rightarrow y = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} t^2 = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} \left( \frac{L}{v} \right)^2 = \frac{eEL^2}{4} \frac{1}{\frac{1}{2}mv^2} \sim \frac{1}{E_{\text{kin}}} \quad (*)$$

Daher wird das Elektrische Feld auch "Energiefilter" genannt.

<sup>3</sup>Sir Joseph John Thomson; \* 18. Dezember 1856 in Cheetham Hill bei Manchester; † 30. August 1940 in Cambridge) war ein britischer Physiker und Nobelpreisträger Physik des Jahres 1906

Durch das magnetische Feld wirkt auf das Elektron die Lorentzkraft in  $x$ -Richtung,

$$\vec{F} = e(\vec{v} \times \vec{B}) \Rightarrow F_x = e v B = F_Z = \frac{m v^2}{r}$$

$$\Rightarrow \text{Kreisbahn mit Radius } r = \frac{m v}{e B}.$$

Mit  $x \ll r$  erhalten wir so

$$a = \frac{e v B}{m} \Rightarrow x = \frac{1}{2} a t^2 = \frac{1}{2} \frac{e v B}{m} \frac{L^2}{v^2} = \frac{e B L^2}{2} \frac{1}{m v} \sim \frac{1}{p}.$$

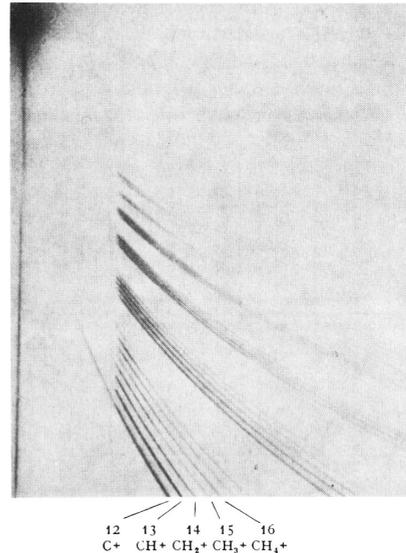
Daher wird das magnetische Feld auch "Impulsfilter" genannt. Lösen wir den Term nach  $v$  auf und setzen in (\*) ein, erhalten wir

$$y = \frac{2E}{L^2 B^2} \frac{m}{e} x^2,$$

unabhängig von der Geschwindigkeit  $v$ .

- 26 Zerlegung eines Gemisches von Kohlenwasserstoff-Ionen mit der Thomsonschen Parabelmethode. Zur Eichung benutzt man Ionen bekannter Masse. Die Intensität der einzelnen Parabelstücke entspricht der relativen Häufigkeit der betreffenden Ionen des Gemisches.

H. Haken, H. C. Wolf, Atom- und Quantenphysik, S. 31



Mit diesem Versuch war auch erstmals die spezifische Ladung messbar,

$$\frac{e}{m} = 1.75 \cdot 10^{11} \frac{\text{C}}{\text{kg}}.$$

*Bemerkung.* Für große Geschwindigkeiten  $v$  (d.h. kleine  $x$  und  $y$ ) ergibt sich eine relativistische Abweichung

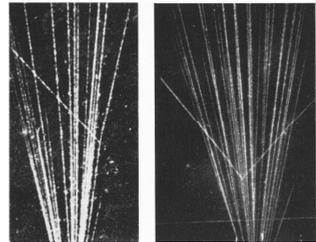
$$y = \frac{2E}{L^2 B^2} \frac{m}{e} x^2 \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Sie wurde bereits 1902 von Kaufmann<sup>4</sup> beobachtet, jedoch ohne Erklärung.  $\rightarrow$

Kurz darauf (1908) erhielt Rutherford den Nobelpreis für Chemie für die Entdeckung des  $\alpha$ -Zerfalls. Die Schwierigkeit hierbei war der Nachweis, dass  $\alpha$ -Teilchen in der Tat Heliumkerne sind. Aufgrund ihrer hohen Geschwindigkeit ließen sie sich durch elektrische Felder nicht maßgeblich ablenken. Verwendet man jedoch eine Nebelkammer gefüllt mit Helium, sieht man, dass beim Stoß der  $\alpha$ -Teilchen mit den Teilchen in der Nebelkammer ein  $90^\circ$  Winkel gebildet wird, d.h.  $\alpha$ -Teilchen und Helium haben dieselbe Masse.

27 **Nebelkammer-Aufnahme von  $\alpha$ -Teilchen.** Man sieht Stoßprozesse mit dem Füllgas, links mit Wasserstoff, rechts mit Helium. Im Wasserstoff erleidet das treffende  $\alpha$ -Teilchen nur eine geringe Ablenkung, bei Helium dagegen ist der Winkel zwischen Bahnen von Streuteilchen und gestoßenem Atom  $90^\circ$ , weil beide die gleiche Masse haben.

*H. Haken, H. C. Wolf, Atom- und Quantenphysik, S. 43*



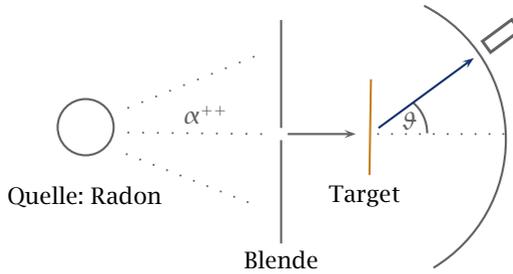
Rutherford verwendete daraufhin in seinen Streuexperimenten  $\alpha$ -Teilchen, die er auf eine Goldplatte schoß. Er beobachtete, unter welchem Winkel  $\vartheta$  wie viele Ereignisse registriert werden.

Zum Zeitpunkt der Durchführung des Experiments ging man noch vom Thomsonschen Atommodell aus.

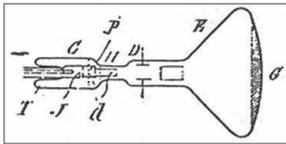
- 1.) Elektronen sind in allen Elementen enthalten.
- 2.) Die Ladungsverteilung im Atom ist homogen, Protonen, Neutronen und Elektronen verteilen sich so, dass die elektrostatische Anziehung minimiert wird.

---

<sup>4</sup>Walter Kaufmann (\* 5. Juni 1871 in Elberfeld; † 1. Januar 1947 in Freiburg im Breisgau) war ein deutscher Physiker.



28 Versuchsaufbau: Rutherfordstreuung.



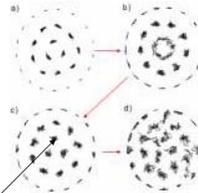
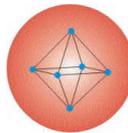
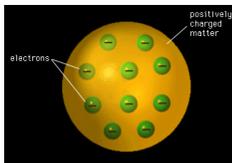
"Could anything at first sight seem more impractical than a body which is so small that its mass is an insignificant fraction of the mass of an atom of hydrogen?"  
 - J.J. Thomson.



Joseph John Thomson (1856 -1940)

Thomsons Atommodell

Schalenmodell

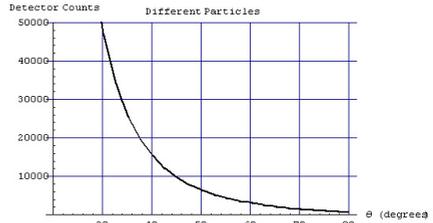
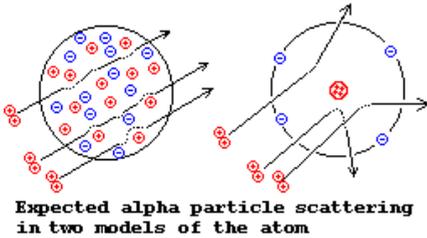


Innere Elektronen sind für Chemie verantwortlich

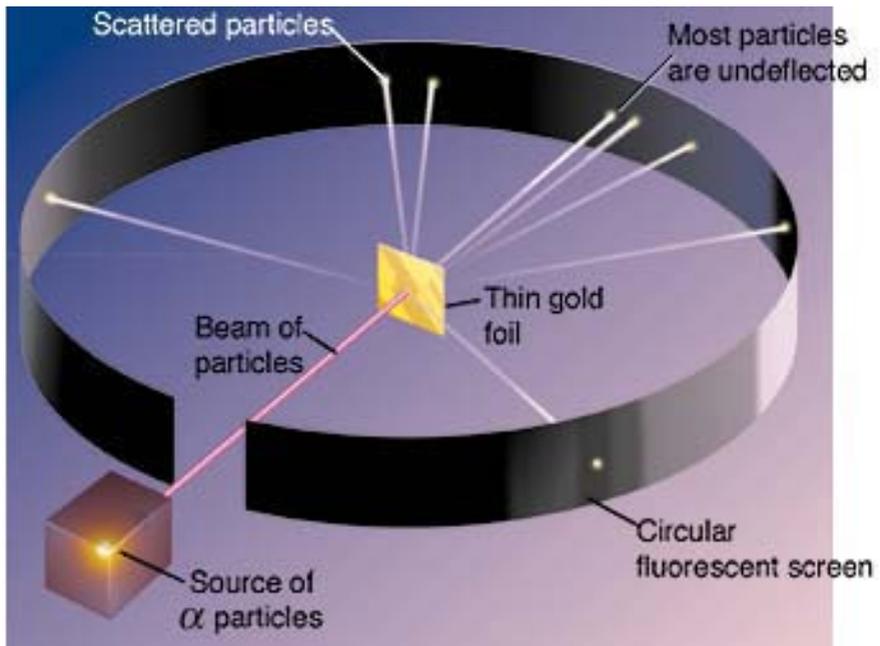
29 Das Elektron als elementarer Baustein der Materie.

Rutherford stellte in seinem Versuch jedoch auch bei großen Winkeln  $\vartheta > 90^\circ$  noch Ablenkung fest, was darauf schließen ließ, dass der Atomkern einen viel kleineren Radius als das Atom selbst haben muss.

### Rutherford's Experiment



- 30 Modellvorstellungen zur  $\alpha$ -Teilchen Streuung (links) und real gemessene Intensität in Abhängigkeit vom Winkel (rechts).



## ■ Rutherford'sche Streuformel

Um die Ergebnisse zu formulieren benötigen wir noch einige Begriffe.

**Definition** Der *Wirkungsquerschnitt*  $\sigma$  ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion. Die Zahl der Reaktionen ist gegeben durch,

$$N = j \cdot n \cdot \sigma,$$

wobei  $j$  die Stromdichte der einfallenden Teilchen und  $n$  die Zahl der Targetteilchen bezeichnet.  $\sigma$  hat hier die Einheit einer Fläche.  $\times$

Wir sehen, dass  $\sigma$  die relevanten Informationen über die einzelnen Reaktionen enthält.

*Bemerkung.* Für ein Target aus Kugelteilchen ist  $\sigma = \pi R^2$ . Bei Coulomb-Stößen geht jedoch die geometrische Anschauung verloren, denn die Wechselwirkung hat  $\infty$ -Reichweite. D.h. der Wirkungsquerschnitt divergiert im Raum. Man geht daher zu differentiellen Größen über,

$$\dot{N}(\vartheta) = j \cdot n \cdot \sigma(\vartheta) \Delta\Omega,$$

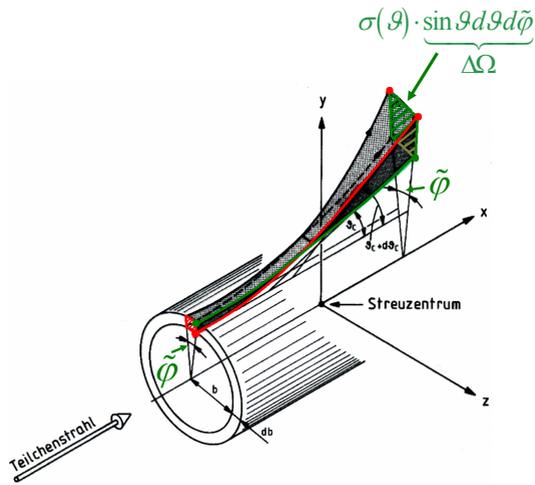
wobei  $\sigma$  hier einen differentiellen Wirkungsquerschnitt bezeichnet und  $\Delta\Omega$  einen Raumwinkel.  $\rightarrow$

Rutherford hat die Winkelabhängigkeit des differentiellen Wirkungsquerschnitts empirisch bestimmt. Um den Ausdruck für  $\sigma$  theoretisch herzuleiten, verwendet man Drehimpulserhaltung,

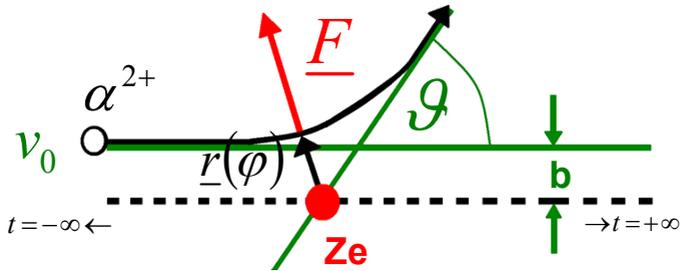
$$\begin{aligned} \vec{L} &= \mu (\vec{r} \times \vec{v}) = \text{const}, & (*) \\ \Rightarrow |\dot{\vec{L}}| &= \mu r^2 \frac{d\varphi}{dt} = \mu v_0 b, \end{aligned}$$

sowie Impulserhaltung,

$$|\vec{p}| = m v_0 = \text{const.}$$



31 Zur Definition des differentiellen Wirkungsquerschnitts.



32 Zur Herleitung der Winkelabhängigkeit.

Die Bewegung findet nur in der  $x, y$ -Ebene statt, welche  $\perp$  zu  $\vec{L}$  ist. Setze  $a := \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0}$  und berechne  $p_y$ ,

$$\begin{aligned}\dot{v}_y &= \frac{1}{\mu} F_y = \frac{1}{\mu} \frac{a}{r^2} \sin \varphi \stackrel{*}{=} \frac{1}{\mu} a \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} \frac{1}{v_0 b}. \\ \Rightarrow v_y &= \int_{-\infty}^{\infty} \dot{v}_y dt = \int_0^{v_0 \sin \vartheta} dv_y = v_0 \sin \vartheta = \frac{a}{\mu v_0 b} \int_{-\infty}^{\infty} \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} dt \\ &= \frac{a}{\mu v_0 b} \int_0^{\pi - \vartheta} \sin \varphi d\varphi = \frac{a}{\mu v_0 b} (1 + \cos \vartheta).\end{aligned}$$

Wir erhalten somit,

$$\cot \frac{\vartheta}{2} = \frac{1 + \cos \vartheta}{\sin \vartheta} = \mu v_0^2 \frac{b}{a} = 2E_0 \frac{b}{a} = 2 \frac{E_0}{V_{\text{pot}}(b)},$$

d.h. wir können  $\vartheta$  in Abhängigkeit von  $b$  darstellen. Invertieren ergibt,

$$b(\vartheta) = \frac{D}{2} \cot \frac{\vartheta}{2}, \quad D = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E_0}.$$

Mit  $\sigma(\vartheta) = \frac{b}{\sin \vartheta} \left| \frac{db}{d\vartheta} \right|$  erhalten wir so für den differentiellen Wirkungsquerschnitt,

$$\sigma(\vartheta) = \left( \frac{D}{4} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \left( \frac{\vartheta}{2} \right)}.$$

Die  $\sin^{-4} \left( \frac{\vartheta}{2} \right)$  Proportionalität ist charakteristisch für die Rutherford Streuung.

Im Streuexperiment erwartet man also

$$N(\vartheta) = j \cdot n \cdot C \cdot \Delta\Omega \sin^{-4} \left( \frac{\vartheta}{2} \right).$$

Mithilfe von  $C$  kann man  $\frac{Z_1 Z_2}{E_0}$  bestimmen.

### ■ Kernradienbestimmung

Bei der Messung von  $\sigma$  wird in der Regel der Winkel  $\vartheta$  variiert unter dem der Detektor misst. In großen Beschleunigeranlagen kann man auch den Winkel konstant halten und die kinetische Energie variieren, um die  $\frac{1}{E_{\text{kin}}}$ -Abhängigkeit zu

verifizieren. Die Formel für den differentiellen Wirkungsquerschnitt wurde experimentell für

$$E_{\text{kin}} < 5 \text{ MeV}, \quad \vartheta < 150^\circ,$$

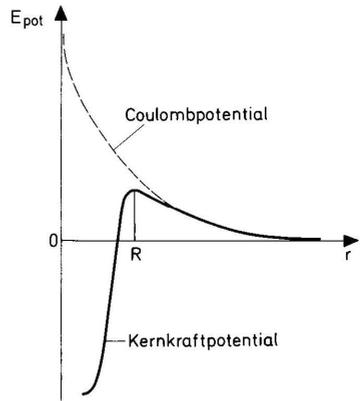
bestätigt. Für den Stoßparameter  $b$  gilt,

$$b(\vartheta) = \frac{D}{2} \cot \frac{\vartheta}{2} < 6 \cdot 10^{-15} \text{ m}.$$

Wir erhalten so eine obere Grenze für den Kernradius.

$$R \approx r_0 \cdot A^{1/3}, \quad r_0 = 1.3 \cdot 10^{-15} \text{ m},$$

wobei  $A$  für die Nukleonenzahl steht. Der Kerndurchmesser liegt also im Femtometerbereich und damit 5 Größenordnungen unter dem Atomdurchmesser. Außerdem sehen wir, dass bei großer Entfernung vom Kern das Potential gerade wie ein Coulomb-Potential aussieht.



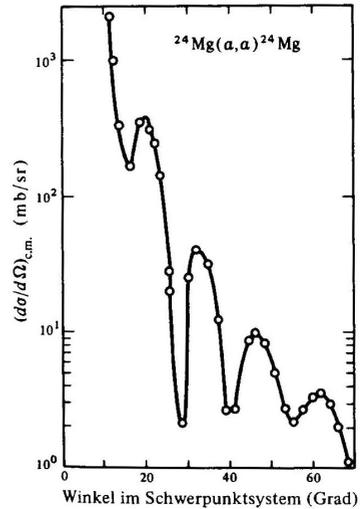
### 33 Kernkraft- und Coulombpotential.

*H. Haken, H. C. Wolf, Atom- und Quantenphysik, S. 49*

Wir wollen nun untersuchen, wie wir durch Messungen von  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  Aussagen über die Form des Potentials machen können.

Ähnlich wie bei Beugungsexperimenten in der Optik, tritt für bestimmte Winkel  $\vartheta$  Resonanz im Kern auf und wir erhalten Beugungsmaxima. Verwenden wir verschiedene Teilchen als Streuteilchen, erhalten wir Informationen über die verschiedenen Wechselwirkungen (stark, schwach, elektromagnetisch).

- 34 **Differentieller Wirkungsquerschnitt für die elastische Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an  $^{24}\text{Mg}$ .**  
*H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 171*



Für geladene Streuteilchen muss die Energie hoch genug sein, um den Kern selbst zu erreichen und zu untersuchen. Um Details im Kern aufzulösen, muss aber auch ein neutrales Streuteilchen genug Energie haben. Im Bild der Optik muss die de Broglie Wellenlänge des Streuteilchens viel kleiner sein als der Kern, um die detaillierte Struktur zu “mikroskopieren”.

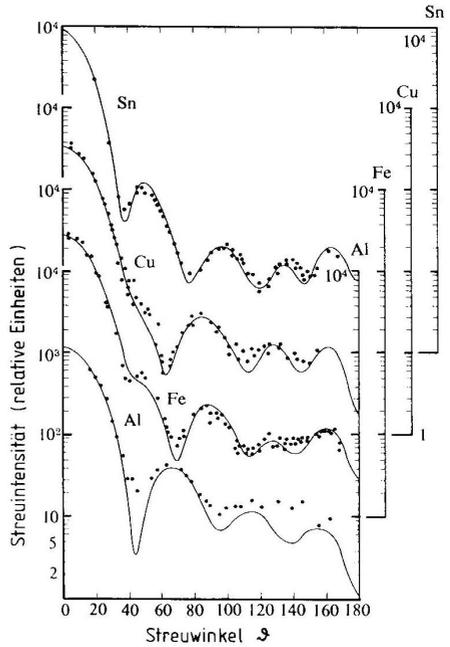
- BSP**
- 1.) Neutronen erfahren keine Coulomb Wechselwirkung. Das Beugungsmuster kommt nur durch starke Wechselwirkung zustande.
  - 2.) Elektronen erfahren nur Coulomb-Wechselwirkung.
  - 3.) Die Messergebnisse zeigen, dass die Ladungsverteilung von der Atommasse abhängt. Ist das Wasserstoffatom noch singular, so hat Silizium eine homogene Dichteverteilung. Schwere Kerne haben in etwa alle die gleiche homogene Kerndichte.

*Bemerkung.* Streuversuche kann man als Mikroskopie mit Materiewellen verstehen. Es gelten die selben Auflösungsgesetze wie in der optischen Mikroskopie, d.h. die Auflösung  $\hat{=}$  Wellenlänge, wobei hier die De-Broglie Wellenlänge

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p},$$

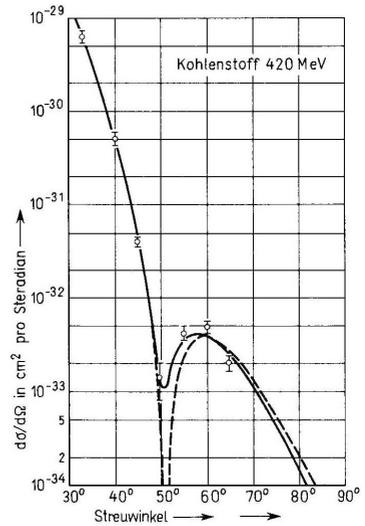
- 35 Winkelverteilung von an Atomkernen gestreuten Neutronen mit  $2.2 \cdot 10^{-12} \text{J} (14 \text{MeV})$  Primärenergie. Die durchgezogenen Kurven sind mit dem Modell berechnet.

K. Stierstadt, Physik der Materie, S. 91

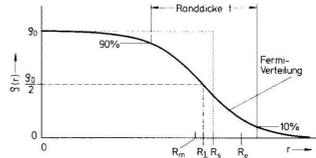
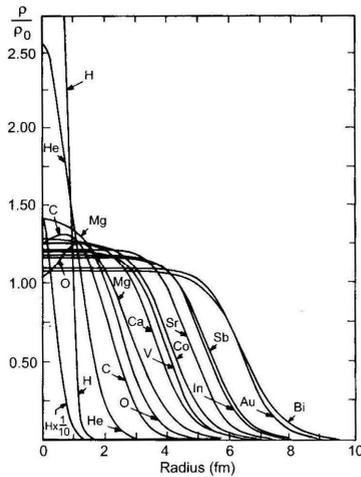
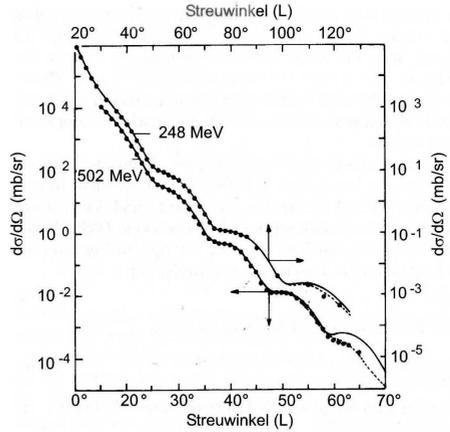


- 36 Winkelverteilung elastisch gestreuter Elektronen an Kohlenstoff.

T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, S. 27



- 37 **Elektronenstreuung an Uran, gemessen bei zwei Energien.**  
*K. Bethge, G. Walter, B. Wiedemann, Kernphysik - Eine Einführung, S. 42*



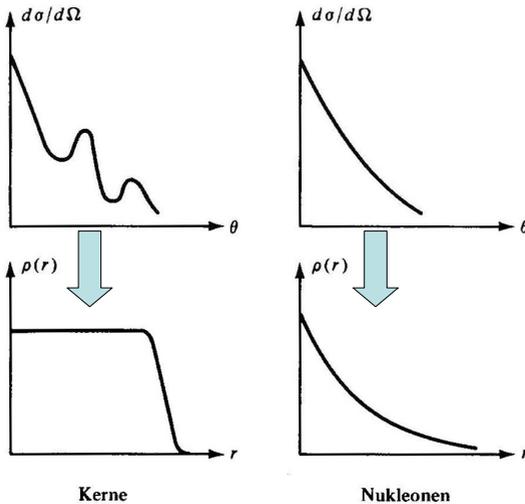
*K. Bethge, G. Walter, B. Wiedemann, Kernphysik - Eine Einführung, S. 44*

- 38 **Radiale Ladungsverteilungen einiger Atomkerne. Diese Daten werden aus der Inversion der Streudaten gewonnen, ähnlich wie man aus dem Fernfeldbeugungsbild in der Optik das beugende Objekt rekonstruieren kann.**

mit dem relativistischen Impuls  $p$  gemeint ist. Für eine vorgegebene  $E_{\text{kin}}$  erhalten wir aus dem  $p$ -Skalarprodukt,

$$\begin{aligned}
 E^2 &= p^2 c^2 + m_e^2 c^4 = (E_{\text{kin}} + m_e c^2)^2. \\
 \Rightarrow p &= \frac{1}{c} \sqrt{(E_{\text{kin}} + m_e c^2)^2 - m_e^2 c^4} = \frac{1}{c} \sqrt{E_{\text{kin}}^2 + 2E_{\text{kin}} m_e c^2 + m_e^2 c^4 - m_e^2 c^4} \\
 &= \frac{1}{c} \sqrt{E_{\text{kin}}(E_{\text{kin}} + 2m_e c^2)}, \\
 \Rightarrow \lambda_{dB} &= \frac{hc}{\sqrt{E_{\text{kin}}}\sqrt{E_{\text{kin}} + 2m_e c^2}}.
 \end{aligned}$$

Für  $E_{\text{kin}} = 100\text{MeV}$  ergibt sich  $\lambda_{dB} \approx 10^{-14}\text{m} = 10\text{fm}$ , was noch zu wenig für Kernauflösung ist. Bei der Verwendung von Elektronen werden aufgrund der geringen Masse für Kernauflösung sehr hohe Energien benötigt. Während bei  $\alpha$ -Teilchen bereits eine Energie von  $5\text{MeV}$  ausreicht, sind bei Elektronen  $500\text{MeV}$  notwendig.  $\infty$



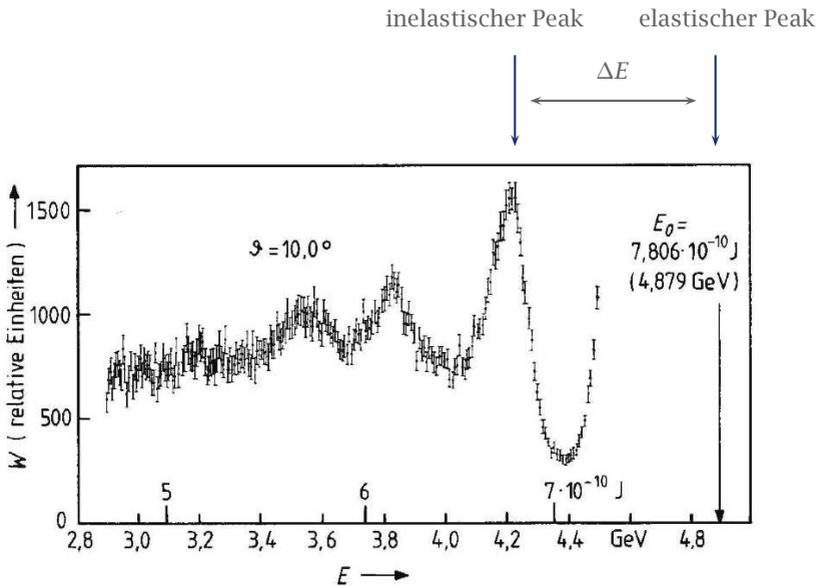
H. Frauenfelder, E. M. Henley, Teilchen und Kerne: Die Welt der subatomaren Physik, S. 163

- 39 Wirkungsquerschnitt und Ladungsverteilung. Das Beugungsminimum im Wirkungsquerschnitt der schweren Kerne weist auf die wohldefinierte Kernoberfläche hin. Nukleonen dagegen besitzen eine langsam abnehmende Ladungsdichte an der Oberfläche.

## 2-2 Inelastische Streuung, Quarks und QCD

Geht man zu Streuteilchen mit noch höherer Energie über und betrachtet die verbleibenden Energie der gestreuten Teilchen, kann man Aufschluss über die innere Struktur der Kerne und Nukleonen erhalten. Wir betrachten dazu die Energie der gestreuten Teilchen als Funktion der Energie.

Bei Protonen kann man so feststellen, dass innere Anregungszustände existieren (vgl. Spektrallinien) und diese daher eine innere Struktur besitzen, also aus kleineren Teilchen aufgebaut sind.

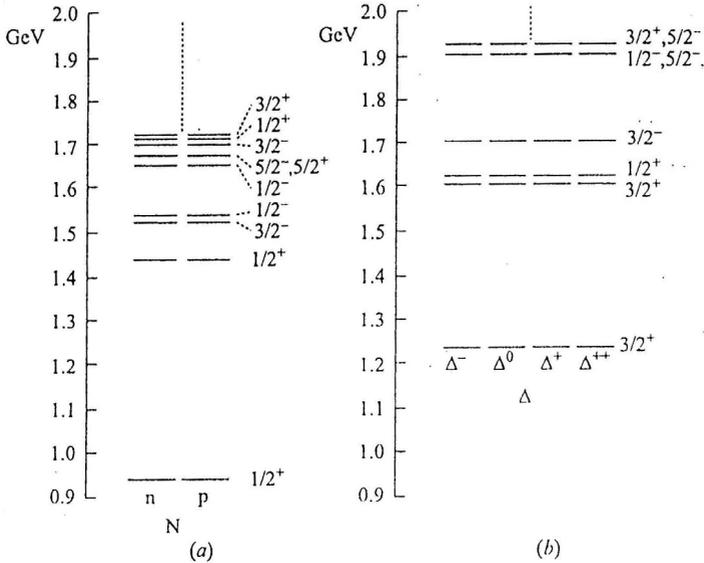


K. Stierstadt, Physik der Materie, S. 28

- 40 Nachweis der inneren Struktur von Protonen durch Streuung von hochenergetischen Elektronen. Bei den inelastischen Peaks ist jeweils eine Energie  $\Delta E$  vom Target absorbiert worden, um in einen angeregten Zustand überzugehen.

Für bestimmte Energien der streuenden Teilchen tritt Resonanz auf, d.h. im Proton werden Energieniveaus mit dieser bestimmten Energie angeregt. Übersetzen wir das Energiemuster in ein Anregungsschema, sehen wir, dass  $p^+$  und

$n^0$  dieselben Anregungsspektren besitzen. Ein analoges Ergebnis erhalten wir für  $\Delta$ -Teilchen.



41 Anregungszustände Baryonen. (a) Doublett (N), (b) Quartett ( $\Delta$ ).

Wir haben bereits gesehen, dass es zu jedem Spin  $s$ ,  $2s + 1$  entartete Zustände gibt. Für Spin  $s = \frac{1}{2}$  gibt es somit zwei Zustände  $p^+$ ,  $n^0$ , für  $s = \frac{3}{2}$  vier Zustände,  $\Delta^-, \Delta^0, \Delta^+, \Delta^{++}$ . Da für diese Teilchen innere Anregungszustände existieren, können sie nicht elementar sein und müssen daher aus weiteren Teilchen bestehen, den **Quarks**.

Quarks müssen als elementare Teilchen, den kleinstmöglichen positiven Spin  $s = \frac{1}{2}$  besitzen. Angenommen, die uns bekannten Baryonen bestünden nur aus zwei Quarks mit Spin  $s = \frac{1}{2}$ , dann wären bei Kopplung von zweien nur Spinwerte von  $s = 0$  oder  $1$  möglich, was nicht unserer Beobachtung entspricht. Die Baryonen müssen daher aus mindestens drei Quarks bestehen. Eine geradzahlige größere Anzahl von Quarks wäre aufgrund der daraus resultierenden geradzahligen Spinwerten nicht möglich. Eine größere ungerade Anzahl wie z.B. 5 wäre möglich, dann müssten wir aber auch Baryonen mit entsprechendem Spin beobachten, was (noch) nicht der Fall ist.

Gehen wir also davon aus, dass ein Baryon aus drei Quarks besteht. Quarks sind Fermionen, es kann von jeder Sorte nur ein Vertreter pro Baryon koppeln (Pauli Prinzip). Es muss also mindestens 3 verschiedene Quarksorten geben, die für die innere Struktur verantwortlich sind.

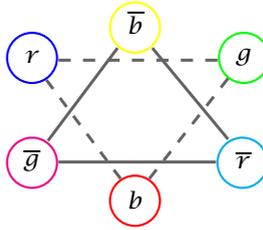
Auffällig ist, dass mehr positiv als negativ geladene Baryonen ( $p^+$ ,  $\Delta^{++}$ ,  $\Delta^+$ ) existieren, daher ist es wahrscheinlich, dass mindestens eine Quarksorte eine große positive Ladung besitzt.

Wir wollen nun die Freiheitsgrade der Quarks genauer betrachten. Zunächst gibt es zwei Einstellungsmöglichkeiten für die Ladung, nämlich up mit der Ladung  $+\frac{2}{3}$  und down mit der Ladung  $-\frac{1}{3}$ , weshalb wir von **Up-** und **Downquarks** sprechen. Diese Einstellungsmöglichkeiten sind jedoch vom Spin der Quarks selbst unabhängig, ein Upquark hat daher auch 2 Spineinstellungsmöglichkeiten, Spin up und down. Die uns bekannten Baryonen haben somit die Konfiguration,

$$\begin{aligned} n^0 &= (u^{1+\frac{2}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}) \\ p^+ &= (u^{1+\frac{2}{3}}, u^{1+\frac{2}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}) \\ \Delta^- &= (d^{1-\frac{1}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}) \\ \Delta^0 &= (u^{1+\frac{2}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}) \\ \Delta^+ &= (u^{1+\frac{2}{3}}, u^{1+\frac{2}{3}}, d^{1-\frac{1}{3}}) \\ \Delta^{++} &= (u^{1+\frac{2}{3}}, u^{1+\frac{2}{3}}, u^{1+\frac{2}{3}}). \end{aligned}$$

Wir sehen, dass die Teilchenkonfigurationen ohne weitere Freiheitsgrade nicht möglich sind, da sich maximal zwei Quarks des selben Typs durch ihre Spineinstellung unterscheiden können. Beim  $\Delta^{++}$ -Teilchen haben wir jedoch drei Teilchen des selben Typs, was nach dem Pauli Prinzip verboten wäre.

Es muss also weitere Freiheitsgrade geben und zwar mindestens drei. Wir nennen diese **Farbladung (color charge)** ( $r, g, b$ ) für rot, grün und blau. Die Farbladung ist die Ladung der starken Wechselwirkung und wird in der Quantenchromodynamik genauer betrachtet. Wir wollen hier lediglich eine qualitative Betrachtung durchführen.



## 42 Farbladungen und Antifarbladungen.

In der Elektrostatik kann man die Ladungskonjugation als Punktspiegelung auffassen. Bei den Farbladungen existiert z.B. für rot ein  $\bar{r}\bar{o}\bar{i}$ , das Gegenteil von rot, es entspricht aber weder grün oder blau. Für die Ladungskonjugation gilt daher,

$$\begin{pmatrix} r \\ g \\ b \end{pmatrix} \xrightarrow{\hat{C}} \begin{pmatrix} \bar{r} \\ \bar{g} \\ \bar{b} \end{pmatrix}.$$

Die für uns beobachtbaren Teilchen (Baryonen) sind jedoch farblos, d.h. Baryonen eines Typs sind nicht unterscheidbar und wechselwirken nicht direkt (d.h. in 1. Ordnung) durch den Mechanismus der Quarkwechselwirkungen.

**Bsp** Mögliche Konfiguration eines  $\Delta^{++}$ ,

$$\Delta^{++} = (u^{1+\frac{2}{3}}g, u^{1+\frac{2}{3}}r, u^{1+\frac{2}{3}}b) \quad \blacksquare$$

**Bsp** Es ist aber auch möglich, ein rot und ein  $\bar{r}\bar{o}\bar{i}$  zusammenzubringen, wodurch ein farbloses Teilchen, ein **Meson** entsteht.

$$\pi^0 = (u^r \bar{u}^{\bar{r}}).$$

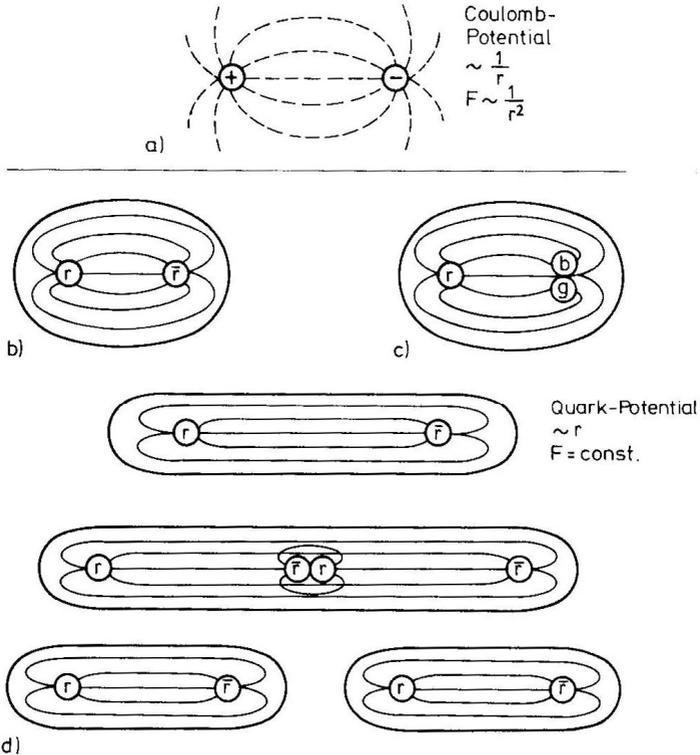
Mesonen bestehen aus zwei Quarks. Aufgrund der Ladungen sind somit auch Triplets möglich. Da Mesonen aus Quarks und Antiquarks bestehen haben sie eine sehr endliche Lebensdauer ( $\pi^0$  von  $2.6 \cdot 10^{-8}s$ ).  $\blacksquare$

Die Farbladungen führen zu Wechselwirkungen zwischen den Quarks. Wir können diese Wechselwirkung durch das Modelpotential,

$$V(r) = -\frac{\alpha_s}{r} + Ar$$

beschreiben.

Im Gegensatz zum Coulomb-Potential bei dem ein Teilchen durch das Aufbringen von endlich viel Energie unendlich weit vom Potentialmittelpunkt entfernt werden kann, nimmt hier das Potential mit wachsendem Abstand linear zu. Beim Versuch Farbladungen zu trennen, entstehen neue farblose Mesonen, wenn die Wechselwirkungsenergie größer wird als die Ruhemasse des Mesons.



T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, S. 188

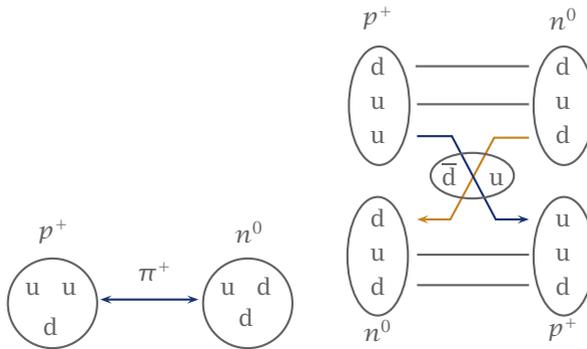
43 Zum Blasenmodell der Hadronen (Bag Modell).

Insgesamt ist so weniger Energie notwendig als für die Trennung der einzelnen Farbladungen. Als Konsequenz sehen wir, dass es nur farblose Teilchen als beobachtbare Teilchen auftreten.

Es handelt sich hier lediglich um eine stark vereinfachte Modellvorstellung, die schnell an ihre Grenzen stößt. In Wirklichkeit ist die Wechselwirkung deutlich komplizierter, eine detaillierte Behandlung ist aber für unsere Fragestellung nicht zweckmäßig und sprengt den Rahmen der Vorlesung.

Wir wollen nun zur Kernphysik zurückkehren und die Frage klären, warum auch farblose Teilchen wie  $p^+$ ,  $n^0$  eine attraktive Wechselwirkung erfahren. Aufgrund der Ladung lässt sich eine Coulomb-Wechselwirkung sofort ausschließen. Erinnern wir uns zunächst an die Van-Der-Waals Wechselwirkung. Hier induzieren Atome durch fluktuierende Ladungsverschiebung in anderen Atomen Dipolmomente, wodurch eine Attraktion zwischen den Atomen stattfindet. Ähnlich induzieren auch fluktuierende Farbladungsverschiebungen, Farbladungsverschiebungen in anderen Teilchen, wodurch diese ebenfalls eine attraktive Wechselwirkung erfahren. Diese Wechselwirkung ist als Induktionsprozess 2. Ordnung schwächer als die Wechselwirkung zwischen den Farbladungen selbst; bei den im Atom vorliegenden Längenskalen jedoch deutlich stärker als beispielsweise die Coulomb Wechselwirkung für gleichnamige Teilchen.

Wir wollen diese Wechselwirkung nun für den konkreten Fall der Proton-Neutron-Wechselwirkung betrachten. Durch den Induktionsprozess werden hier  $\pi^+$ -Mesonen, farblose Teilchen, die aus einem Up-Quark und einem Anti-Down-Quark bestehen, ausgetauscht.



44 Rolle des  $\pi^+$ -Meson bei der Proton-Neutron Wechselwirkung.

Um diese Wechselwirkung mit anderen uns bekannten zu vergleichen, müssen wir die Wechselwirkungsteilchen vergleichen. Die Elektromagnetische Wech-

selwirkung basiert beispielsweise auf Photonen, die keine Ruhemasse und daher unendliche Reichweite haben. Die Mesonen dagegen besitzen eine Ruhemasse und haben daher nur eine endliche Reichweite. Mithilfe der Energie-Masse-Äquivalenz und der Heisenbergschen Unschärferelation können wir die Reichweite abschätzen. Gehen wir von

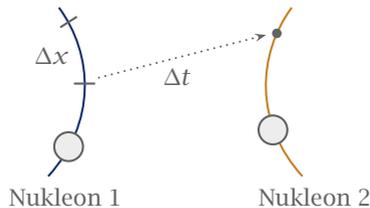
$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E}$$

aus, wobei  $\Delta E \geq m_\pi c^2$ , so erhalten wir für die Reichweite,

$$R = c\Delta t = \frac{c\hbar}{\Delta E} \leq \frac{\hbar}{cm_\pi}.$$

Für  $\pi$ -Mesonen mit  $m_\pi = 140 \frac{\text{MeV}}{c^2}$  ergibt sich der Wert,

$$R \leq 1.4\text{fm}.$$



#### 45 Reichweite der Wechselwirkung.

Aufgrund unserer stark vereinfachten Modellvorstellung ist dieses Vorgehen nur ein zur groben Abschätzung der Reichweite zulässiges Mittel.

Wir sehen also, dass die 2. Ordnung Farbwechselwirkung, die durch den Austausch von  $\pi$ -Mesonen stattfindet, eine Reichweite von ungefähr Kerndurchmesser hat. Die Teilchen im Kern wechselwirken also hauptsächlich untereinander. Damit sie mit Teilchen in anderen Kernen wechselwirken, müsste man die Kerne auf einen Abstand kleiner als der Kerndurchmesser zusammenbringen.<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Dies ist eine große Herausforderung beim Bau von Fusionsreaktoren.

	Quark ( $q$ )	Symbol	Charge ( $e$ )	Weak isospin $T_z$	Mass ( $\text{MeV}/c^2$ )	Spin ( $\hbar$ )	Baryon number
1st generation	up	$u$	$2/3$	$1/2$	336	$1/2$	$1/3$
	down	$d$	$-1/3$	$-1/2$	338	$1/2$	$1/3$
2nd generation	charm	$c$	$2/3$	$1/2$	1,500	$1/2$	$1/3$
	strange	$s$	$-1/3$	$-1/2$	540	$1/2$	$1/3$
3rd generation	top	$t$	$2/3$	$1/2$	170,900	$1/2$	$1/3$
	bottom	$b$	$-1/3$	$-1/2$	5,000	$1/2$	$1/3$

*P. A. Tipler, R. A. Llewellyn, Modern Physics, Fifth Edition, S. 569*

46 **Quarks.**

	Lepton $l$	Symbol	Charge ( $e$ )	Weak isospin $T_z$	Mass ( $\text{MeV}/c^2$ )	Lifetime ( $s$ )	Spin ( $\hbar$ )
1st generation	electron	$e$	$-1$	$-1/2$	0.5110	stable	$1/2$
	electron neutrino	$\nu_e$	$0$	$1/2$	$\leq 2.2 \text{ eV}/c^2$	stable	$1/2$
2nd generation	muon	$\mu$	$-1$	$-1/2$	105.659	$2.197 \times 10^{-6}$	$1/2$
	muon neutrino	$\nu_\mu$	$0$	$1/2$	$\leq 3.5 \text{ eV}/c^2$	stable	$1/2$
3rd generation	tau	$\tau$	$-1$	$-1/2$	1,784	$3.3 \times 10^{-13}$	$1/2$
	tau neutrino	$\nu_\tau$	$0$	$1/2$	$\leq 8.4 \text{ eV}/c^2$	stable	$1/2$

*P. A. Tipler, R. A. Llewellyn, Modern Physics, Fifth Edition, S. 569*

47 **Leptonen.**

## 2-3 Kernmassenbestimmung und Kernmodelle

Wir wollen nun die Bindungsenergie der 2. Ordnung Farbladungswechselwirkung untersuchen. Es stellt sich natürlich die Frage, wie man diese überhaupt messen kann. Die Energie Masse Äquivalenz  $E = mc^2$  besagt, dass die Information über die Bindungsenergie bereits in der Masse enthalten ist. Eine Änderung der Bindungsenergie führt somit zu einer Änderung der Masse. Misst man nun die Masse der einzelnen Nukleonen und anschließend die der Atome, kann man aus der Differenz der Massen die Größe der Bindungsenergien berechnen.

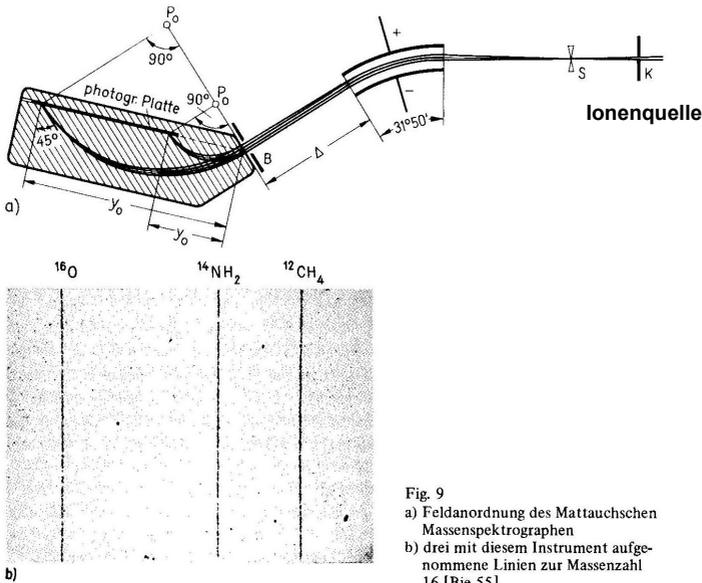


Fig. 9  
a) Feldanordnung des Mattauchschen Massenspektrographen  
b) drei mit diesem Instrument aufgenommene Linien zur Massenzahl 16 [Bie 55]

T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, S. 32

**Definition** Die *Bindungsenergie* ist eine positive Größe, gegeben durch

$$B(Z, N) = [Zm_{p^+} + Nm_{n^0} - m(Z, N)] c^2,$$

wobei  $Z$  die Anzahl der Protonen,  $N$  die Anzahl der Neutronen und  $m(Z, N)$  die reale Masse eines Kerns mit  $N$  und  $Z$  bezeichnet.  $\times$

**BSP** Masse des Protons, Neutrons und Elektrons

$$m_{p^+} = 938.3 \frac{\text{MeV}}{c^2}, \quad m_{n^0} = 939.6 \frac{\text{MeV}}{c^2}, \quad m_{e^-} = 0.511 \frac{\text{MeV}}{c^2}.$$

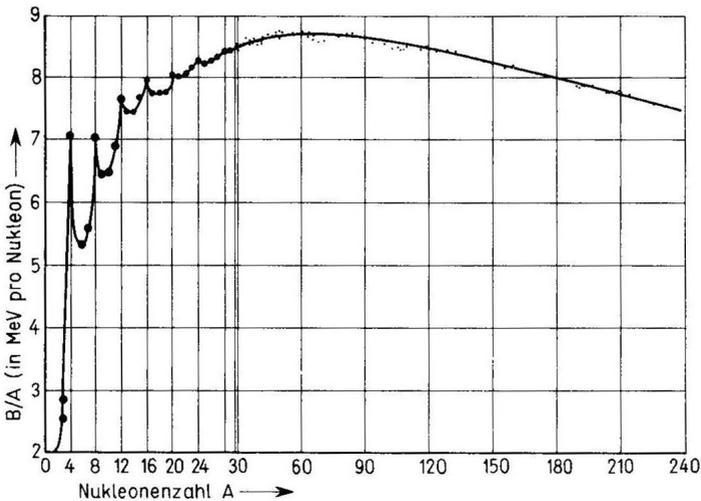
Die Elektronenmasse ist also vernachlässigbar gegenüber der der Protonen und Neutronen. ■

**BSP** Die Atomare Masseneinheit

$$1u = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C}) = 931.5 \frac{\text{MeV}}{c^2} \hat{=} 1.6606 \cdot 10^{-24} \text{g},$$

ist kleiner als die Summe der einzelnen Protonen- und Neutronenmassen im  $^{12}\text{C}$ , es fehlt also bereits die  $^{12}\text{C}$ -Bindungsenergie. ■

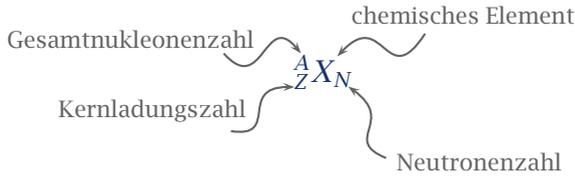
**BSP** Die Messgenauigkeit der Massenspektrometrie heute  $\frac{\Delta m}{m} \approx 10^{-10}$ . ■



T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, S. 36

48 **Zentrales Ergebnis der Massenspektroskopie: Bindungsenergie pro Nukleon als Funktion von A für stabile Kerne.**

Wollen wir Atome vergleichen, benötigen wir noch einige Begriffe.



49 Notation eines chemischen Elements  $X$  mit Kernladungszahl  $Z$ , Neutronenzahl  $N$  und Gesamtnukleonenzahl  $A$ .

**Definition** *Isotope* sind Kerne mit gleicher Kernladungszahl  $Z$  aber unterschiedlicher Neutronenzahl  $N$  und demnach unterschiedlicher Massenzahlen  $A$ .

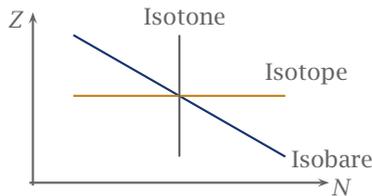
**BSP**  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$  und  $^{14}\text{C}$ . ■

*Isobare* sind Kerne mit derselben Massenzahl  $A$ , jedoch mit unterschiedlicher Neutronenzahl  $N$  und deshalb auch unterschiedlicher Kernladungszahl  $Z$ .

**BSP**  $^{12}\text{C}$ ,  $^{12}\text{N}$  und  $^{12}\text{B}$ . ■

*Isotone* sind Kerne mit derselben Neutronenzahl  $N$ , aber mit unterschiedlicher Massenzahl  $A$  und deshalb auch unterschiedlicher Kernladungszahl  $Z$ .

**BSP**  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{N}$  und  $^{14}\text{O}$ . ■ ✕



50 **Isotone, Isotope und Isobare.**

**Beobachtungen.** 1.) Die Bindungsenergie pro Nukleon  $\frac{B}{A}$  hat ein Maximum bei  $A \sim 60$ . Wir können daher durch Spaltung von schweren bzw. Fusion von leichten Kernen Energie gewinnen. Durch Fusion der leichtesten Kerne können über  $\approx 4\text{MeV}$  frei werden, während wir durch Spaltung der schwersten Kerne lediglich  $\approx 1\text{MeV}$  erhalten.

- 2.) Leichte Kerne zeigen eine "Schalenstruktur".
- 3.) Größenordnungsmäßig bleibt  $\frac{B}{A}$  für schwere Kerne nahezu konstant. Die Wechselwirkung eines Nukleons betrifft nur seine nächsten Nachbarn, die weiteren Nukleonen im Kern spielen keine Rolle. Andernfalls würden  $A-1$  Bindungspartner auch  $\frac{A(A-1)}{2}$  Bindungen erzeugen und  $\frac{B}{A}$  wäre proportional zu  $A$ .

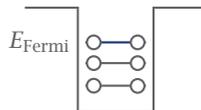
Wir können diese Eigenschaften sehr gut mittels einem Tröpfchenmodell beschreiben. In einem Tropfen herrscht unabhängig von der Größe des Tropfens stets die selbe Dichte. Dies entspricht den Ergebnissen der Streuexperimente, die eine nahezu homogene Ladungsverteilung für schwere Teilchen besagen. Ein Teilchen in einem Tropfen wechselwirkt nur mit seinen nächsten Nachbarn. Die Wechselwirkung ist von der Größe des Topfens unabhängig.

Das Tröpfchenmodell scheitert jedoch beim Übergang zu  $< 10$  Nukleonen und der hier vorliegenden Schalenstruktur. In diesem Fall lassen sich die Teilchen als nahezu ideales Gas interpretieren und durch das Modell des freien Teilchens beschreiben.

Zur Lösung wählen wir als effektives Model ein Fermigas im mittleren Potential. Innerhalb des Kastenpotentials kann sich ein Teilchen frei bewegen, während am Rand viel Energie notwendig ist, um es vom Verband zu lösen. Die Physik in diesem Potential wird durch das Pauli-Prinzip dominiert, welches bestimmt wie oft ein Energiezustand überhaupt auftreten kann.

Wir werden sehen, dass die Energie dieses Potentials viel größer ist als die Bindungsenergie pro Nukleon  $E_{\text{Fermi}} \gg \frac{B}{A}$ .

**BSP**  $E_{\text{Fermi}} \approx 40\text{MeV}$ ,  $\frac{B}{A} \approx 8\text{MeV}$ . ■



51 **Kastenpotential mit diskreten Energiezuständen.**

## ■ Ideales Fermigas im Kastenpotential

Die Wechselwirkung der Fermionen untereinander ist sehr klein im Verhältnis zur Fermienergie, weshalb wir diese in unserem Modell vernachlässigen wollen. Da Messungen außerdem zeigen, dass die Dichteverteilung nahezu konstant ist, gehen wir davon aus, dass außer den elementaren keine weiteren Kräfte wirken.

Wir wollen nun die quantenmechanischen Zustände im 3-dimensionalen Kastenpotential untersuchen. Dazu wählen wir für die Nukleonen als effektives Potential,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > a, \\ -V_0 & r \leq a, \end{cases}$$

wobei  $a$  den Kernradius bezeichnet.

Um unsere Rechnungen zu vereinfachen, gehen wir davon aus, dass der Kern Würfelform mit Kantenlänge  $a$  hat. Dadurch kommt in unserem Modell lediglich ein Vorfaktor der Größenordnung 1 dazukommt. Durch die Würfelform können wir die 3-dimensionale Schrödingergleichung in drei 1-dimensionale separieren. Die Gesamtwellenfunktion ist somit gegeben durch,

$$\Psi_{\text{ges}} = \Psi_x \Psi_y \Psi_z,$$

mit der Gesamtenergie,

$$E_{\text{ges}} = E_x + E_y + E_z.$$

Wir fordern weiterhin, dass am "Potentialrand" Knotenpunkte vorliegen, also die Amplitude dort verschwindet. Die Lösungen der SGL sind stehende Wellen der Form,

$$\Psi_x = \frac{2}{\sqrt{2a}} \begin{cases} \cos k_x x, & k_x = \frac{\pi\lambda}{a}, \lambda = 1, 3, 5, \dots \\ \sin k_x x, & k_x = \frac{\pi\lambda}{a}, \lambda = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

$\lambda$  ist hier Quantenzahl.

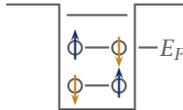
Entsprechend ergibt sich für die Energie die Form,

$$E_x^{(\lambda)} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^{(\lambda)})^2 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi\hbar}{a} \lambda_x \right)^2.$$

Die Gesamtenergie eines Teilchens, das durch die Zustände  $\lambda_x, \lambda_y$  und  $\lambda_z$  charakterisiert wird, ist somit gegeben durch,

$$E_{\text{ges}} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \underbrace{(\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2)}_{:=\rho^2}.$$

Wir wollen nun untersuchen, wie sich unser Modell verhält, wenn wir viele Fermionen in das Potential einbringen. Die Fermionen haben lediglich vier unterscheidbare Konfigurationen nämlich Proton/Neutron und Spin Up/Down. Das Pauliprinzip besagt daher, dass pro Energiezustand nur zwei Nukleonen eines Typs möglich sind.



## 52 Fermipotential mit 4 Nukleonen mit Spin Up/Down.

Somit erhalten wir eine neue Energieskala. Die **Fermienergie**  $E_F$  ist die Energie, bis zu der von  $n$  Teilchen alle Zustände besetzt sind. Wenn wir  $E_F$  berechnen wollen, müssen wir also Zustände "zählen". Dazu führen wir die **Zustandsdichte**  $\frac{dn}{dE}$  ein, die die Anzahl der Energiezustände pro Energieintervall beschreibt. Betrachten wir eine Kugel mit Radius  $\rho$  im Zustandsraum, so gilt

$$dn = \frac{1}{8} 4\pi \rho^2 d\rho.$$

Der Faktor  $\frac{1}{8}$  entsteht, da wir nur den rechten oberen Quadranten betrachten,  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z > 0$ . Verwenden wir nun die  $\rho$ -Impuls Beziehung,

$$\rho = \frac{ap}{\pi \hbar},$$

so erhalten wir

$$dn = \frac{1}{8} 4\pi \frac{a^2 p^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{a}{\pi \hbar} dp = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \underbrace{a^3}_{:=V} p^2 dp. \quad (*)$$

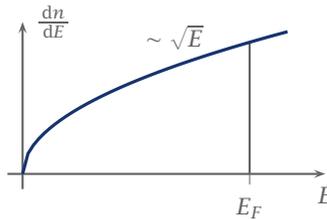
Die Energie-Impuls Beziehung  $p^2 = 2mE$  liefert,

$$\frac{dp}{dE} = \frac{d\sqrt{2mE}}{dE} = \frac{m}{\sqrt{2mE}},$$

$$\Rightarrow p^2 dp = 2mE \frac{m}{\sqrt{2mE}} dE = m^{3/2} \sqrt{2E} dE$$

Setzen wir dies in (\*) ein, erhalten wir die Zustandsdichte,

$$\frac{dn}{dE} = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} V \sqrt{E}$$



### 53 Integration der Zustandsdichte.

Für einen Kern mit  $n$  Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen gleichen Typs kann jeder Energiezustand doppelt besetzt werden. Die Anzahl der Energiezustände ist daher,

$$n = 2 \int_0^{E_F} \frac{dn}{dE} dE = 2 \frac{m^{3/2}V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2^{3/2}}{3} \frac{m^{3/2}V}{\pi^2\hbar^3} E_F^{3/2}$$

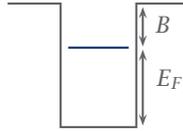
$$\Rightarrow E_F = \left( \frac{3}{2^{3/2}} \frac{\pi^2\hbar^3}{m^{3/2}V} n \right)^{2/3} = \frac{3^{2/3}}{2} \frac{\pi^{4/3}\hbar^2}{m} \left( \frac{n}{V} \right)^{2/3}$$

Unsere vereinfachte Modellvorstellung erlaubt es nicht, den Wert exakt auszurechnen, festzuhalten ist jedoch, dass die Fermienergie proportional zur (Kerndichte) $^{2/3}$  ist.

Mit der gemessenen Kerndichte erhalten wir für die Fermienergie,

$$E_F = 30\text{MeV.}$$

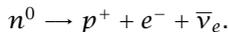
Insgesamt verfügen wir nun über zwei Energieskalen. Zum einen die Fermienergie im 30MeV und zum anderen die Bindungsenergie 8MeV.



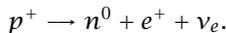
## 54 Bindungs- und Fermieenergie im Fermipotential.

*Bemerkungen.* 1. Später werden wir in der Festkörperphysik ein analoges Modell entwickeln. Betrachten wir die Elektronen im Kupferatom, so sind dies auch Fermionen, die man durch ein Fermipotential beschreiben kann. Die Bindungsenergie entspricht dann der Austrittsenergie der Elektronen. Diese beträgt lediglich  $\sim 3\text{eV}$  gegenüber der Fermieenergie  $\sim 7\text{eV}$ .

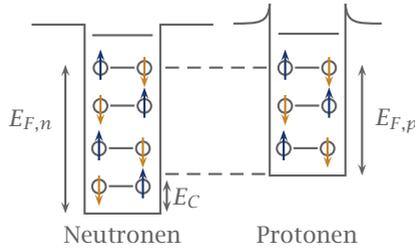
2. Unsere bisherigen Überlegungen gelten nur für nicht wechselwirkende Teilchen bei  $T = 0$ . Für thermische Energien  $k_B T \ll E_F$  und  $E_B \ll E_F$  verhält sich der Kern aber näherungsweise wie ein ideales, d.h. wechselwirkungsfreies, Fermigas.
3. Während die Neutronen neutral bezüglich der Coulomb-Wechselwirkung sind, besitzen die Protonen eine positive Ladung. Das Coulombpotential verhält sich wie  $\frac{1}{r}$ , weshalb Protonen beim Einbringen in den Kern bereits ein höheres Energieniveau als Neutronen haben. Protonen und Neutronen streben danach das Energieniveau in Balance, d.h. die Fermieenergie auf dem gleichen Niveau zu halten. Sind "zu viele" Neutronen im Kern, beobachten wir  $\beta^-$ -Zerfall,



Sind dagegen zu viele Protonen im Kern, findet  $\beta^+$ -Zerfall statt,

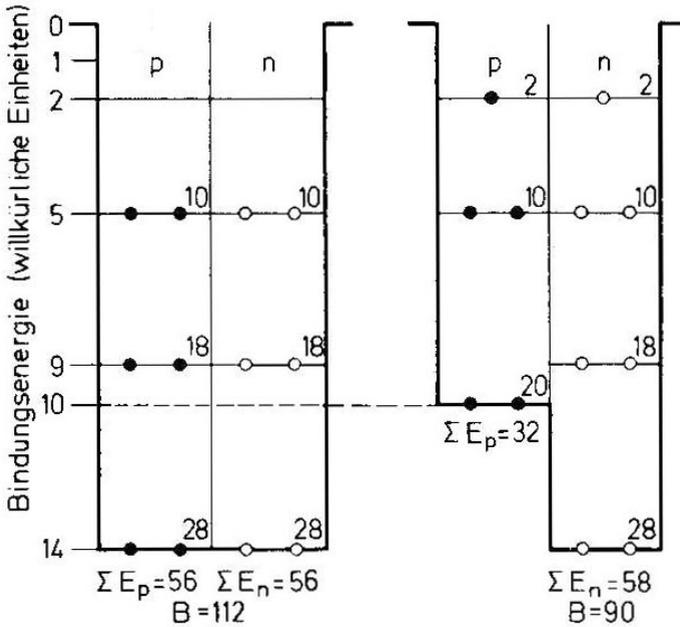


$\beta$ -Zerfälle finden so lange statt, bis die  $p^+$  und  $n^0$  Niveaus bis zur gleichen Fermieenergie gefüllt sind und so ein stabiler Zustand erreicht ist.



55 **Kastenpotential für Neutronen und Protonen**

Wir erkennen die Auswirkungen dieses Effekts im Periodensystem der Elemente wieder. Hier führt hauptsächlich die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Protonen im Kern zum “Neutronenüberschuss”.



*T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, S. 47*

56 **Vergleich der Bindungsenergie im symmetrischen (links) und unsymmetrischen Fermipotential (rechts).**

4. Man kann die Schalenstruktur der Kerne anfänglich so erklären, dass man zum Einfügen eines Fermions in ein "halb" gefülltes Niveau kaum Energie benötigt. Für leichte Kerne erhalten wir jedoch auch durch diese Annahme noch kein hinreichendes Modell.
5. Unser Modell ist in keinster Weise vollständig. Man könnte beispielsweise anstatt einem Potential mit scharfer Kante eines mit kontinuierlichem Verlauf annehmen (sog. Wood-Saxon-Potential siehe Abb. 38) und so zu verbesserten Ergebnissen kommen. Wir werden jedoch sehen, dass das bisher entwickelte Modell für unsere Vorhaben  $A > 40$  hinreichend genaue Aussagen macht.  $\rightarrow$

### ■ Tröpfchenmodell

Das **Tröpfchenmodell** ist ein effektives Modell das auf einer inkompressiblen Flüssigkeit, die durch kurzreichweitige Wechselwirkung zusammengehalten wird, basiert. Es kann keine Aussage über die Peaks der Bindungsenergie pro Nukelon im Bereich weniger Nukleonen machen, dafür beschreibt es die Gesamtverteilung sehr genau.

Wir werden nun 5 Energien analysieren, die jeweils einen Beitrag zu Bindungsenergie pro Nukelon leisten, d.h. es gilt

$$E_B = B_1 + B_2 + B_3 + B_4 + B_5.$$

#### 1.) Volumenenergie (Kondensationsenergie)

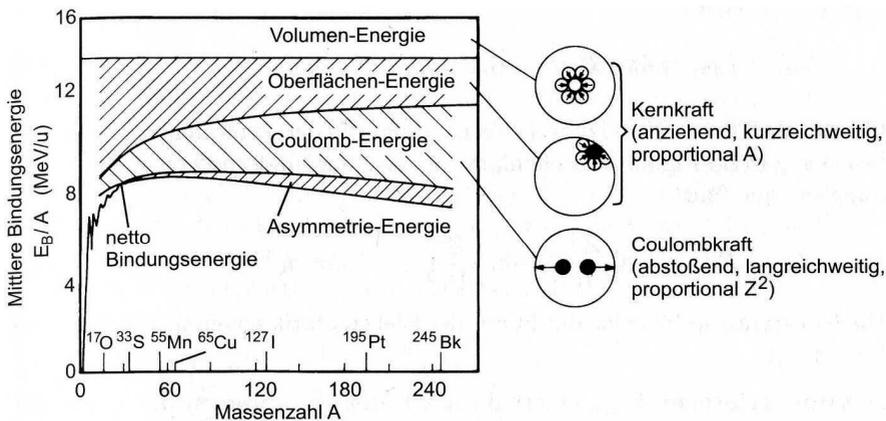
Wir haben bereits gesehen, dass das Volumen linear in der Nukleonenzahl  $A$  ist, d.h.

$$B_1 = a_V A.$$

#### 2.) Oberflächenenergie (Oberflächenspannung)

Die Oberfläche  $S = 4\pi r_0^2 (A^{1/3})^2$  nimmt nicht linear mit der Nukleonenzahl zu,

$$B_2 = -a_S A^{2/3},$$



K. Bethge, G. Walter, B. Wiedemann, Kernphysik - Eine Einführung, S. 49

57 **Bindungsenergie pro Nukleon als Funktion der Massenzahl.**

d.h. die Bindungsenergie wird *größer*, wenn sich die Oberfläche verkleinert.

3.) Coulombenergie.

Die Coulombenergie einer homogen geladenen Kugel ist gegeben durch,

$$E = \frac{3}{5} \frac{q^2}{R},$$

wobei  $R = r_0 A^{1/3}$ . Hier leisten nur die positiv geladenen Fermionen einen Beitrag,

$$B_3 = -a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} = a_C Z^2 A^{-1/3}.$$

4.) Asymmetrieenergie

Die Asymmetrieenergie hat ihren Ursprung in der Coulomb-Wechselwirkung, denn diese führt zum Neutronenüberschuss. Dadurch ändert sich die Zustandsdichte, was im Fermimodell einer Änderung der Bindungsenergie pro Nukelon hervorruft.

Die Energie im Fermigas mit  $n$  Fermionen lässt sich wie folgt abschätzen,

$$E_{\text{tot}} = \int_0^{E_F} 2E \frac{dn}{dE} dE \sim V \int_0^{E_F} E^{\frac{3}{2}} dE \sim VE^{\frac{5}{2}} \sim V \left( \left( \frac{n}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{5}{2}} = A^{-\frac{2}{3}} n^{\frac{5}{3}}.$$

Ein Atom enthält zwei Arten von Fermionen ( $p^+$ ,  $n^0$ ), es gilt somit

$$E_{\text{tot}} = CA^{-\frac{2}{3}} \left( Z^{\frac{5}{3}} + N^{\frac{5}{3}} \right).$$

Für einen symmetrischen Kern  $N = Z$  erhalten wir so,

$$E_{\text{tot}} = 2CA^{-\frac{2}{3}} \left( \frac{A}{2} \right)^{\frac{5}{3}} = \frac{C}{2^{\frac{2}{3}}} A.$$

Wie viel Energie kostet von dieser Energie aus ein Neutronenüberschuss  $T_Z = \frac{1}{2}(Z - N)$ ?

$$\Delta E = CA^{-\frac{2}{3}} \left( Z^{\frac{5}{3}} + N^{\frac{5}{3}} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{\frac{5}{3}} \right)$$

Da die Gesamtenergie nicht linear in  $n$  ist, ist die Energiedifferenz nicht Null. Wir wollen  $\Delta E$  für kleines  $T_Z$  entwickeln,

$$\begin{aligned} \Delta E &= CA^{-\frac{2}{3}} \left( \left( \frac{A}{2} + T_Z \right)^{\frac{5}{3}} + \left( \frac{A}{2} - T_Z \right)^{\frac{5}{3}} - 2 \left( \frac{A}{2} \right)^{\frac{5}{3}} \right) \\ &= 2^{-\frac{5}{3}} CA^{-\frac{2}{3}} A^{\frac{5}{3}} \left( \left( 1 + \frac{2T_Z}{A} \right)^{\frac{5}{3}} + \left( 1 - \frac{2T_Z}{A} \right)^{\frac{5}{3}} - 2 \right). \end{aligned}$$

Verwende  $(1 \pm x)^p = 1 \pm px + \frac{p(p-1)}{2}x^2 + \dots$ ,

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2^{-\frac{5}{3}} CA^{-\frac{2}{3}} A^{\frac{5}{3}} \left( 2 + 2 \frac{4}{A^2} \frac{10}{9} T_Z^2 - 2 \right) = 2^{-\frac{2}{3}} \frac{80}{9} \frac{T_Z^2}{A}, \\ \Rightarrow B_4 &= -a_A \frac{T_Z^2}{A} = -a_A \frac{\left( Z - \frac{A}{2} \right)^2}{A} \end{aligned}$$

5.) Paarbildungsenergie.

Die Paarbildungsenergie muss empirisch eingeführt werden, um der Beobachtung gerecht zu werden. Betrachten wir die Neutronen und Protonen Energieniveaus, so können die jeweils gerade (g) oder ungerade (u) besetzt sein. Die Beobachtung zeigt, dass (gg) Kerne besonders stabil und (uu) Kerne weniger gebunden sind. Es ist energetisch günstig ein Nukleon in ein bereits halb besetztes Energieniveau einzufügen.

Wir wollen dies durch folgenden Term berücksichtigen.

$$B_5 = \begin{cases} +\delta, & \text{für gg,} \\ 0, & \text{für ug/gu,} \\ -\delta, & \text{für uu.} \end{cases}$$

Alle fünf Terme zusammen führen zur **Bethe-Weizsäcker-Formel** mit der sich die Bindungsenergie pro Nukleon vorhersagen lässt,

$$E_B = B_1 + B_2 + B_3 + B_4 + B_5 = a_V A - a_S A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_A \frac{\left(Z - \frac{A}{2}\right)^2}{A} \pm \delta,$$

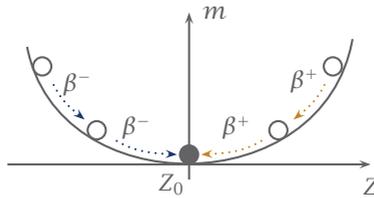
$$m(Z, N) = N \cdot m_{n^0} + Z m_{p^+} - \frac{E_B}{c^2}.$$

Für schwere Kerne erreicht die Formel eine Präzision von einem Prozent. Wir werden sehen, dass wir sogar Kernzerfälle mithilfe dieser Formel vorhersagen können.

*Interpretation der Bethe-Weizsäcker-Formel.*

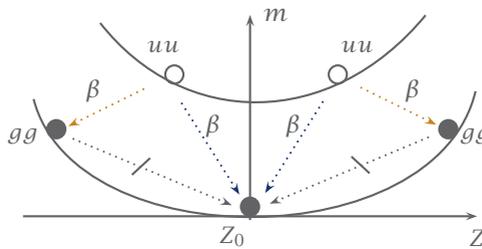
- 1) Das Maximum der Bindungsenergie pro Nukleon  $\frac{B}{A}$  kommt durch die Abnahme der Oberflächenenergie und der Zunahme der Coulombenergie zustande.
- 2) Schaleneffekte für kleine  $A$  werden nicht berücksichtigt. Für  $A > 40$  beschreibt die Formel  $\frac{B}{A}$  jedoch auf 1 Prozent genau.
- 3) Mithilfe der Formel lassen sich Aussagen über die Stabilität der Kerne machen.

Betrachten wir Isobare, d.h.  $A = \text{const}$ , in der Nähe von  $N(Z, A) \sim Z^2$ . Für  $A$  ungerade erhalten wir folgendes Zerfallsschema.



58 Zerfallsschema für Isobare mit  $A$  ungerade. Stabiler Kern ist ausgefüllt.

Wir können somit konkret ausrechnen, welche Energie die Elektronen beim  $\beta$ -Zerfall haben.



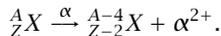
59 Zerfallsschema für Isobare mit  $A$  gerade. Stabile Kerne sind ausgefüllt.

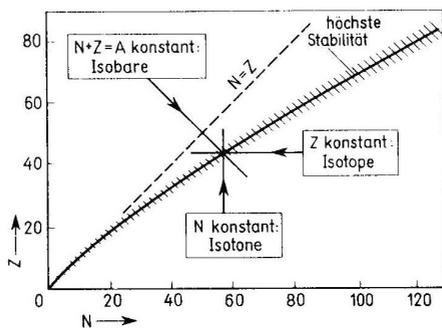
Für  $A$  gerade ist  $\Delta p^+ = 2k$ , um von einem  $gg$  zu einem anderen  $gg$  zu kommen. Es gibt jedoch keinen  $\beta$ -Zerfall bei dem sich die Protonenzahl um ein Vielfaches von 2 ändert. Daher gibt es viele stabile  $gg$  Isotope.

4) Man kann mit der Formel auch die stabilsten Kerne vorhersagen, indem man die Bindungsenergie maximiert.

$$\left. \frac{\partial m(Z, A = Z + N)}{\partial Z} \right|_{N=\text{const}} = 0.$$

5) Beim  $\alpha$ -Zerfall wird ein  $He$ -Kern ( $2p^+, 2n^0$ ) emittiert,





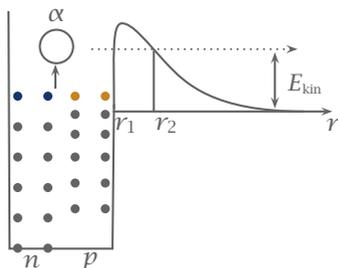
T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, S. 53

60 Lage der stabilen Kerne in der N-Z-Ebene.

Die Energiebilanz des  $\alpha$ -Zerfalls ist,

$$E_{\alpha} = [m(Z, A) - m(Z - 2, A - 4) - m_{\alpha}] c^2.$$

Für  $E_{\alpha} > 0$  ist der Zerfall möglich, für wachsendes  $E_{\alpha}$  wird der Prozess schneller. Man kann dies mit dem Modell von Gamov beschreiben.



61 Gamovs Erklärung des  $\alpha$ -Zerfalls.

Damit der  $\alpha$ -Zerfall stattfindet, muss das im Kern entstehende  $\alpha$ -Teilchen eine große Barriere, hervorgerufen durch die starke Kernbindung, überwinden. Kann dadurch Energie frei werden, so existiert eine bestimmte Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen durch die Barriere tunnelt. Nach dem Tunneln erhält das  $\alpha$ -Teilchen eine große kinetische Energie und

kann aufgrund der Barriere nicht mehr in den Kern zurückkehren. Für die Tunnelwahrscheinlichkeit gilt,

$$\text{Wsk} \sim \exp \{ \text{Freiwerdende Energie} \} .$$

- 6) Die Formel erklärt ebenfalls, warum nur  $\alpha$ - und  $\beta$ -Zefälle auftreten und nicht etwa nur  $p^+$  oder  $n^0$  emittiert werden. Da das  $\alpha$ -Teilchen bereits eine sehr hohe Bindungsenergie hat, ist es in den meisten Fällen die günstigste Zerfallsvariante. In der Formel ist eine Änderung von  $Z$  oder  $N$  um 1 stets ungünstiger als der  $\alpha$ -Zerfall.
- 7) Auch für die Kernspaltung kann mit der Bethe-Weizsäcker-Formel eine Energiebilanz aufgestellt werden. Gilt

$$m(Z, A) > 2m \left( \frac{Z}{2}, \frac{A}{2} \right),$$

so ist die Spaltung energetisch möglich. Jedoch ist auch hier - wie beim  $\alpha$ -Zerfall - eine Barriere zu überwinden.

Man hat von zahlreichen Nukleonen die Halbwertszeit  $\tau_{1/2}$  bestimmt und stellte fest, dass

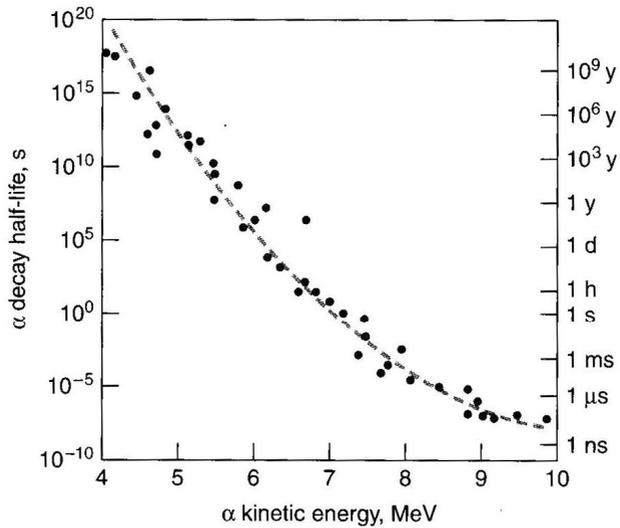
$$\tau_{1/2} \sim \frac{1}{\lambda},$$

wobei  $\lambda$  die Tunnelwahrscheinlichkeit des  $\alpha$ -Teilchens bezeichnet. Diesen Zusammenhang nennt man die **Geiger-Nuttall-Regel**. Im Experiment sieht man eine Übereinstimmung über 25 Größenordnungen hinweg.

Die Tunnelwahrscheinlichkeit für eine spontane Spaltung ist typischerweise viel kleiner als die für den  $\alpha$ -Zerfall. Man kann jedoch durch Neutroneneinfang Energie in das System einbringen und dadurch die Spaltung induzieren.

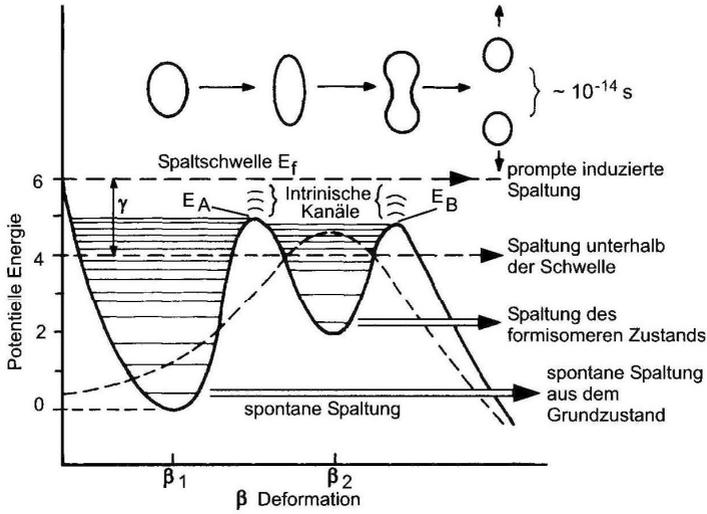
Der Kernspaltungsprozess zeigt Analogieen zur Verformung von elastischen Körpern. Die für eine Spaltung zu überwindende Potentialbarriere ist in diesem Modell vergleichbar mit einem Riss der Oberfläche.

**BSP** Bei Uran 235 ist die günstigste Spaltung nicht die Halbierung sondern die Teilung in einem schweren  $\sim 140u$  und einen leichten  $\sim 90u$  Kern. Auch dies folgt aus der Bethe-Weizsäcker-Formel und ist für viele weitere Kerne der Fall. ■



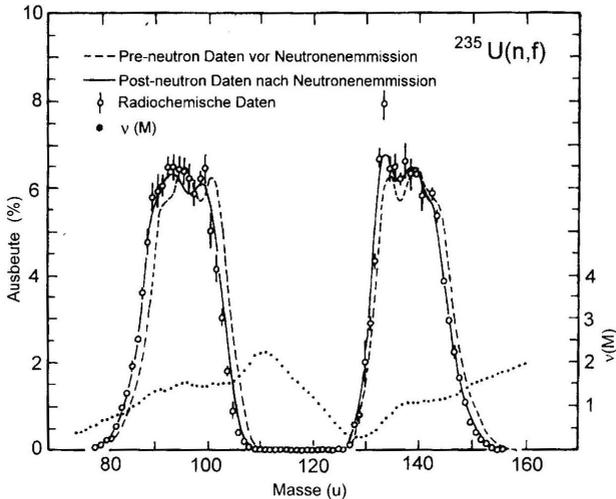
P. A. Tipler, R. A. Llewellyn, Modern Physics, Fifth Edition, S. 496

- 62    Halbwertszeit des  $\alpha$ -Zefalls für natürlich vorkommende Zerfälle halblogarithmisch über der kinetischen Energie der  $\alpha$  Teilchens aufgetragen. Die gestrichelte Linie stellt die Vorhersage der Geiger-Nuttall Regl dar.



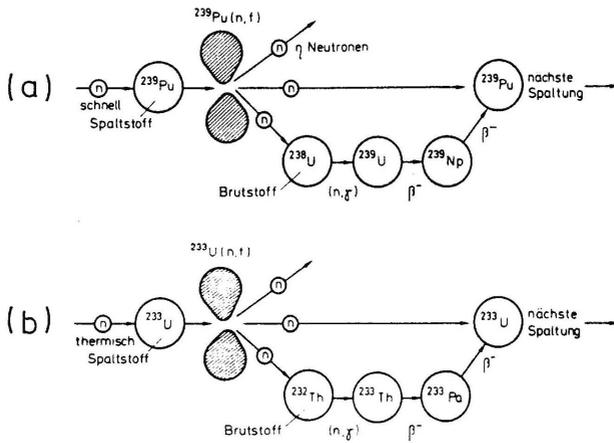
K. Bethge, G. Walter, B. Wiedemann, Kernphysik - Eine Einführung, S. 244

63 Einfache (gestrichelt) und doppelhöckerige Spaltbarriere.



K. Bethge, G. Walter, B. Wiedemann, Kernphysik - Eine Einführung, S. 240

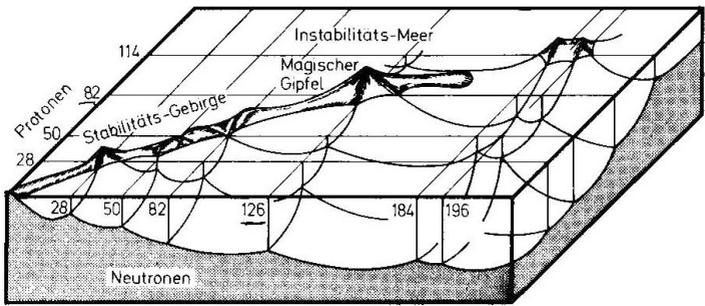
64 Massenverteilung der Spaltfragmente aus  $^{235}\text{U}(n, f)$ . Die gepunktete Linie gibt die mittlere Anzahl der emittierten Neutronen  $\nu(M)$  aus.



T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, Fig. 127

65 Spalt-Brutketten. a) Schneller Brüter, b) Thorium-Brüter.

**BSP** Berücksichtigt man zusätzlich noch die Schalenstruktur der Kerne, so lässt sich im Bereich von  $Z \sim 120$ ,  $N \sim 190$  eine "Insel der Stabilität" vorhersagen, d.h. es könnte dort bisher unentdeckte aber stabile Elemente geben. Es stellt sich jedoch als äußerst schwierig heraus, diese "Superschweren Kerne" zu erzeugen. ■



T. Mayer-Kuckuk, Kernphysik, Fig. 55

66 Bindungsenergien der Kerne in Abhängigkeit von  $Z$  und  $N$ . Nur die aus der Oberfläche herausragenden Kerne sind stabil. Bei  $N \approx 190$  befindet sich die spekulative Stabilitätsinsel.

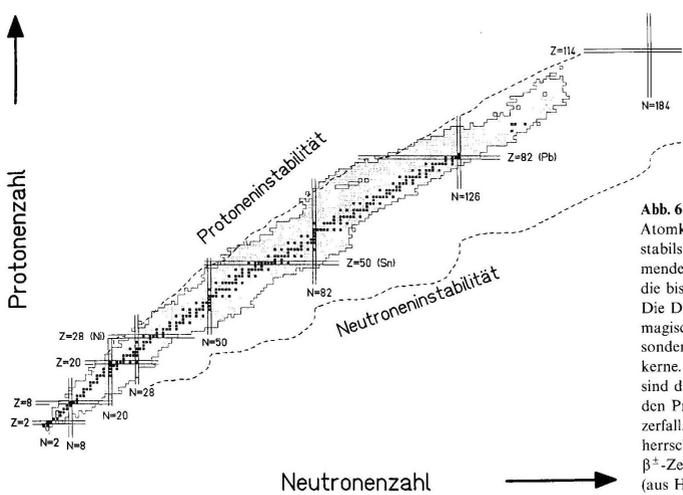


Abb. 6-3. Stabilitätsdiagramm der Atomkerne. Schwarz sind die 290 stabilsten in der Natur vorkommenden Kerne eingetragen, grau die bis heute künstlich erzeugten. Die Doppellinien bezeichnen die magischen Zahlen; hier gibt es besonders viele natürliche Atomkerne. Die gestrichelten Linien sind die theoretischen Grenzen für den Protonen- bzw. Neutronenzerfall. Innerhalb dieser Grenzen herrscht Kernumwandlung durch  $\beta^+$ -Zerfall oder  $e^-$ -Einfang vor (aus Hofmann u.a. 1984).

K. Stierstadt, Physik der Materie, S. 87

### ■ Kernreaktionen

Wir wollen nun die Bethe-Weizsäcker Formel verwenden, um Aussagen über mögliche Kernreaktionen zu machen. Betrachten wir zunächst den  $\alpha$ -Zerfall. Die

Energie des  $\alpha$ -Zerfalls ist

$$E_\alpha = \frac{1}{c^2} (m(Z, A) - \underbrace{m(Z-2, A-4) - m_\alpha}_{\text{Restkern} + \alpha \text{ Teilchen}}).$$

Falls  $E_\alpha < 0$  wird die Teilchenwelle an den Potentialwänden total reflektiert, durch Interferenz entstehen stehende Wellen. Dies sind gerade die Eigenzustände des  $\alpha$ -Teilchens im Potential.

Ist  $E_\alpha > 0$  im Potential, so existiert auch ein freier Zustand. Die Welle wird nun nicht mehr total reflektiert, sondern dringt in die Potentialwand ein und wird gedämpft. Wir wissen aus der Quantenmechanik, dass daher das Teilchen eine gewisse Wahrscheinlichkeit hat, die Potentialbarriere zu überwinden. Die Wahrscheinlichkeit für das Tunneln ist gegeben durch,

$$\lambda := \lambda_0 \cdot T_\alpha,$$

$\lambda_0$  ist die Entstehungswahrscheinlichkeit für das  $\alpha$ -Teilchen,  $T_\alpha$  bezeichnet den Transmissionskoeffizient.

$$T_\alpha = \frac{\text{Zahl der erfolgreichen Eindringversuche}}{\text{Zahl der gesamten Eindringversuche}} \\ \hat{=} \text{Verhältnis von einlaufender zu auslaufender Teilchenwelle.}$$

Betrachten wir die Wellenfunktionen der einlaufenden und auslaufenden Welle, können wir den Transmissionskoeffizienten berechnen.

$$T_\alpha = \frac{j_a}{j_e} = \frac{|\Psi_a|^2 v_a}{|\Psi_e|^2 v_e}.$$

Mit  $p = m v = \hbar k$  und der Lösung der Wellengleichung für stehende Wellen

$$\Psi_v = \alpha_v e^{ik_v x} + \beta_n e^{-ik_v x},$$

erhält man so für das Kastenpotential,

$$T_\alpha = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^D \sqrt{2m(V(r) - E)} dr \right\}.$$

Man kann zeigen, dass  $T_\alpha$  für beliebige Potentiale diese Form hat.

## 2-4 Zerfälle und Radioaktivität

Über das zeitliche Verhalten von Kernreaktionen lassen sich folgende Aussagen machen.

- Der Zeitpunkt eines Zerfalls kann weder vorhergesagt noch von außen beeinflusst werden.
- Zerfälle werden durch die Wechselwirkung zwischen den Nukliden getrieben.

Man kann also nur Aussagen statistischer Natur machen. Wir wollen dies mit Hilfe von Ratengleichungen tun. Dazu betrachten wir, wie sich eine große Anzahl  $N_0 = N(t = 0)$  von instabilen Kernen über die Zeit verändert. Sie erfüllt die Differentialgleichung

$$\frac{dN}{dt} = -\Gamma N(t),$$

wobei  $\Gamma$  die **Zerfallsrate** bezeichnet. Die Lösung dieser Gleichung ist wohlbekannt,

$$N(t) = N_0 \exp(-\Gamma t).$$

Die **Aktivität** ist definiert als die Anzahl der Ereignisse pro Zeit,

$$A(t) = \left| \frac{dN}{dt} \right| = N_0 \Gamma \exp(-\Gamma t).$$

Die Aktivität hat also das gleiche Zeitverhalten wie die Anzahl der vorhandenen Kerne. *A posteriori* scheint dies offensichtlich, dass dem so ist, ist jedoch eine Besonderheit und im Voraus nicht klar. Aus diesem Zusammenhang kann man Informationen darüber gewinnen, wie sich die Radioaktivität zeitlich verhält. Die Einheit der Aktivität ist die SI-Einheit,

$$1 \text{ Becquerel} = 1 \text{ Bq}.$$

*Bemerkung.* Die Aktivität sagt nichts über die Art der Strahlung, deren Energie oder deren Schädlichkeit für Lebewesen aus.  $\rightarrow$

Die **mittlere Lebensdauer** eines Kerns erhält man durch,

$$\tau = \frac{\int t \, dN}{\int dN} = \frac{\int t N_0 \Gamma \exp(-\Gamma t) \, dt}{N_0} = \frac{1}{\Gamma}.$$

Die **Halbwertszeit** ist die Zeit, nach der durchschnittlich die Hälfte der vorhandenen Kerne zerfallen ist,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} N_0 &= N_0 \exp(-\Gamma \tau_{1/2}) \\ \Leftrightarrow \ln 2 &= \Gamma \tau_{1/2} \\ \Leftrightarrow \tau_{1/2} &= \frac{\ln 2}{\Gamma} \end{aligned}$$

In vielen Fällen ist nicht nur ein Zerfall möglich, man spricht dann von "Zerfallskanälen". Für ein Nuklid mit 2 Zerfallskanälen gilt,

$$\frac{dN}{dt}(t) = -\Gamma_1 N(t) - \Gamma_2 N(t) = -(\Gamma_1 + \Gamma_2) N(t).$$

Die Gesamtzerfallsrate ist  $\Gamma_{\text{ges}} = \Gamma_1 + \Gamma_2$ , Zerfallsraten sind also additiv. Die Halbwertszeit ergibt sich als

$$\tau = \frac{1}{\Gamma_{\text{ges}}} = \frac{1}{\Gamma_1 + \Gamma_2}.$$

Die Zeitabhängigkeit der Endprodukte ist

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} &= -\Gamma_i N_i(t), \\ \frac{N_1(t)}{N_2(t)} &= \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \end{aligned}$$

Lösungen dieser Gleichungen sind,

$$\begin{aligned} N_1(t) &= N_0 \frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 + \Gamma_2} \left( 1 - \exp(-\Gamma_{\text{ges}} t) \right) \\ N_2(t) &= N_0 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2} \left( 1 - \exp(-\Gamma_{\text{ges}} t) \right) \end{aligned}$$

Isotop	$E_\alpha/\text{MeV}$	$t_{1/2}$	$T_\alpha$
$^{212}_{84}\text{Po}$	8,78	0,3 $\mu\text{s}$	$1,3 \cdot 10^{-13}$
$^{224}_{88}\text{Ra}$	5,7	3,64 d	$5,9 \cdot 10^{-26}$
$^{228}_{90}\text{Th}$	5,42	1,91 a	$\sim 3 \cdot 10^{-28}$
$^{238}_{94}\text{Pu}$	5,5	$8,8 \cdot 10^1$ a	$\sim 10^{-29}$
$^{230}_{90}\text{Th}$	4,68	$7,5 \cdot 10^4$ a	$\sim 10^{-32}$
$^{235}_{92}\text{U}$	4,6	$7,1 \cdot 10^8$ a	$\sim 10^{-36}$

W. Demtröder, Experimentalphysik 4, S. 46

67 Charakteristische Daten einiger  $\alpha$ -Strahler. (Energie  $E_\alpha$ , Halbwertszeit  $t_{1/2}$  und Tunnelwahrscheinlichkeit  $T_\alpha$ )

■ Zusammenfassung

$\alpha$ -Strahlung hat ein diskretes Spektrum, da die Anregungszustände der Kerne diskret sind. Sie tritt dann auf, wenn durch die Abspaltung eines  $\alpha$ -Teilchens die Bindungsenergie vergrößert werden kann. Da das  $\alpha$ -Teilchen eine sehr hohe Bindungsenergie hat, wird dieser Zerfall gegenüber der Abspaltung von einzelnen  $p^+$ ,  $n^0$  bevorzugt.

$\beta$ -Strahlung hat ein kontinuierliches Spektrum. Es handelt sich hier um einen 3-Körper-Prozess, weshalb die Energie kontinuierlich verteilt werden kann.

$$n^0 \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e$$

$$p^+ \rightarrow n^0 + e^+ + \nu_e$$

Beim Zerfall entstehen die Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen Elektronneutrino  $\nu_e$  bzw. Elektronantineutrino  $\bar{\nu}_e$  aufgrund der Impuls- und Drehimpulserhaltung.

$\gamma$ -Strahlung entsteht bei "optischen Übergängen" von angeregten Kernzuständen. Hierbei werden Photonen im MeV-Bereich emittiert. Typischerweise folgt auf einen  $\alpha$ -/ $\beta$ -Zerfall ein  $\gamma$ -Zerfall, da die Zerfallsprodukte bei letzteren in angeregten Zuständen zurückbleiben.

Aus der Paritätsregel und der Drehimpulserhaltung erhalten wir Auswahlregeln für diese Übergänge. Dipolstrahlung im Fall von  $\Delta L = 1$ , Quadrupolstrahlung für  $\Delta L = 2$ .

### ■ Andere Strahlungseinheiten

Wird ein lebender Organismus Strahlung ausgesetzt, kann man mithilfe der **Dosis** Aussagen über die Auswirkungen machen,

$$[D] = \left[ \frac{\text{absorbierte Energie}}{\text{Masse}} \right] = 1 \frac{\text{J}}{\text{kg}} = 1 \text{Gray} = 1 \text{Gy}$$

$$[\dot{D}] = \frac{\text{Gy}}{\text{s}}.$$

Die Schädlichkeit der Strahlung an sich wird durch die **Äquivalentdosis**

$$H = Q \cdot D, \quad \text{Einheit } S_V \text{ (Sievert),}$$

beschrieben, wobei  $Q$  einen Qualitätsfaktor darstellt.

	$Q$
$\gamma/\beta$ -Strahlung	1
thermische Neutronen $n_T$	2.3
schnelle Neutronen $n_S$	10
$\alpha$ -Strahlung	20

# 3 Atome

Während die beobachteten Wellenlängen in der Kernphysik im Bereich der  $\gamma$ -Strahlung liegen, sind die der Atomphysik im sichtbaren Bereich. Bei den Längenskalen verhält es sich ähnlich,

$$\begin{array}{ll} \text{fm,} & \text{Kernphysik,} \\ \text{\AA,} & \text{Atomphysik,} \quad \text{\AA} = 10^{-10}m. \end{array}$$

Schon in der Antike hatte man die Idee, dass die Materie aus kleinsten Teilchen, den Atomen, aufgebaut ist. Als einer der ersten formulierte Bernoulli<sup>6</sup> gegen Ende des 18. Jahrhunderts die Hypothese, dass Materie aus kleinsten Teilchen bestehe, welche wechselwirken und sich gegenseitig abstoßen. 1869 veröffentlichte Mendelejew<sup>7</sup> eine erste Version des Periodensystems der Elemente.

In diesem Kapitel wollen wir untersuchen, welche Kräfte zwischen den Bestandteilen der Atome wirken und durch welche Potentiale sie sich beschreiben lassen, um ein Modell zu entwickeln, das es uns ermöglicht, die Struktur des Periodensystems der Elemente zu erklären.

**BSP** Folgendes Experiment Anfang des 20. Jahrhunderts zeigte Phänomene, die mit der damaligen Physik nicht zu erklären waren.

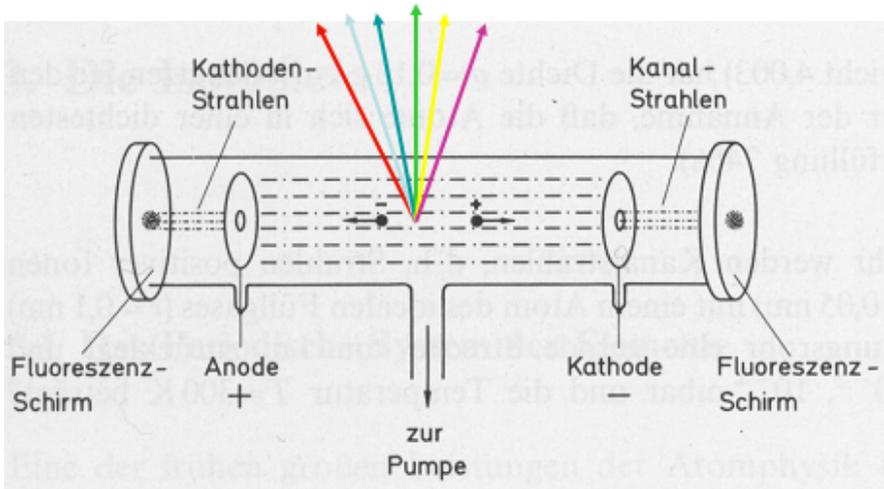
Man bringt in eine Gasröhre Elektroden ein, an die man eine hohe Spannung anlegt. Es kommt zur Gasentladung, ein Lichtbogen wird beobachtet. Spektroskopiert man den Lichtbogen, wird kein kontinuierliches Spektrum festgestellt, sondern lediglich wenige diskrete Frequenzen. ■

Bei Spektroskopie steht die Frequenzmessung im Mittelpunkt. Die Präzession dieser Messung ist heute auch im optischen Frequenzbereich so groß, dass man mithilfe von optischen Frequenzmessungen Uhren bauen kann, die Zeit so exakt messen, wie Cäsium Uhren, welche ebenfalls auf einer Mikrowellenfrequenzmessung basiert. Es wird daher diskutiert, ob die Definition der Sekunde durch eine optische Übergangsfrequenz gegeben werden soll.

---

<sup>6</sup>Daniel Bernoulli (\* 8. Februar 1700 in Groningen; † 17. März 1782 in Basel) war ein Schweizer Mathematiker und Physiker aus der Gelehrtenfamilie Bernoulli.

<sup>7</sup>Dmitri Iwanowitsch Mendelejew (\* 8. Februar 1834 in Tobolsk, Russland; † 20. 2. Februar 1907 in Sankt Petersburg) war ein russischer Chemiker.



68 Spektroskopie von Gasentladungen

Die Frequenz ist aber auch im Alltag eine sehr wichtige Messgröße.

**BSP** GPS basiert auf Längenmessungen, die man durch Laufzeitmessungen der GPS Signale realisiert,

$$s = v \cdot t = c \cdot \frac{1}{f}.$$

Je genauer die Frequenz bestimmt ist, desto genauer ist die Positionsbestimmung. ■

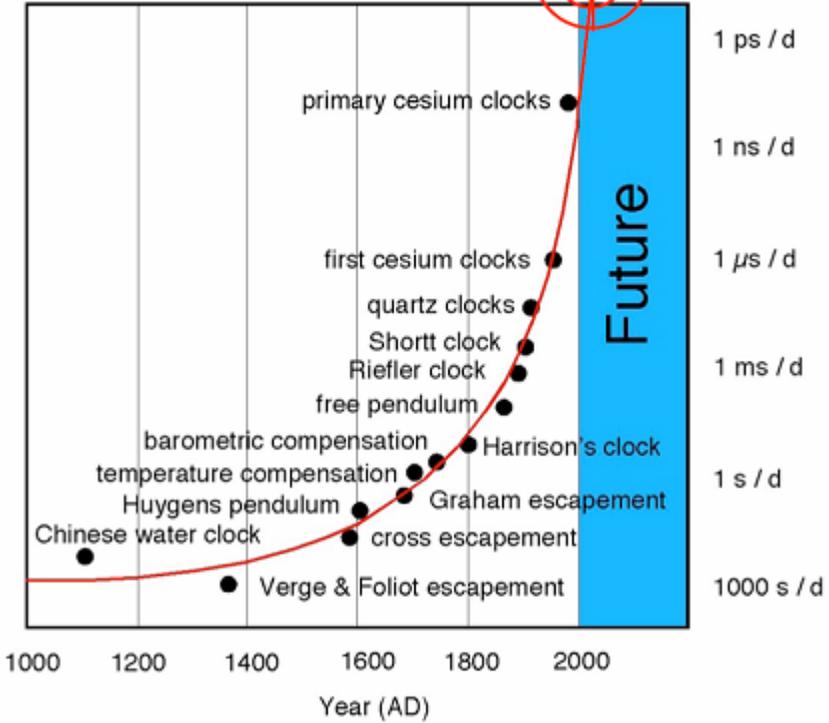
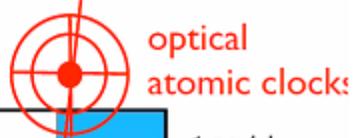
### 3-1 Bohr'sches Atommodell

Niels Bohr<sup>8</sup> stellte 1913 erstmals das später nach ihm benannte Atommodell vor.

Er suchte nach Erklärungen für den experimentellen Befund, dass Atomspektren aus diskreten Linien bestehen.

<sup>8</sup>Niels Henrik David Bohr (\* 7. Oktober 1885 in Kopenhagen; † 18. November 1962 in Kopenhagen) war ein dänischer Physiker und Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1922

# Accuracy of clocks



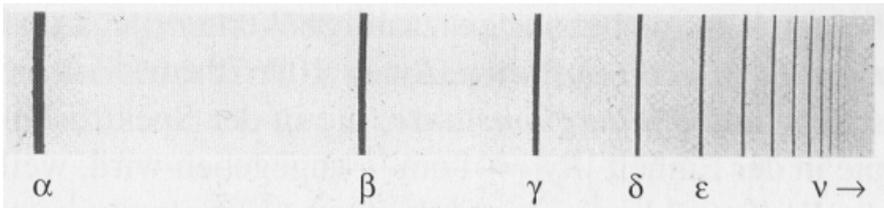
69 Präzission von Atomuhren.

Im sichtbaren Bereich konnte man die Balmer-Serie<sup>9</sup> (1885,  $n' = 2$ ) mit,

$$\lambda = \frac{n^2}{n^2 - 2^2} G, \quad m > 2, \quad B = 364.56 \text{ nm}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

wobei  $\bar{\nu}$  die **Wellenzahl** und  $R$  die empirisch bestimmte **Rydbergkonstante** bezeichnen. Im Ultraviolett die Lyman-Serie<sup>10</sup> (1906,  $n' = 1$ ), im Infraroten die Paschen-Serie<sup>11</sup> (1908,  $n' = 3$ ) und die Brackett-Serie<sup>12</sup> (1923,  $n' = 4$ ).



70 Balmer Serie 1885

Als empirisches Ergebnis wurde 1913 von Rydberg<sup>13</sup> postuliert,

$$\bar{\nu} = R \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n' < n \in \mathbb{N}.$$

Bohr konnte bereits das Rutherford'sche Atommodell, bei dem ein Elektron um den Kern in der Mitte kreist. Die Elektrodynamik verlangt jedoch, dass das auf die Kreisbahn gezwungene Elektron kontinuierlich Energie abstrahlt und somit zwangsläufig in den Kern stürzt.

Um dieses Problem zu lösen, stellte Bohr folgende Postulate auf.

<sup>9</sup>Johann Jakob Balmer (\* 1. Mai 1825 in Lausen, Kanton Basel-Landschaft; † 12. März 1898 in Basel) war ein Schweizer Mathematiker und Physiker.

<sup>10</sup>Theodore Lyman (\* 23. November 1874 in Boston, Massachusetts; † 11. Oktober 1954 in Cambridge, Massachusetts) war ein amerikanischer Physiker.

<sup>11</sup>Friedrich Paschen (\* 22. Januar 1865 in Schwerin; † 25. Februar 1947 in Potsdam) war ein deutscher Physiker, der 1921 gemeinsam mit Ernst Back den Paschen-Back-Effekt entdeckte.

<sup>12</sup>Frederick Sumner Brackett (\* 1. August 1896 in Claremont, California; † 28. Januar 1988) war ein US-amerikanischer Physiker und Spektroskopiker.

<sup>13</sup>Johannes Robert Rydberg (\* 8. November 1854 in Halmstad; † 28. Dezember 1919 in Lund) auch bekannt als Janne Rydberg, war ein schwedischer Physiker.

- 1) Das Atom ähnelt einem Planetensystem (Rutherford), bei dem die Elektronen um den Kern kreisen.
- 2) Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron und die Zentrifugalkraft kompensieren sich.
- 3) Es sind nur bestimmte Energieniveaus zulässig.
- 4) Die Bewegung der Elektronen erfolgt strahlungslos.
- 5) Die Elektronen können jedoch zwischen den erlaubten Energieniveaus springen und emittieren dabei Photonen mit

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_n - E_{n'}}{h}, \quad \text{Planck (1900).}$$

- 6) *Korrespondenzprinzip*. Für große  $n$ , also große Bahnradien, sollen die klassischen Gesetze gelten.

Wir wollen diese Postulate nun mathematisch erfassen. Zentripetal- und Coulombkraft sind im Gleichgewicht,

$$F_{\text{Coulomb}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}, \quad F_{\text{Zentripetal}} = mr\omega^2$$

$$F_{\text{Zentripetal}} + F_{\text{Coulomb}} = 0.$$

Dies ergibt eine Kreisbahn für das Elektron mit,

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = mr\omega^2 \tag{1}$$

$$\Rightarrow r(\omega) = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m\omega^2} \right)^{1/3}. \tag{2}$$

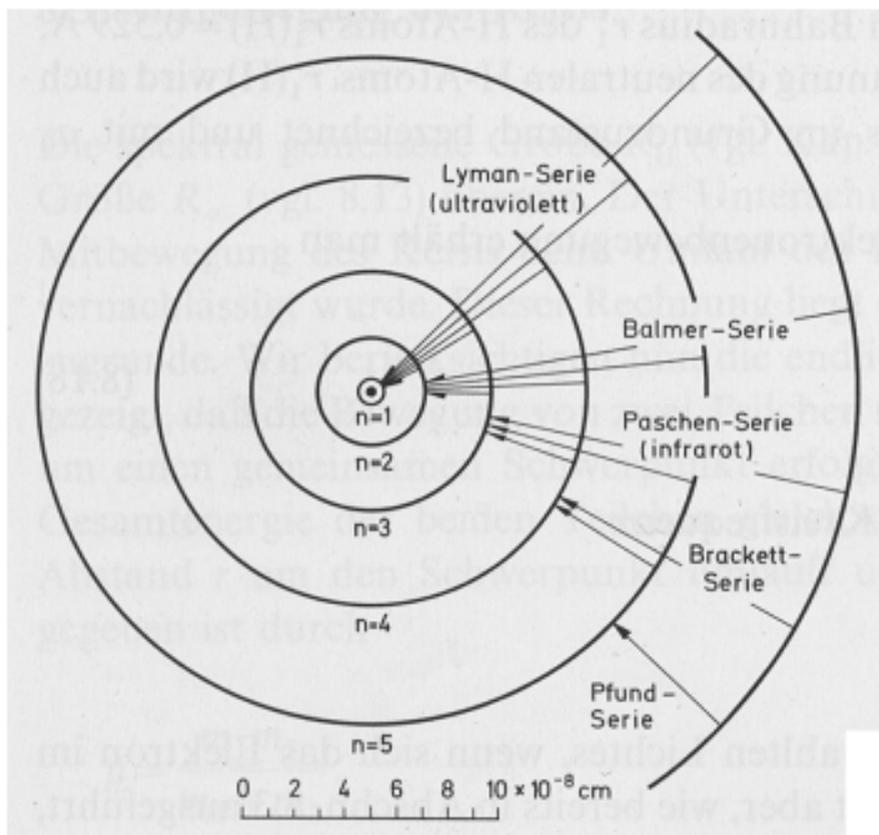
Betrachtet man nun die Energiewerte,

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m\nu^2 = \frac{1}{2} mr^2\omega^2$$

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^r \frac{Ze^2}{r'^2} dr' = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2} mr^2\omega^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$



Setzen wir nun unsere Ausdrücke für  $E_{\text{pot}}$  und  $r(\omega)$  ein,

$$\begin{aligned} \stackrel{(1)}{\Leftrightarrow} E &= \frac{1}{2} m r^2 \omega^2 - m r^2 \omega^2 = -\frac{1}{2} m r^2 \omega^2 \stackrel{(2)}{=} -\frac{1}{2} m \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e^2}{m \omega^2} \right)^{2/3} \omega^2 \\ &= -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} m \omega^2 Z^2 e^4 \right)^{1/3}, \end{aligned} \quad (3)$$

und verwenden Bohrs Postulat der diskreten Energieniveaus,

$$\begin{aligned} E_n &= -R \frac{hc}{n^2}, \quad n, n' = 1, 2, 3, \dots \text{ Quantenzahlen} \\ E_{n'} &= -R \frac{hc}{n'^2}, \\ \Rightarrow \Delta E &= E_n - E_{n'} = Rhc \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right). \end{aligned}$$

Das Modell erklärt somit das empirische Ergebnis,

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = Rc \left( \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \nu = c\bar{\nu}.$$

Betrachten wir  $\Delta E$  für  $n - n' = 1$ , so ergibt sich,

$$\nu = Rc \left( \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = Rc \frac{1}{n^2} \left( \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{n}\right)^2} - 1 \right). \quad (4)$$

Für die Eigenenergien erhalten wir die Beziehung,

$$E_n = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} Z^2 e^4 m \omega^2 \right)^{1/3} = -\frac{Rhc}{n^2}. \quad (5)$$

Klassisch erwarten wir so (Auflösen von (5) nach  $\omega$ ),

$$\nu_{\text{klass.}} = \frac{\omega}{2\pi} \sim \frac{1}{n^3}.$$

In Gleichung (4) haben wir jedoch  $\sim \frac{1}{n^2}$ .

Beachten wir, dass Bohrs Postulate nur für große  $n$  eine Übereinstimmung besagen, müssen wir den zweiten Faktor in (4) entwickeln,

$$\frac{1}{\left(1 - \frac{1}{n}\right)^2} \approx 1 + \frac{2}{n} + \frac{3}{n^2} + \dots$$

Wenden wir diese Entwicklung in (4) an, so ergibt sich

$$v = Rc \frac{2}{n^3}, \quad (6)$$

was wieder mit der klassischen Erwartung übereinstimmt.

Wir wollen nun diesen Zusammenhang nutzen, um die Rydbergkonstante  $R$  konkret zu berechnen,

$$\frac{Rhc}{n^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} Z^2 e^4 m \omega^2 \right)^{1/3} \stackrel{(6)}{=} \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} Z^2 e^4 m \left( 2\pi \frac{2Rc}{n^3} \right)^2 \right)^{1/3}.$$

Für Wasserstoff erhalten wir so den Wert,

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}. \quad (7)$$

Für Messung und Rechnung ergibt sich der Unterschied,

$$R_{\text{Messung}} = (109737.318 \pm 0.012) \text{cm}^{-1},$$

$$R_{\text{Rechnung}} = (109677.581) \text{cm}^{-1}.$$

Wir sehen, dass die Rechnung eine große Übereinstimmung mit den experimentellen Daten hat.

Später werden wir diese Vorhersage noch verbessern, indem wir mit der reduzierten Masse rechnen, da der Kern nicht - wie angenommen - unendlich schwer ist und sich in Ruhe befindet, sondern sich mitbewegt.

**BSP** Der Bohrradius der "kleinsten Bahn" ( $n = 1$ ) im Wasserstoff-Atom ist

$$a_0 = 0.529 \text{\AA}, \quad \text{\AA} = 10^{-10} \text{m}. \quad \blacksquare$$

Betrachten wir den Drehimpuls  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$  im Bohr'schen Atommodell des Wasserstoffatoms, so ergibt sich,

$$\begin{aligned} |\vec{l}| &= m r_n^2 \omega_n \stackrel{(2)}{=} m \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m \omega_n^2} \right)^{2/3} \omega_n \\ &\stackrel{(6)}{=} m \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m} \right)^{2/3} \left( \frac{n^3}{4\pi Rc} \right)^{1/3} = \left( \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \frac{1}{R} \right)^{1/3} n h \\ &= n \hbar. \end{aligned}$$

Der Drehimpuls steigt also linear mit der Hauptquantenzahl an. Im Grundzustand ( $n = 1$ ) ist  $|\vec{l}| = \hbar$ .

*Bemerkung.* Bohr und Sommerfeld haben diese Erkenntnisse genutzt, um eine allgemeine Quantisierungsbedingung für geschlossene Bahnen aufzustellen,

$$\oint \vec{p} \, d\vec{r} = nh,$$

die **Bohr-Sommerfeldsche-Quantisierungsmethode**. Ausgehend von dieser Quantisierung lassen sich andere Größen besonders geschickt quantisieren. In Potentialen mit geschlossenen Bahnkurven ist dies daher eine sehr gute Grundlage. Dennoch hat sie ihre Grenzen. Das freie Teilchen wird beispielsweise von dieser Methode nicht erfasst, da es keine geschlossene Bahnkurve besitzt. Später werden wir diese, heute als antiquiert geltende Methode, durch die Schrödinger-Gleichung ersetzen, mit der uns ein allgemeiner Ansatz für beliebige Potentiale zur Verfügung steht.  $\rightarrow$

Für die Umlauffrequenz erhalten wir den Wert,

$$\omega_n = \frac{4\pi Rc}{n^3} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^3 n^3}.$$

**BSP** Die Umlauffrequenz des Wasserstoffatoms im Grundzustand ( $Z = 1, n = 1$ ) ist

$$\omega(H) \approx 10^{16} \text{s}^{-1}. \quad \blacksquare$$

Die Geschwindigkeit des Elektrons auf der Bohrschen Bahn ist,

$$v = \omega_n r_n = Z \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}}_{\alpha} \frac{1}{n} c, \quad \alpha \approx \frac{1}{137} \text{ heißt Feinstrukturkonstante.}$$

Die Geschwindigkeit ist zwar groß, beim Wasserstoffatom jedoch noch hinreichend klein, um ohne relativistische Rechnung auszukommen. Für größere Ordnungszahlen muss man jedoch relativistische Effekte berücksichtigen.

Für Atome mit  $Z \approx 137$  ist  $v \approx c$  und das Modell bricht zusammen. Die "stationären Bahnen" sind dann nicht mehr stationär, die Atome sind nicht mehr stabil, sie zerfallen.

Die Bindungsenergie ist gegeben durch,

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2} = -\frac{1}{2} m \omega_n^2 r_n^2 = -\frac{Z^2 e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

**BSP** Für  $Z = 1, n = 1$  erhalten wir

$$E_n = -13.6\text{eV},$$

was ebenfalls sehr gut mit der experimentellen Erfahrung übereinstimmt. ■

### 1. Bewährungsprobe des Bohrschen Modells.

$$\Delta R = R_{\text{exp}} - R_{\text{theo}} = -60\text{cm}^{-1} \quad (H\text{-Atom})$$

Wir wollen nun die Mitbewegung des Kerns berücksichtigen und rechnen mit der reduzierten Masse,

$$\mu = \frac{m_e m_{\text{Kern}}}{m_e + m_{\text{Kern}}} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_{\text{Kern}}}}$$

Die Rydbergkonstante errechnet sich somit durch,

$$R_\mu = \frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_{\text{Kern}}}} R_\infty.$$

Als Abweichung vom gemessenen Wert der Rydbergkonstante erhalten wir nun,

$$\Delta R = -59\text{cm}^{-1} \quad (H\text{-Atom}),$$

d.h. durch die Berücksichtigung der Mitbewegung des Kerns erhalten wir eine etwas höhere Genauigkeit.

Als Anwendung können wir unter Annahme des Bohrschen Atommodells das Verhältnis von Protonen und Elektronenmasse bestimmen,

$$\frac{m_p}{m_e} = 1836.15,$$

was ebenfalls sehr gut mit den massenspektrometrischen Messungen übereinstimmt.

Wenn wir vom Wasserstoff zum nächst schwereren Isotop dem Deuterium übergehen (Isotopieverschiebung), ergibt sich

$$R_H = 109677.581\text{cm}^{-1},$$

$$R_D = 109670.7\text{cm}^{-1},$$

Atom	H ( <sup>1</sup> H)	D ( <sup>2</sup> H)	T ( <sup>3</sup> H)	He <sup>+</sup>	Li <sup>2+</sup>
$A$	1	2	3	4	7
$-\frac{\Delta E}{E} \cdot 10^4$	5,45	2,75	1,82	1,36	0,78
$-\frac{\Delta E}{E} \%$	0,0545	0,0275	0,0182	0,0136	0,0078

H. Haken, H. C. Wolf, Atom-und Quantenphysik, S. 110

71 **Energiekorrektur wegen Mitbewegung des Kerns für die Rydberkonstante einiger Eielektronen Atome.**

in sehr guter Übereinstimmung mit den Messergebnissen.

*2. Bewährungsprobe des Bohrschen Modells.*

Für Atome mit höherer Ordnungszahl aber nur einem Elektron, d.h.  $He^+$ ,  $Li^{++}$ ,  $Be^{+++}$ , usw. erhalten wir ein Wasserstoff ähnliches Spektrum. Das Bohr-Sommerfeld-Modell sagt für die Bindungsenergie

$$E_n \sim \frac{Z^2}{n^2},$$

voraus, d.h. sie steigt quadratisch mit  $Z$  an. Auch dies lässt sich experimentell bestätigen. Ein Extremfall in guter Übereinstimmung ist  $U^{91+}$ .

**■ Erweiterung des Bohr'schen Atommodells nach Sommerfeld**

Lässt man nicht nur Kreis- sondern auch Ellipsenbahnen zu, kann man das Modell zum **Bohr-Sommerfeld-Atommodell** erweitern. Die Ellipsengleichung ist

$$r = \frac{a(1 - \varepsilon^2)}{1 + \varepsilon \cos \varphi},$$

mit der großen Halbachsen  $a$  und der Exzentrität  $\varepsilon$ . Eine Ellipsenbahn hat kleineren Drehimpuls als eine Kreisbahn. Für  $\varepsilon = 0$  erhalten wir den Kreis zurück, divergiert die Exzentrität  $\varepsilon \rightarrow 1$ , so pendelt das Elektron durch den Kern  $\Rightarrow l = 0$ .

Um dies herzuleiten, wählt man eine Bindungsenergie und eine Quantisierungsbedingung und löst das Keplerproblem. Die Bindungsenergie ist

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2a} = -\frac{Rhc}{n^2},$$



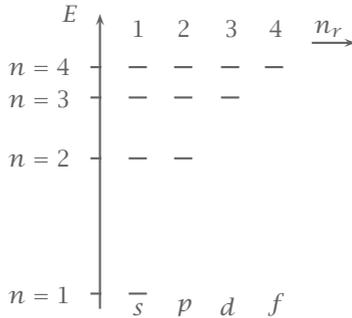
72 Ellipse mit großer Halbachse  $a$  und kleiner Halbachse  $b$  (links) Einfluss der Exzentrizität (rechts).

hängt also nicht von  $\varepsilon$  ab. Es sind somit nicht nur Kreisbahnen als Lösungen zugelassen sondern auch Ellipsen. Klassisch sind alle Bahnen mit  $\varepsilon \in [0, 1)$  erlaubt, die quantenmechanische Behandlung nach Sommerfeld fordert jedoch,

$$\oint p(r) dr = n_r h,$$

$$\oint p(\varphi) d\varphi = n_\varphi h.$$

D.h. es sind nur diskrete  $\varepsilon$  erlaubt. Wir sehen wie in der Kernphysik, dass für hohe Quantenzahlen, die Zustände zunehmend entarten, d.h. unterschiedliche Zustände die gleiche Energie haben.



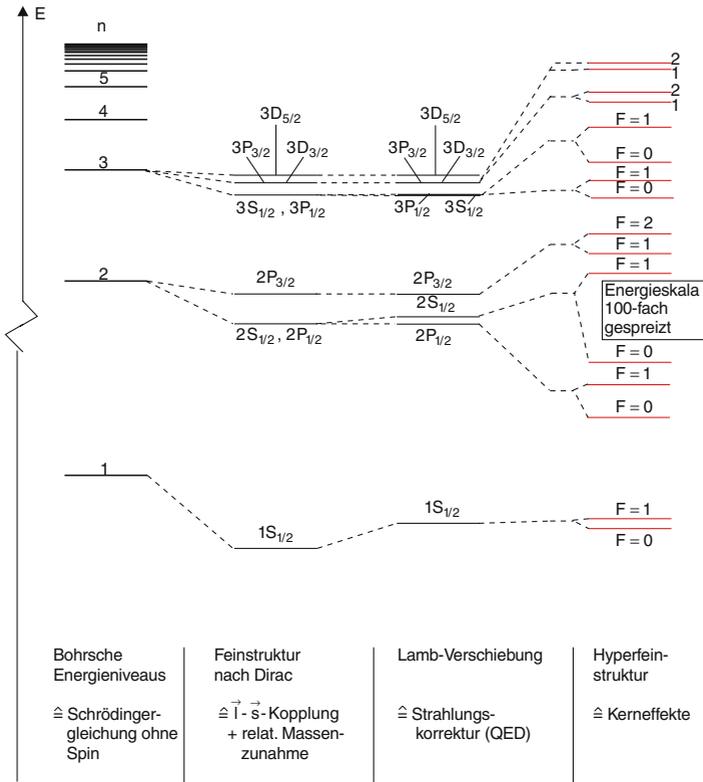
73 Entartung der Zustände  $s$ -sharp,  $p$ -principal,  $d$ -diffuse,  $f$ -fundamental.

*Bewährungsprobe für das Bohr-Sommerfeld-Modell.*

Betrachten wir die Spektrallinien des  $H$ -Atoms unter großer Auflösung, sehen wir, dass die Linien aufgespalten sind, d.h. es sind nicht nur eine sondern mehrere Linien sichtbar, die Entartung ist also (teilweise) aufgehoben.

Dies rührt daher, dass auf der Ellipsenbahn die Geschwindigkeit mit abnehmendem Kernabstand zunimmt. Daher sind in Kernnähe große Geschwindigkei-

ten möglich und relativistische Korrekturen notwendig. Durch die relativistische Massenzunahme wird die Energie abgesenkt und daher die Entartung der Zustände aufgehoben.



W. Demtröder, Experimentalphysik 3, S. 172

74 Vollständiges Termschema des H-Atoms unter Berücksichtigung verschiedener Wechselwirkungen. Die Fein- und die Hyperfeinstruktur und die Lamb-Verschiebung sind nicht maßstabsgetreu gezeichnet.

Durch die Quantisierung der Exzentrizität erhalten wir neben der Quantisierung des Bahndrehimpulses einen weiteren Freiheitsgrad. Durch die notwendigen relativistischen Korrekturen lässt sich die sog. Feinstrukturaufspaltung be-

schreiben.

Nun sind die Keplerbahnen nicht nur auf die Äquatorialebene beschränkt sondern können sich beliebig im Raum orientieren. Jedoch ist auch diese Orientierung quantisiert, was zu einem dritten Freiheitsgrad führt. In Polarkoordinaten lautet daher unsere Quantisierungsbedingung,

$$\oint p_r dr = n_r h,$$
$$\oint p_\vartheta dr = n_\vartheta h,$$
$$\oint p_\psi dr = n_\psi h,$$

was zu einer weiteren Entartung führt. In externen Magnetfeldern wird diese Entartung aufgehoben (**Zeeman-Effekt**).

### ■ Zusammenfassung

Das Bohr-Sommerfeld-Modell kann sehr viele Erfolge verzeichnen:

- Spektrallinien und Rydbergkonstante,
- Isotopieverschiebung ( $H$ -ähnliche Atome),
- Feinstrukturaufspaltung (Sommerfeld),
- Ansatzweise Zeemaneffekt (Verhalten von  $H$ -Atom im Magnetfeld).

Jedoch treten bei der Beschreibung mittels diesem Modell auch zahlreiche Probleme auf:

- Physikalische Erklärung für die stabilen Zustände fehlt.
- Beschreibung des freien Elektrons ist nicht möglich, da dessen Bahnkurve nicht geschlossen ist. Für nicht geschlossene Bahnen haben wir jedoch keine Handhabe, da wir die klassischen Gesetze außer Kraft gesetzt haben, um die Sprünge zu erklären.
- Linienstärken im Spektrum sind nicht vorhersagbar.

- Mehrelektronenatome *He*, *Li*, usw. können nicht erklärt werden, da das Modell bei mehr als einem Elektron versagt.

Indem wir das Bohr-Sommerfeld-Atommodell durch die Schrödingergleichung ersetzen können wir diese und viele weitere Probleme lösen.

## 3-2 H-Atom á la Schrödinger

Wir wollen unser Modell nun weiterentwickeln. Eine wichtige Erkenntnis lieferte De-Broglie<sup>14</sup> 1924, als er die Welleneigenschaften der Materie postulierte. In seiner berühmt gewordenen Dissertation stellte er folgende Hypothesen auf:

- Materie hat Welleneigenschaften.
- Klassische Punktteilchen ergeben sich durch Wellenpakete mit verschwindender Ausdehnung  $\Delta x \rightarrow 0$ .
- Die klassische Bahn entspricht dem Weg des Schwerpunkts des Wellenpakets.

Daraus ergibt sich für die Gruppengeschwindigkeit der Materiewelle

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \stackrel{!}{=} \frac{p}{m},$$

da sie mit der Geschwindigkeit des klassischen Teilchens übereinstimmen muss.

Mit  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$  folgt somit,

$$v_g = \frac{\hbar k}{m}$$

$$\Rightarrow p = \hbar k, \quad \lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p}.$$

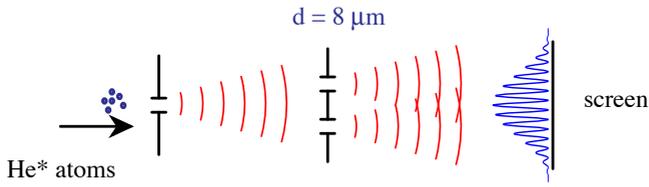
Mit der De-Broglie-Wellenlänge  $\lambda_{\text{dB}}$ .

1927 wurde der Wellencharakter von Elektronen durch die Beugung eines Elektronenstrahls an einem Kristall schließlich experimentell nachgewiesen.

1991 gelang auch die Streuung von He-Atomen an einem Doppelspalt. Jedes

---

<sup>14</sup>Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie (\* 15. August 1892 in Dieppe, Normandie; † 19. März 1987 in Louveciennes, Département Yvelines) war ein französischer Physiker und Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1929.

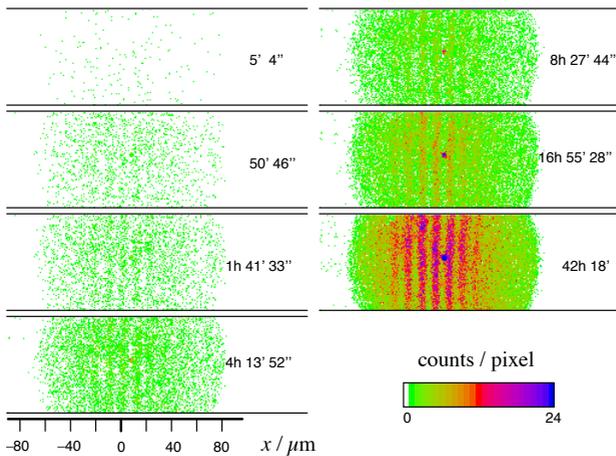


O. Carnal, J. Mlynek, PRL **66**, 2689 (1991)

$$\lambda_{\text{dB}} = 46 \pm 5 \text{ pm}$$

## 75 Young'scher Doppelspaltversuch mit Helium

He-Atom wird auf dem Schirm zwar als Punkt mit  $(x, y)$ -Koordinaten erkannt, die Wahrscheinlichkeitsverteilung entspricht jedoch einem Doppelspalt Beugungsmuster. Da sich stets höchstens ein Atom in der Versuchsanordnung befand, müssen die He-Atome mit sich selbst interferieren.



Ch. Kurtsiefer, T. Pfau, J. Mlynek

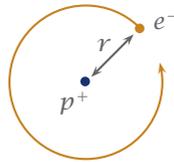
## 76 Auftreffende Heliumatome auf dem Schirm nach passieren des Doppelspalts.

Jedes Atom trifft als lokalisiertes Teilchen auf dem Schirm auf. Mit zunehmender Dauer des Experiments erkennt man die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Atome, welche der quantenmechanischen Erwartung aufgrund der Welleneigenschaften der Materie folgt.

Aufgrund der endlichen Ausdehnung des Eintrittsspalt kommt es zum leichten “verschmieren”, weshalb kein “perfektes Minimum” (Wsk = 0) zu erkennen ist, sondern lediglich eine kleinere Auftreffwahrscheinlichkeit.

### ■ Naives Modell der Wellennatur des Elektrons

Bevor wir zur Schrödingergleichung übergehen, wollen wir noch ein naives Modell zur Wellennatur des Elektrons auf Basis des Bohr-Sommerfeld-Atommodells entwickeln.



#### 77 Naives Modell der Elektronenbewegung.

Das Elektron auf der Bahn wird durch eine bestimmte Wellenlänge  $\lambda_{dB}$  beschrieben. Stationäre Zustände entsprechen nun stehenden Wellen. Die Bedingung dafür ist

$$\begin{aligned}
 2\pi r &= n\lambda_{dB}, & \lambda_{dB} &= \frac{h}{p}, \\
 \Rightarrow \frac{2\pi r}{\lambda_{dB}} &= \frac{2\pi r}{h} p = n \\
 \Rightarrow |\vec{l}| &= r p = n\hbar.
 \end{aligned}$$

Mit dieser Vorstellung kann man die Quantisierungsbedingung für stationäre Zustände

$$\oint p(x) dx = nh$$

erklären. Die Wellentheorie ist somit dem Bohr-Sommerfeld-Atommodell überlegen.

## ■ Quantenmechanische Behandlung des H-Atoms á la Schrödinger

Wir wollen nun zur Beschreibung der Elektronen als Materiewellen mit Hilfe der Schrödingergleichung übergehen. Die allgemeine zeitabhängige Schrödingergleichung hat die Form

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(r)\Psi.$$

*Bemerkungen.* 1.) Im Gegensatz zur Klassischen Mechanik beinhaltet die Schrödingergleichung keine 2. Zeitableitung. Das Anfangswertproblem ist daher bereits durch die Angabe von  $\Psi(t = 0)$  eindeutig lösbar, in der Klassischen Mechanik war stets auch der Anfangswert der Zeitableitung erforderlich. Das bedeutet für die Interpretation, dass  $\Psi$  einen Zustand bereits vollständig charakterisiert.

- 2.) Die Lösungsfunktionen sind komplexwertig. In der Klassischen Mechanik sind alle Lösungsfunktionen reellwertig, da sie beobachtbar sein müssen. Die Lösungen  $\Psi$  der Schrödingergleichung sind daher nicht für ein einzelnes Teilchen beobachtbar. Erst wenn wir zu

$$|\Psi|^2, \langle \Psi^* \hat{O} \Psi \rangle, \dots$$

übergehen, erhalten wir beobachtbare Größen.

- 3.) Bisher hatten wir es stets mit Gleichungen zu tun, die wir aus Postulaten ableiten konnten. Bei der Schrödingergleichung ist dies nicht der Fall, da es (noch) kein tieferliegendes physikalisches Konzept gibt, das die Schrödingergleichung ergibt.

Die Schrödingergleichung ist lediglich dadurch legitimiert, dass sie funktioniert. Sie ist allerdings die am besten getestete Gleichung. Es gibt (noch) kein Experiment im Geltungsbereich der nichtrelativistischen Quantenmechanik, das einen Widerspruch zu ihr erzeugt. ->

Wir wollen nun die Schrödingergleichung für die Bewegung des Elektrons im Coulombpotential  $V$  lösen. Dabei sind wir nur an stationären Lösungen interessiert, man kann diese als stehenden Materiewellen interpretieren. Betrachtet

man beispielsweise eine schwingende Saite in der Klassischen Mechanik, so wird die Energie die Schwingung durch die stationären Knoten charakterisiert. Man kann auch das Elektron als "eingespannt" ansehen (im Coulombpotential). Die stationären Lösungen charakterisieren die Bindungsenergie.

Das Coulomb-Potential ist kugelsymmetrisch, wir führen daher Kugelkoordinaten ein, da hier  $V$  nur von  $r$  abhängt.

$$V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

Diese Symmetrie wird es uns ermöglichen, die 3-dimensionale Schrödingergleichung in drei 1-dimensionale Differentialgleichungen zu separieren. Wir sind dann in der Lage, eine analytische Lösung zu berechnen. Im Gegensatz zum Bohr-Sommerfeld-Atommodell erhalten wir also die vollständige Wellenfunktion und nicht nur die Energieeigenwerte.

Um die Kugelsymmetrie auszunutzen, gehen wir nun zu Kugelkoordinaten über,

$$\begin{aligned} r^2 &= x^2 + y^2 + z^2, \\ \cos \vartheta &= \frac{z}{r}, \\ \tan \varphi &= \frac{y}{x}. \end{aligned}$$

Der Laplace-Operator hat hier die Form,

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \dots \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \underbrace{\left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]}_{-\frac{\hat{l}^2}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2} + V(r).$$

Für die Drehimpulsoperatoren gilt,

$$\begin{aligned} \hat{l} &= \hat{r} \times \hat{p} = (\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z), \\ \hat{l}_x &= \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \mapsto i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{l}^2 &\mapsto -\hbar^2 \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned}$$

*Wichtige Beobachtungen.* 1.)  $[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z$ , für alle zyklischen Permutationen von  $x$ ,  $y$  und  $z$ . Es ist also keine Richtung ist ausgezeichnet (Isotropie).

$$\Delta\hat{l}_x\Delta\hat{l}_y \geq \frac{\hbar}{2} |\hat{l}_z|,$$

d.h. nur eine Komponente kann gleichzeitig gemessen werden.

- 2.)  $[\hat{l}^2, \hat{l}_x] = [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = [\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0$ . Das Betragsquadrat  $\hat{l}^2$  und eine Komponente (z.B.  $\hat{l}_z$ ) des Drehimpulses sind gleichzeitig messbar.
- 3.)  $[\hat{H}, \hat{l}^2] = [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$ .  $\hat{H}$ ,  $\hat{l}^2$  und  $\hat{l}_z$  sind gleichzeitig messbar. Dies wird uns auf die Quantenzahlen  $(n, l, m)$  führen. Im Bohr-Sommerfeld-Modell hatten wir  $(n, n_\vartheta, n_\varphi)$ .  $\rightarrow$

Wir wollen die Schrödingergleichung nun separieren.

0. *Ansatz.* Wir sind an stationären Lösungen interessiert und gehen daher zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung über,

$$\underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right\}}_{\hat{H}} \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}),$$

wobei  $E$  unsere Separationskonstante bezeichnet. Aufgrund der Separation von Raum und Zeit erhalten wir den Ansatz,

$$\Psi(t, \vec{r}) = \Psi(\vec{r})e^{-\frac{iEt}{\hbar}}.$$

Für jede Separation entsteht eine Separationskonstante, die jeweils eine Quantenzahl enthält. Die Energie  $E$  enthält die Hauptquantenzahl  $n$ .

1. *Ansatz.* Separation in Radial- und Winkelanteil,

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi).$$

$R(r)$  heißt **Radialgleichung**. Zu ihr gehört die Differentialgleichung,

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1),$$

mit der Separationskonstanten  $l$ .

2. Ansatz.

$$Y(\vartheta, \varphi) = T(\vartheta)\Phi(\varphi).$$

$\Phi(\varphi)$  heißt **Azimutalgleichung**. Die dazugehörige Differentialgleichung ist

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + m^2 \Phi = 0,$$

mit der Separationskonstanten  $m$ .

$T(\vartheta)$  heißt **Polargleichung**.

$$\frac{1}{T \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial T}{\partial \vartheta} \right) + l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = 0.$$

### ■ Azimutalgleichung

Die einfachste Lösung besitzt die Azimutalgleichung, die wir als einzige explizit lösen wollen. Da das System durch eine  $2\pi$ -Drehung in sich selbst übergeht, ist es erforderlich, dass

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi).$$

Wir wählen daher als Ansatz

$$\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi},$$

der für  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  bereits ein VONS bildet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für eine  $2\pi$ -Integration ist 1, es muss also gelten,

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi &\stackrel{!}{=} 1 \\ \Leftrightarrow |A|^2 \int_0^{2\pi} |e^{im\varphi}|^2 d\varphi &= 2\pi \\ \Rightarrow A &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned}$$

Die Azimutale Lösung hat daher die Form,

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

$\Phi_m$  ist eine Eigenfunktion des Drehimpulsoperators  $\hat{l}_z$ ,

$$\hat{l}_z \Phi_m = \hbar m \Phi_m,$$

mit Eigenwert  $\hbar m$ ,  $m$  heißt **Magnetquantenzahl**.

$\Phi_m$  ist ein Beispiel für eine komplexe quantenmechanische Größe. Erst das Betragsquadrat  $|\Phi_m|^2$  ist beobachtbar.

Betrachten wir nur einen einzigen Zustand,

$$m = -1, 0, 1, \dots$$

so ist die Wahrscheinlichkeitsdichte homogen verteilt. Bei Überlagerungszuständen wie beispielsweise

$$m_1 = 1, \quad m_2 = -1, \quad \Phi_{\text{ges}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{m=+1} + \Phi_{m=-1}),$$

wird die Wahrscheinlichkeitsdichte durch eine trigonometrische Funktion beschrieben. Die Verteilung ist nicht mehr homogen, es treten Punkte auf mit Aufenthaltswahrscheinlichkeit Null. Diese Punkte nennen wir **Knoten**.

## ■ Polargleichung

Zur formalen Lösung der Polargleichung findet man in fast jedem einführenden Quantenmechanik Werk eine ausführliche Rechnung. Für das Verständnis ist viel mehr eine Interpretation der Lösung von Interesse.

Die Lösung der Polargleichung ist gegeben durch,

$$T_{lm}(\vartheta) = N_{lm} P_l^m(\cos \vartheta),$$

$N_{lm}$  beschreibt einen Normierungsfaktor,

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}},$$

$P_l^m(\cos \vartheta)$  sind die zugeordneten Legendre Polynome.

$$\begin{aligned}
P_0^0(\cos \vartheta) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \\
P_1^1(\cos \vartheta) &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta \\
P_1^0(\cos \vartheta) &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cos \vartheta \\
P_1^{-1}(\cos \vartheta) &= +\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta \\
P_2^2(\cos \vartheta) &= +\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \\
P_2^1(\cos \vartheta) &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \\
P_2^0(\cos \vartheta) &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} (2 \cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta) \\
P_2^{-1}(\cos \vartheta) &= +\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \\
P_2^{-2}(\cos \vartheta) &= -\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta
\end{aligned}$$

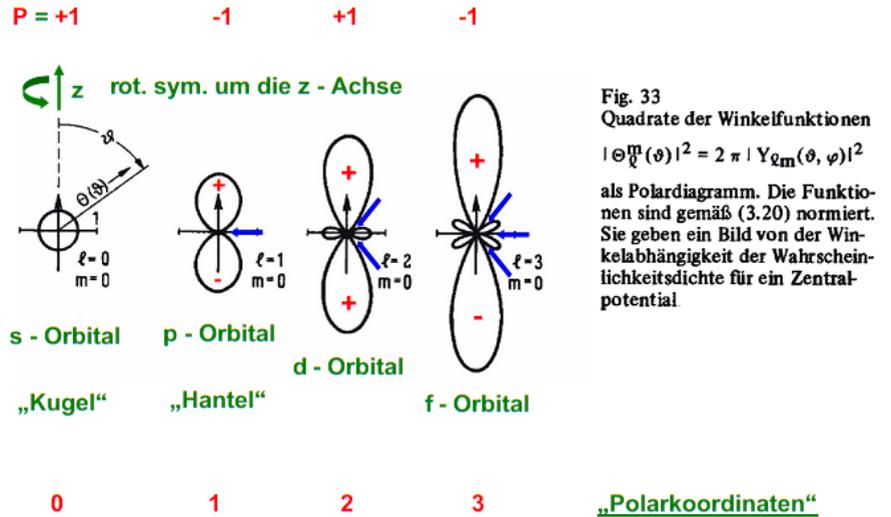
78      **Zugeordnete Legendre Polynome  $P_l^m$ .**

*Bemerkung.* Die Winkelabhängigkeit  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Phi_m \cdot T_{lm}$  ist für alle Zentralpotentiale gleich. Die Eigenfunktionen  $Y_{lm}$  heißen **Kugelflächenfunktionen**.  $\rightarrow$

**BSP** Für  $m = 0$  ist  $P_l^0(x) = P_l(x)$ . Die  $P_l(x)$  sind die Legendere Polynome,

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1). \quad \blacksquare$$

Eine Eigenschaft der Legendre Polynome ist, dass mit  $l$  die Anzahl der Nullstellen linear zunimmt. Darüber hinaus erhalten wir für gerades  $l$  auch gerade Funktionen und für ungerades  $l$  ungerade Funktionen. Die Parität ist daher gerade  $(-1)^l$ .



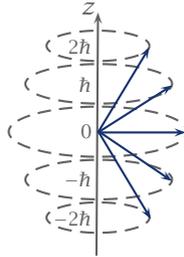
Mit den Lösungen für  $\Phi_m$  und  $T_{lm}$  lassen sich die  $Y_{lm}$  angeben,

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = T_{lm}(\vartheta)\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}N_{lm}P_l^m(\cos \vartheta)e^{im\varphi}.$$

Die Kugelflächenfunktionen  $Y_{lm}$  sind die Eigenfunktionen zu  $\hat{l}^2$  und  $\hat{l}_z$ ,

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 Y_{lm} &= \hbar(l+1)l Y_{lm}, & l &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ \hat{l}_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm}, & |m| &\leq l. \end{aligned}$$

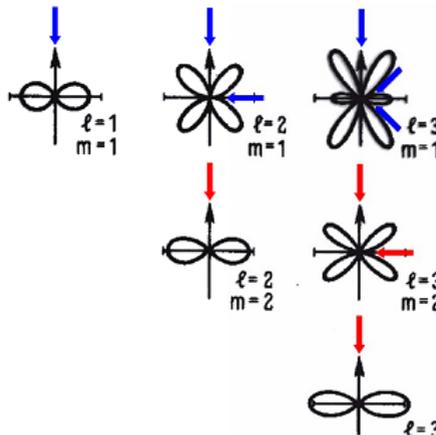
Der Faktor  $(l + 1)$  kommt im Bohr'schen Atommodell nicht vor und folgt aus der Wellennatur. Das bedeutet aber, dass der Drehimpulszustand nicht perfekt gemessen werden kann, denn  $\hat{l}^2$  ist immer größer als  $\hat{l}_z^2$ . Selbst für maximales  $m$ , ( $m = \pm l$ ) zeigt  $\hat{l}$  nicht exakt in  $z$ -Richtung.



79 **Mögliche Ausrichtung des Drehimpulses für  $l = 2$ ,  $m = -2, -1, 0, 1, 2$ .**

Für  $m \neq 0$  haben die Kugelflächenfunktionen außerdem eine  $(\sin \vartheta)^m$  Abhängigkeit. Für  $m \rightarrow \infty$  wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit jedoch in die Äquatorialebene gedrückt, was wieder dem Korrespondenzprinzip entspricht.

Betrachtet man die räumliche Darstellung der Kugelflächenfunktionen, so sieht man, dass die Quantenzahlen die Knotenflächen zählen. In den Knotenflächen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit Null.



80 **Knotenflächen der Kugelflächenfunktionen  $|Y_{lm}|^2$  in Abhängigkeit von  $l$  und  $m$ .**

(0, 0)



(1, 0)



(1, 1)



(2, 0)



(2, 1)



(2, 2)



(3, 0)



(3, 1)



(3, 2)



(3, 3)



## 81 Graphische Darstellung zugeordneter Kugelflächenfunktionen.

### ■ Radialgleichung

Zur Lösung der Radialgleichung führen wir die Substitution  $u = rR(r)$  durch.

$$|u(r)|^2 dr = |R(r)|^2 r^2 dr$$

beschreibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in der Kugelschale mit Radius  $[r, r + dr]$ .

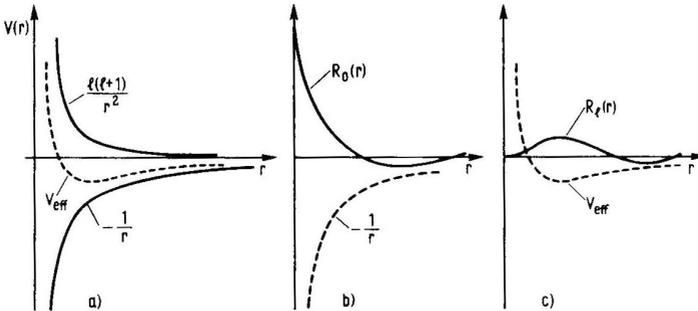
Die Gleichung nimmt nun eine uns bekannte Form an,

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar} \left[ E - \underbrace{V(r) - \frac{l(l+1)}{2mr^2}}_{V_{\text{eff}}} \right] u = 0.$$

Für die Energie erhalten wir so,

$$E_n = -\frac{R_\infty}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad l \leq n - 1.$$

Betrachtet man das effektive Potential, stellt man fest, dass für  $l = 0$  das Elektron eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern hat. Es pendelt quasi durch den Kern. Für  $l > 0$  wird die Potentialbarriere für abnehmendes  $r$  immer größer, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern ist Null.



T. Mayer-Kuckuk, Atomphysik, S. 66

- 82 Zum Zentrifugalpotential. a) Zustandekommen des effektiven Potentials, b,c) Wirkung der Potentialform auf die radiale Wellenfunktion  $R(r)$ .

Betrachten wir Lösungen für  $l = 0$ ,

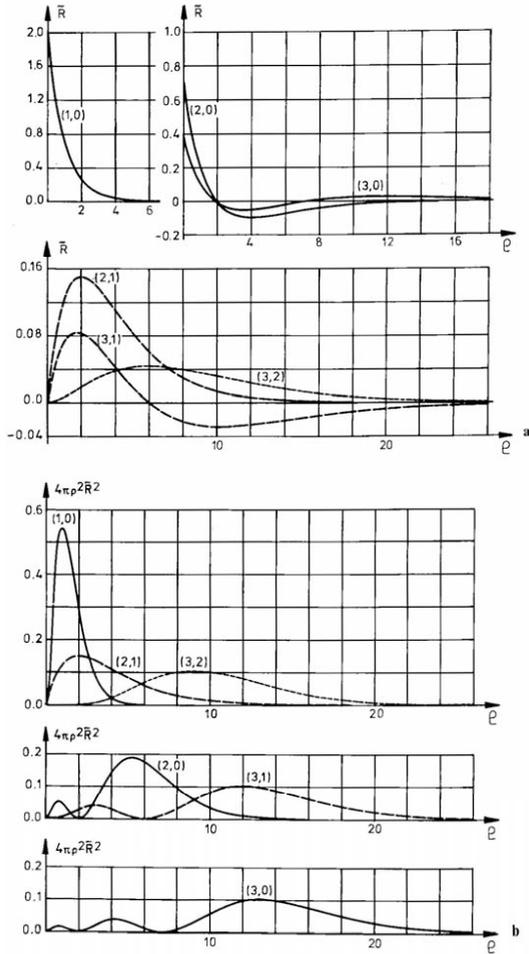
$$R_{10}(\rho) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} 1 \exp \left[ -\frac{\rho}{2} \right],$$

$$R_{20}(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (2 - \rho) \exp \left[ -\frac{\rho}{2} \right],$$

$$R_{30}(\rho) = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} (6 - 6\rho - \rho^2) \exp \left[ -\frac{\rho}{2} \right],$$

mit  $\rho = \frac{Zr}{na_0}$ , so werden diese durch die Laguerre-Polynome beschrieben.

Erhöht man  $l$  unter festem  $n$ , so verliert man bei jeder Erhöhung eine Knotenfläche. Bei  $l = n - 1$  sind keine Knotenflächen mehr vorhanden.  $R_{nl}$  hat  $(n - 1) - l$  Nullstellen.



H. Haken, H. C. Wolf, Atom-und Quantenphysik, S. 171

- 83 a) Die Wellenfunktion des Radialteils  $R(r)$  des H-Atoms ist gegenüber der dimensionslosen Koordinate  $\rho$  aufgetragen. Die an den Kurven angegebenen Indizes  $(1, 0)$ ,  $(2, 1)$ , ... usw. entsprechen  $(n, l)$ , wobei  $n$  die Hauptquantenzahl und  $l$  die Drehimpulsquantenzahl. b) Die entsprechenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in radialer Richtung, d.h.  $4\pi\rho^2(\tilde{R}(\rho))^2$  sind gegenüber der dimensionslosen Koordinate  $\rho$  aufgetragen.

Quantenzahlen			Eigenfunktionen $\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi)$
n	$\ell$	m	
1	0	0	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	$\pm 1$	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3}\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \vartheta$
3	1	$\pm 1$	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6}\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
3	2	$\pm 1$	$\psi_{32\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	$\pm 2$	$\psi_{32\pm 2} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$

T. Mayer-Kuckuk, Atomphysik, S. 70

## 84 Einige vollständige Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms.

### ■ Anwendung der H-Atom Wellenfunktion

Eine Schwäche des Bohr-Sommerfeld-Modells ist, dass man nicht vorhersagen kann, wie wahrscheinlich ein Übergang zwischen zwei Energieniveaus ist und daher die Lichtstärken im Spektrum des H-Atoms nicht erklären kann.

Wir wollen nun die Lösung der Schrödingergleichung für das H-Atom interpretieren und dadurch einige Probleme des Bohr-Sommerfeld-Modells lösen.

1.) Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im Kern.

$$l = 0 \Rightarrow |\Psi_{n00}(r = 0)|^2 = |R_{n0} Y_{00}|^2 = \frac{Z^2}{\pi a_0^3 n^3} \neq 0.$$

D.h. wir haben eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit, die mit zunehmendem  $n$  abnimmt.

$$l > 0 \Rightarrow |\Psi_{nlm}(r=0)|^2 = |R_{nl}Y_{lm}|^2 = 0,$$

d.h. dass Elektronen mit  $l > 0$  keine Wechselwirkung mit einem punktförmigen Kern haben.

2.) Für den Erwartungswert des "Bahnradius" erhalten wir

$$\langle r \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* r \Psi dV = \frac{a_0}{2Z} \left( (3n)^2 - l(l+1) \right).$$

$\langle r \rangle$  ist proportional zu  $n^2$ , was sich auch mit den Vorhersagen des Bohr-Sommerfeld-Modell deckt. Für maximalen Drehimpuls  $l = n - 1$  und große  $n$  ist  $l \approx n$  und daher

$$\langle r \rangle \sim \frac{a}{2Z} 2n^2 = \frac{a}{Z} n^2,$$

was gerade dem Radius der Keplerbahn entspricht.

Für die Varianz erhalten wir,

$$\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \begin{cases} \frac{n^2(n^2+2)}{4Z^2} a_0^2, & \text{für } l = 0, \\ \frac{n^2(2n+1)}{4Z^2} a_0^2, & \text{für } l = n - 1, \end{cases}$$

$$\frac{(\Delta r)^2}{\langle r \rangle^2} = \begin{cases} \frac{1}{9}, & \text{für } l = 0, \\ \frac{1}{2n}, & \text{für } l = n - 1, \end{cases}$$

d.h. die Unschärfe verschwindet für  $n \rightarrow \infty$  und  $l = n - 1$ , was gerade dem Korrespondenzprinzip entspricht.

Für den Fall, dass alle Quantenzahlen groß werden,

$$n \rightarrow \infty, \quad l = n - 1, \quad m = l,$$

erhalten wir wieder die klassischen Kreisbahnen. Diese hoch angeregten Zustände finden wir in **zirkularen Rydbergatomen**.

- 3.) Die Linienstärke im Spektrum ist proportional zur Wahrscheinlichkeit des Dipolübergangs ( $i$  - initial state,  $f$  - final state)

$$\sim |d_{i \rightarrow f}|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_f^* \hat{d} \Psi_i dV.$$

Falls das Integral verschwindet, d.h.  $|d_{i \rightarrow f}|^2 = 0$  ist der Übergang verboten und daher keine Linie im Spektrum sichtbar.

Wir wissen bereits, dass die Kugelflächenfunktionen den Winkelanteil der Wellenfunktion des H-Atoms beschreiben und dass diese Eigenfunktionen des Paritätsoperators sind. Wir können damit Auswahlregeln für optische Übergänge erarbeiten, denn damit  $d_{if} \neq 0$  muss die Parität des Integranden gerade sein, d.h. das Produkt von  $\Psi_i$  und  $\Psi_f$  muss ungerade Parität haben. Die Parität der  $Y_{lm}$  ist  $(-1)^l$ . Man kann zeigen, dass nur Übergänge mit

$$\Delta l = \pm 1$$

erlaubt sind. Berücksichtigt man noch den Drehimpuls des Photons, das bei einem optischen Übergang emittiert wird, erzwingt dies

$$\Delta m = 0, \pm 1.$$

Das Bohr-Sommerfeld-Modell konnte dies nicht erklären. Die Übergänge wurden lediglich postuliert (ohne physikalisches Verständnis). Jetzt können wir die Übergänge erklären und quantifizieren. Ist  $d_{i \rightarrow f}$  endlich, beginnt ein Dipol bei der Übergangsfrequenz zu schwingen. Die Übergangsfrequenz ist viel höher als die Absorptions bzw. Emissionsrate, es sind daher viele Oszillationen notwendig, bis der Übergang abgeschlossen ist. Optische Übergänge entsprechen also Oszillationen hoher Güte. Die Dämpfung durch die Abstrahlung ist dabei schwach. Die Anregungsenergie wird dabei in Form von Photonen abgegeben.

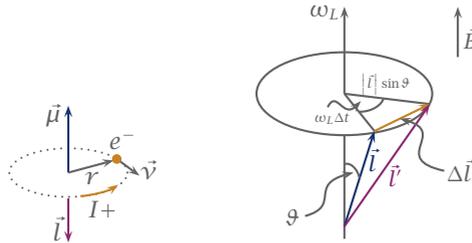
### 3-3 Drehimpuls und Spin

#### ■ Klassische Betrachtung

Klassisch betrachtet, bewegt sich das Elektron auf einer Kreisbahn um den Kern. Damit ist ein Strom

$$I = \frac{q}{\tau} = -\frac{e}{T} = -\frac{ev}{2\pi r},$$

verbunden, der die Fläche  $A = \pi r^2$  umschließt. Durch diesen Strom wird ein



- 85 Klassisches magnetisches Dipolmoment (links) Präzession eines Kreisels mit Bahndrehimpuls  $\vec{l}$  in einem auf das Dipolmoment  $\vec{\mu}$  wirkendem Feld  $\vec{B}$  (rechts)

magnetisches Dipolmoment induziert,

$$\mu = I \cdot A = -\frac{ev}{2\pi r} \pi r^2.$$

Mit  $\vec{l} = m (\vec{r} \times \vec{v})$  ist,

$$\vec{\mu} = -\underbrace{\frac{e}{2mc}}_{=:\mu_B} \vec{l}.$$

Wobei  $\mu_B$  als **Bohr'sches Magneton** bezeichnet wird.

Befindet sich das Atom in einem äußeren Magnetfeld, wechselwirken das Feld und der Dipol. Die Energie des Dipols im äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  ist

$$V_{\text{pot}} = -\vec{\mu} \vec{B}.$$

Das daraus resultierende Drehmoment

$$\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \frac{d\vec{l}}{dt}$$

bewirkt eine Änderung des Drehimpulses. Nun ist

$$\begin{aligned} \Delta \vec{l} &= \omega_L \Delta t |\vec{l}| \sin \vartheta \\ \Rightarrow \frac{d\vec{l}}{dt} &= \omega_L |\vec{l}| \sin \vartheta \stackrel{!}{=} |\vec{\mu}| |\vec{B}| \sin \vartheta \\ \Rightarrow \omega_L &= \frac{\mu B}{l} = -\frac{eB}{2mc}. \end{aligned}$$

Infolge des Drehmoments präzediert also  $\vec{l}$  um  $\vec{B}$  mit der Winkelfrequenz  $\omega_L$ , der sogenannten **Larmor-Frequenz**.

### ■ Quantenmechanische Betrachtung

In unserem bisherigen Modell hatten wir ein kugelsymmetrisches Coulombpotential angenommen. Durch das induzierte Magnetfeld der Elektronenbewegung wird jedoch eine Richtung ausgezeichnet und daher die Kugelsymmetrie gebrochen. Wir wollen nun untersuchen, wie wir dies in unserer Beschreibung mit Hilfe der Schrödingergleichung einbringen können.

Aufgrund der beobachteten Symmetrien und des Korrespondenzprinzips gilt auch in der Quantenmechanik  $\hat{\mu} \parallel \hat{l}$ .

$$\begin{aligned} \hat{\mu} &= c \cdot \hat{l}, \quad c \in \mathbb{R} = \text{const.} \\ \Rightarrow \mu_z &= \pm g_l \mu_M m_l, \end{aligned}$$

wobei  $g_l$  den **g-Faktor**,  $m$  die Magnetquantenzahl und  $\mu_M$  das **Einheitsmoment** bezeichnen.  $g_l$  beschreibt, wie groß das quantenmechanische Moment im Vergleich zum klassischen ist.

$$\begin{aligned} \mu_M &= \frac{q\hbar}{2mc}, && \text{Einheitsmoment,} \\ \mu_B &= \frac{e\hbar}{2m_e c}, && \text{Elektron,} \\ \mu_K &= \frac{e\hbar}{2m_p c}, && \text{Kern.} \end{aligned}$$

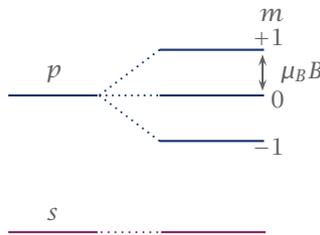
**Bsp** Für das Elektron ist  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 0.58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$ . ■

Da  $\hat{\mu} \parallel \hat{l}$ , erfüllen  $\hat{\mu}$  und  $\hat{l}$  dieselben Vertauschungsrelationen, d.h. man kann bspw. nur  $\hat{\mu}_z$  und  $\hat{\mu}^2$  gleichzeitig messen und misst man  $\hat{\mu}_z$ , so misst man automatisch  $\hat{l}_z$  und vice versa.

Betrachten wir das Magnetfeld  $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ , so führt das magnetische Moment zu einer Energieaufspaltung. Diese ist gegeben durch,

$$V = \hat{\mu}_z \hat{B}_z = g_l \mu_B m_l B_z, \quad m_l = -l, \dots, l,$$

d.h. es gibt  $2l + 1$  äquidistante Energieniveaus pro  $l$ -Zustand. Diese Aufspaltung nennt man den **Zeeman-Effekt**, der erstmals 1896 von Pieter Zeeman<sup>15</sup> beobachtet wurde.



## 86 Aufspaltung der $s$ und der $p$ Linie des H-Atoms im Magnetfeld.

Messungen der Larmorfrequenz zeigen  $g_l = 1$ . Dies deckt sich auch mit der klassischen Erwartung.

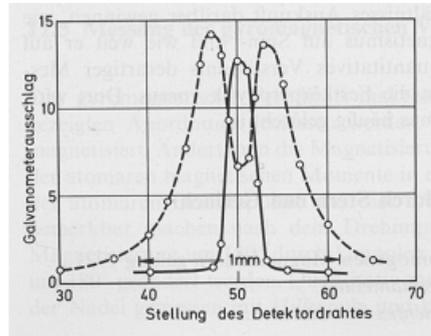
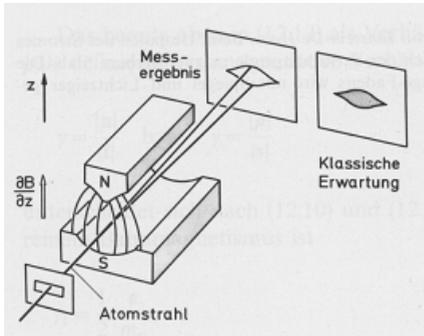
Neben dem Bahndrehimpuls gibt es jedoch noch eine weitere Quelle für das magnetische Drehmoment, den Spin, der 1921 im Stern-Gerlach-Experiment entdeckt wurde.

Mit dem Bohr-Sommerfeld-Modell wurde zu diesem Zeitpunkt gerade vorhergesagt, dass neben der Quantelung des Bahnradius und der Exzentrizität auch die Orientierung des magnetischen Moments im Raum gequantelt ist. Stern<sup>16</sup> und

<sup>15</sup>Pieter Zeeman (\* 25. Mai 1865 in Zonnemaire Schouwen-Duiveland, Zeeland, Niederlande; † 9. Oktober 1943 in Amsterdam) war ein niederländischer Physiker und Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1902.

<sup>16</sup>Otto Stern (\* 17. Februar 1888 in Sohrau, Oberschlesien; † 17. August 1969 in Berkeley) war ein deutscher, später in die USA emigrierter Physiker.

Gerlach<sup>17</sup> wollten mit ihrem Experiment diese Quantisierung nachweisen.



87 Aufbau des Stern-Gerlach Experiments

Im Experiment wurde ein Silberstrahl durch ein sehr inhomogenes Magnetfeld auf eine Fotoplatte gestrahlt. Die neutralen Silberatome besitzen ein magnetisches Moment, das sich am Feld ausrichtet. Klassisch müsste jede Ausrichtung des magnetischen Moments möglich sein und daher ist eine kontinuierliche Verteilung im Magnetfeld zu erwarten.

Die quantenmechanische Betrachtung besagt, dass die Atome abhängig von ihrem  $\mu_z$ -Zustand diskrete Winkel einstellen. Diejenigen mit  $\mu_z = 0$  werden das Magnetfeld gerade durchqueren, andere werden sich zu den Bereichen mit dichteren bzw. dünneren Magnetfeldlinien verschieben. Geht man davon aus, dass alle Atome sich im gleichen  $l$ -Zustand befinden, müssten nach unserer bisherigen Überlegung auf der Platte  $2l + 1$ , d.h. eine ungerade Zahl 3,5,7,... an Linien zu sehen sein. Man sah jedoch genau 2. Ursache hierfür ist der Spin der Elektronen im Silber  $s = \frac{1}{2} \Rightarrow 2s + 1 = 2$ .

Zu diesem Zeitpunkt wusste man jedoch noch nichts über den Spin und dass die Elektronen im Silber im Grundzustand Spin  $\frac{1}{2}$  und Drehimpuls Null haben. Für einen Nachweis der Aufspaltung reichte der Befund jedoch aus. 1927, 6 Jahre später, haben Phipps und Taylor die Aufspaltung in zwei Linien auch beim Wasserstoff nachgewiesen.

Das Experiment zeigt, dass es neben dem magnetischen Moment hervorgeru-

<sup>17</sup>Walther Gerlach (\* 1. August 1889 in Biebrich am Rhein; † 10. August 1979 in München) war ein deutscher Physiker.

fen durch den Bahndrehimpuls  $l$  auch eines aufgrund des Spins  $s$  gibt,

$$\hat{\mu}_s = g_s \mu_B \frac{\hat{S}}{\hbar}.$$

Der Elektronenspin ist auch makroskopisch messbar, was bereits 1915 im Einstein-de-Haas-Experiment<sup>18</sup> durchgeführt wurde. Dabei beobachtet man einen Eisenstab im homogenen Magnetfeld. Dieses führt dazu, dass sich die Elektronenspins in eine Richtung ausrichten. Kehrt man nun das Magnetfeld um, drehen sich auch die magnetischen Momente des Spins, was zu einem Drehmoment führt. Dieses Drehmoment kann man messen und damit  $g_s$  berechnen.

$$\Rightarrow g_s \approx 2.$$

Der Spin erzeugt also ein dopplet so großes magnetisches Moment, wie eine klassisch mit  $\frac{1}{2}\hbar$  rotierende geladene Kugel. Das magnetische Moment aufgrund des Spins "funktioniert" also anders als das aufgrund des klassischen Bahndrehimpulses. Es ist ein rein quantenmechanischer Effekt ohne klassischen Grenzfall.

Um den  $g$ -Faktor des Spins zu erklären, müssen wir relativistische Effekte berücksichtigen. Die Schrödingergleichung ist eine nichtrelativistische Gleichung. Dirac<sup>19</sup> erweiterte die Schrödingergleichung auf die spezielle Relativitätstheorie, indem er forderte, dass sie die relativistische Energie-Impuls-Beziehung erfüllen muss und nur eine 1. Ableitung nach der Zeit enthalten darf.

Er stellte fest, dass nur eine Wellenfunktion, die von mindestens 4 Parametern abhängt, diese Forderungen erfüllen kann. Das erste Parameterpaar stellt dabei das Teilchen mit Spin Up und Down dar und das zweite Parameterpaar das Antiteilchen mit Spin Up und Down.

Dirac errechnete mit dieser Theorie, dass  $g_s = 2$  exakt. Der Nobelpreisträger Dehmelt<sup>20</sup> bestimmte jedoch 1987 die Größe experimentell mit sehr hoher Präzession auf,

$$g_s = 2.002319304386.$$

---

<sup>18</sup>Wander Johannes de Haas (\* 2. März 1878 in Lisse nahe Leiden; † 26. April 1960 in Bilthoven) war ein niederländischer Physiker und Mathematiker.

<sup>19</sup>Paul Adrien Maurice Dirac, OM (\* 8. August 1902 in Bristol; † 20. Oktober 1984 in Tallahassee) war ein britischer Physiker, Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1933 und Mitbegründer der Quantenphysik.

<sup>20</sup>Hans Georg Dehmelt (\* 9. September 1922 in Görlitz) ist ein deutsch-US-amerikanischer Physiker und Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1989.

Feynman<sup>21</sup> erweiterte die Theorie von Dirac durch die Korrekturterme,

$$g_s = 2.00 \left( 1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right), \quad \alpha \text{ Feinstrukturkonstante}$$

und war damit in der Lage auch die Nachkommastellen korrekt vorherzusagen. Der Unterschied zwischen theoretischem und empirisch ermittelten Wert beträgt heute  $\frac{\Delta g}{g} = 10^{-11}$ .

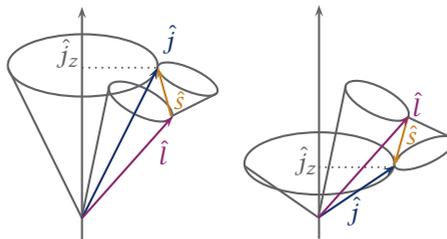
Dies ist auch ein Anhaltspunkt dafür, wie "gut" die Quantenmechanik ist. Jede Theorie, die die Quantenmechanik wiederlegen bzw. ersetzen will, müsste mindestens die selbe Präzession erreichen.

### ■ Addition von Drehimpulsen

Wir wollen nun den Fall untersuchen, wenn sowohl Spin als auch Bahndrehimpuls vorhanden sind. Klassisch addieren sich Bahndrehimpuls  $\vec{l}$  und Spin  $\vec{s}$  vektoriell zum Gesamtdrehimpuls  $\vec{j}$ ,

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}.$$

In der Quantenmechanik sind  $\hat{s}$  und  $\hat{l}$  unscharf, z.B. sind nur Betrag und die z-Komponente bekannt und daher x- und y-Komponente unscharf. Diese Unschärfe überträgt sich auch auf  $\hat{j}$ .



- 88 Addition von  $\hat{s}$  und  $\hat{l}$  zu  $\hat{j}$ . Maximale Einstellung (links) und minimale Einstellung (rechts).

<sup>21</sup>Richard Phillips Feynman (\* 11. Mai 1918 in New York; † 15. Februar 1988 in Los Angeles) war ein US-amerikanischer Physiker und Nobelpreisträger für Physik des Jahres 1965.

Die Eigenwertgleichungen des Gesamtdrehimpulses  $\hat{j}$  ergeben sich analog zu den des Drehimpulses  $\hat{l}$  und des Spins  $\hat{s}$ ,

$$\begin{aligned}\hat{l}^2 |l, m_l\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |l, m_l\rangle, \\ \hat{s}^2 |s, m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle, \\ \Rightarrow \hat{j}^2 |j, m_j\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |j, m_j\rangle, \\ \hat{l}_z |l, m_l\rangle &= m_l\hbar |l, m_l\rangle, \\ \hat{s}_z |s, m_s\rangle &= m_s\hbar |s, m_s\rangle, \\ \Rightarrow \hat{j}_z |j, m_j\rangle &= m_j\hbar |j, m_j\rangle.\end{aligned}$$

Über die Eigenwerte wissen wir,

$$l \leq n-1, \quad m_l = -l, \dots, l, \quad m_s = -s, \dots, s.$$

Wie verhält es sich nun mit den Eigenwerten des Gesamtdrehimpulses?

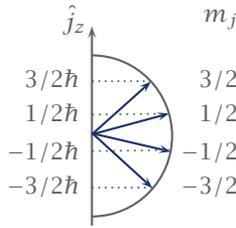
$$\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z, \quad \Rightarrow m_j = m_l + m_s,$$

Wir können also Maximal- und Minimalwerte von  $m_j$  angeben und damit auch den Wertebereich von  $j$ . Für  $l > s$  gilt,

$$\begin{aligned}m_j^{\max} &= m_l^{\max} + m_s^{\max} = l + s = j^{\max}, \\ m_j^{\min} &= m_l^{\min} + m_s^{\min} = l - s = j^{\min}, \\ \Rightarrow j &= l - s, l - s + 1, \dots, l + s.\end{aligned}$$

Für ein einzelnes Elektron ist  $s = \frac{1}{2}$ , d.h. es gibt zu gegebenem  $l$  jeweils nur zwei mögliche Gesamtdrehimpulse  $j$  (außer für  $l = 0$ ). Für  $m_j$  gibt es dafür  $2j + 1$  Einstellmöglichkeiten.

**Bsp**  $l = 2, s = \frac{1}{2}$ , dann ist  $j = \frac{3}{2}$  oder  $\frac{5}{2}$ . ■



89 Einstellmöglichkeiten für  $\hat{j}_z$  für  $j = \frac{3}{2}\hbar$

	$s$	$p$	$d$	$f$
$l$	0	1	2	3
$j$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}, \frac{7}{2}$
Notation	$S_{1/2}$	$P_{3/2}, P_{3/2}$	$D_{3/2}, D_{5/2}$	$F_{5/2}, F_{7/2}$

90 Mögliche Gesamtdrehimpulse für ein Eielektronen-Atom.

### 3-4 Atome im Magnetfeld - Zeeman Effekt

Um zu verstehen, wie sich Atome im Magnetfeld verhalten, müssen wir untersuchen, wie das magnetische Moment des Drehimpulses  $\hat{\mu}_l$  und das des Spins  $\hat{\mu}_s$  zu einem Gesamtmoment  $\hat{\mu}_j$  koppeln.

Während  $\hat{\mu}_s \parallel \hat{s}$  und  $\hat{\mu}_l \parallel \hat{l}$ , gilt aufgrund der verschiedenen  $g$ -Faktoren für  $s$  und  $l$  nun  $\hat{\mu}_j \nparallel \hat{j}$ .

Des Weiteren sind  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  durch die magnetische Wechselwirkung aneinander gekoppelt. Dabei wechselwirken die magnetischen Momente (Dipol/Dipol-Wechselwirkung) und resultieren in konstanten Energiewerten. Z.B. wird die Wechselwirkungsenergie im tiefsten Zustand konstant minimal gehalten.

Unser Ziel ist es nun,  $\hat{\mu}_j$  durch Größen auszudrücken, die wir gleichzeitig messen können, das sind

$$\hat{j}_z, \hat{j}^2, \hat{l}^2, \hat{s}^2.$$

#### ■ Klassische Betrachtung

Zeeman beobachtete (1896) eine Aufspaltung der Spektrallinien im Magnetfeld, lange bevor man überhaupt ein Verständnis über das Zustandekommen der

Spektrallinien hatte.

Das klassische Modell geht zurück auf Lorentz. Wir betrachten ein Elektron auf einer festen Kreisbahn mit Radius  $r$ , Zentrifugal- und Coulombkraft kompensieren sich gerade.

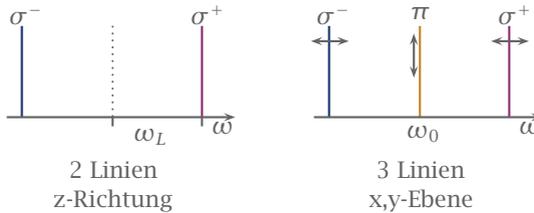
Im Magnetfeld wirkt aufgrund der Bewegung eine zusätzliche Kraft, die Lorentzkraft,

$$\begin{aligned}
 F_L &= \frac{1}{c} e (\vec{v} \times \vec{B}) = \frac{1}{c} e \omega' r B, \\
 \Rightarrow m \omega^2 r &= m \omega'^2 r + \frac{1}{c} e \omega' r B, \\
 \Leftrightarrow \frac{m (\omega^2 - \omega'^2)}{\omega'} &= \frac{1}{c} e B.
 \end{aligned}$$

Entwickle in  $\omega$  mit  $\Delta\omega = \omega - \omega'$

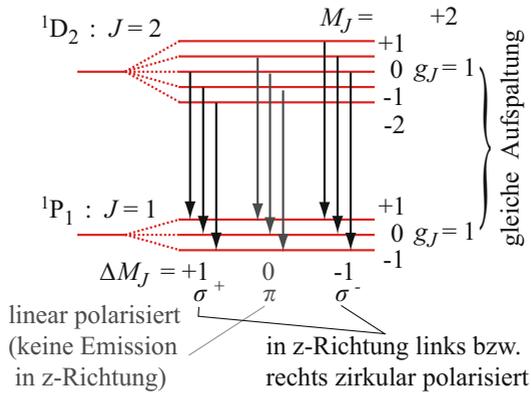
$$\begin{aligned}
 \frac{\omega^2 - \omega'^2}{\omega'} &= \frac{(\Delta\omega + \omega')^2 - \omega'^2}{\omega'} = \frac{\Delta\omega^2 + 2\omega' \Delta\omega + \omega'^2 - \omega'^2}{\omega'} \approx 2\Delta\omega \\
 \Rightarrow \Delta\omega &= \pm \frac{eB}{2mc} = \pm \omega_{\text{Larmor}}
 \end{aligned}$$

Je nach Umlaufsinn wird daher das Elektron schneller bzw. langsamer.



91 **Spektrum des Zeeman-Effekts (schematisch).**

Klassisch ist das Elektron als "rotierende Antenne" zu verstehen. In z-Richtung beobachtet man links- und rechts zirkular polarisiertes Licht, sogenanntes  $\sigma^-$  bzw.  $\sigma^+$ -Licht. In der  $x, y$ -Ebene beobachtet man neben dem in z-Richtung zirkular polarisiertem  $\sigma^-$  und  $\sigma^+$  Licht, auch noch linear polarisiertes  $\pi$ -Licht. Dies nennt man den **normalen Zeeman-Effekt**.



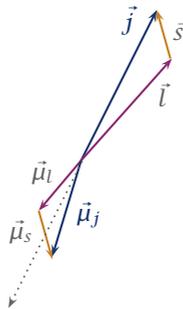
I. Hertel, C. P. Schulz, Atome, Moleküle und optische Physik 1, S. 287

92 **Aufspaltung bei normalen Zeeman-Effekt.**

**■ Quantenmechanische Betrachtung**

Das Elektron hat einen Bahndrehimpuls  $\hat{l}$  und einen Spin  $\hat{s}$ , der Gesamtdrehimpuls ist  $\hat{j}$ . Wie verhält es sich nun mit dem gesamt magnetischen Moment?

$$\hat{\mu}_j = \hat{\mu}_s + \hat{\mu}_l = g_s \mu_B \frac{\hat{s}}{\hbar} + g_l \mu_B \frac{\hat{l}}{\hbar} = \frac{\mu_B}{\hbar} (2\hat{s} + \hat{l}) = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{j} + \hat{s}) \nparallel \hat{j}.$$



93 **Addition von  $\vec{\mu}_s$  und  $\vec{\mu}_l$  im Vergleich zu  $\vec{s}$  und  $\vec{l}$ .**

Wir wollen nun die Wechselwirkungsenergie des gesamtmagnetischen Moments mit einem äußeren Magnetfeld berechnen. Dabei gehen wir zunächst davon aus, dass dieses Feld "schwach" ist und die Orientierung von  $\mu_s$  und  $\mu_l$  nicht verändert wird.

$$V_B = -\hat{\mu}_j \hat{B}.$$

Um in einer "guten Basis" zu rechnen, projizieren wir  $\hat{\mu}$  auf  $\hat{j}$  und  $\hat{B}$  auf  $\hat{j}$ ,

$$V_B = \left( -\hat{\mu}_j \frac{\hat{j}}{|\hat{j}|} \right) \left( \frac{\hat{j}}{|\hat{j}|} \hat{B} \right) = \frac{\mu_B (\hat{s} + \hat{j}) \hat{j} (\hat{j} \hat{B})}{\hbar \hat{j}^2} = \frac{\mu_B}{\hbar} B \hat{j}_z \left( \frac{\hat{j}^2 + \hat{s} \hat{j}}{\hat{j}^2} \right).$$

Wir wollen diesen Ausdruck nun auf Größen reduzieren, die wir gleichzeitig messen können. Betrachte dazu,

$$\hat{l}^2 = (\hat{s} + \hat{j})^2 = \hat{j}^2 + 2\hat{s} \hat{j} + \hat{s}^2.$$

Einsetzen ergibt,

$$V_B = \frac{\mu_B}{\hbar} B \hat{j}_z \left( \frac{\hat{j}^2 - \frac{\hat{j}^2 - \hat{l}^2 + \hat{s}^2}{2}}{\hat{j}^2} \right)$$

Wir haben damit  $V_B$  durch gleichzeitig messbare Größen ausgedrückt. Ersetzen der Operatoren durch Eigenwerte, ergibt sich

$$\Delta E = \mu_B B m_j \underbrace{\left[ \frac{j(j+1) + \frac{1}{2}(j(j+1) + s(s+1) - l(l+1))}{j(j+1)} \right]}_{:=g_j}.$$

$g_j$  nennt man den **Landé'schen  $g$ -Faktor**,  $g_j \in [1, 2]$ . Die Energieaufspaltung aufgrund des Zeeman-Effekts findet also in  $2j + 1$  äquidistante Niveaus statt.

*Bemerkungen.* 1.)  $s = 0 \Rightarrow j = l, g_j = 1 = g_l,$

$$l = 0 \Rightarrow j = s, g_j = 2 = g_s.$$

2.) Übergänge zwischen den Niveaus können nur für  $\Delta m_j = 0, \pm 1$  stattfinden.

3.) Der **normale Zeeman-Effekt** tritt auf, wenn der  $g$ -Faktor im angeregten und im Grundzustand gleich ist. D.h.  $s = 0$ , denn ein Übergang erfordert  $\Delta l = \pm 1$ , dies ist nur bei Mehrelektronen-Atomen möglich. Die Energieniveaus spalten sich dabei in eine ungerade Anzahl  $2l + 1$  auf.

Der **anomale Zeeman-Effekt** tritt in allen anderen Fällen auf. Die Anzahl der Energieniveaus  $2j + 1$  kann hier auch gerade sein, wenn  $j$  halbzahlig ist

Der normale Zeeman Effekt tritt also nur auf, wenn der Spin keine Rolle spielt. Der anomale Zeeman-Effekt ist somit häufiger anzutreffen.  $\rightarrow$

*Ausblick.* Im Abschnitt über Kernphysik haben wir gesehen, dass auch Protonen und Neutronen einen Spin besitzen. Dieser kann ebenfalls mit den magnetischen Momenten der Elektronen wechselwirken.

	Spin	Landé-Faktor
Proton	$\frac{1}{2}$	$g_p = 5.586\dots$
Neutron	$\frac{1}{2}$	$g_n = -3.826\dots$

Diese Wechselwirkung werden wir im Rahmen der Hyperfeinstruktur genauer untersuchen.  $\rightarrow$

### 3-5 Feinstruktur

Im Experiment sehen wir für gleiches  $l$  aber unterschiedliches  $j$  eine weitere Aufspaltung der Energieniveaus. Sie heißt **Feinstrukturaufspaltung** und fasst mehrere Phänomene zusammen. Um diese zu erklären, müssen wir unser Modell weiter verfeinern. Dazu werden wir zunächst die Kopplung des Spins  $s$  und des Bahndrehimpulses  $l$  untersuchen. Anschließend werden wir - wie bereits im Bohr-Sommerfeld-Modell - relativistische Korrekturen einführen, denn magnetische Phänomene sind relativistische Wechselwirkungen 1. Ordnung.

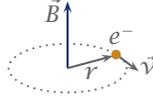
#### ■ Spin-Bahn-Wechselwirkung

Die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Spins mit dem Magnetfeld aufgrund der Bahnbewegung des Elektrons ruft eine Aufspaltung der Energieniveaus hervor.

veaus hervor

$$\Delta E_{ls} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l,$$

wobei  $\vec{\mu}_s$  das magnetische Moment des Spins im Ruhesystem des Elektrons und  $\vec{B}_l$  das Magnetfeld aufgrund des Bahndrehimpulses  $\vec{l}$  am Ort des Elektrons beschreibt.



#### 94 Bewegung des Elektrons.

Das Ruhesystem des Elektrons ist jedoch ein beschleunigtes Bezugssystem (Kreisbewegung), d.h. *kein* Inertialsystem. Berechnen wir zunächst das Magnetfeld mit dem Biot-Savart'schen Gesetz in diesem Bezugssystem,

$$\vec{B}_l = \frac{I}{c} \int_0^{2\pi} \frac{d\vec{s} \times \vec{r}}{r^3} = -\frac{eZ}{c} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3} = \frac{eZ}{mcr^3} \vec{l},$$

müssen wir das Ergebnis ins Laborsystem zurücktransformieren. Die etwas längliche Rechnung sei als Übungsaufgabe überlassen. Es ergibt sich,

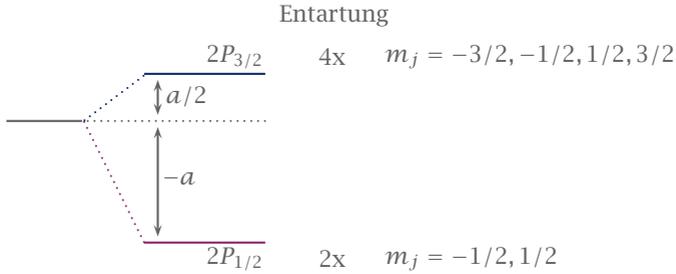
$$\vec{B}_l = \frac{1}{2} \frac{Ze}{mcr^3} \vec{l}.$$

Der Faktor  $\frac{1}{2}$  heißt Thomas-Faktor und entsteht bei Transformation von Nichtinertialsystemen. Übertragen wir dieses Ergebnis auf Operatoren mit  $\hat{\mu}_s = -2\mu_B \frac{\hat{s}}{\hbar}$  für  $g_s = 2$  erhalten wir,

$$\Delta E_{ls} = -\hat{\mu}_s \hat{B}_l = 2 \frac{e\hbar}{2mc} \frac{Ze}{2mcr^3} \frac{\hat{l}\hat{s}}{\hbar} = \underbrace{\frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3}}_{\rho(r)} \hat{l}\hat{s}.$$

Diesen Ausdruck kann man als Dipol/Dipol-Wechselwirkung identifizieren. Mit dem Erwartungswert des H-Atoms von  $\frac{1}{r^3}$  kann  $\Delta E_{ls}$  berechnet werden,

$$\Delta E_{ls} \approx 10^{-4} \text{eV} \hat{=} 24.2 \text{GHz} \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta E_{ls}}{E} \approx 10^{-5} \text{eV}.$$



95    **Aufspaltung durch Spin-Bahn-Wechselwirkung.**

Der Wert ist klein im Vergleich zur Bindungsenergie aber relativ groß im Frequenzspektrum, daher ist er auch schon so früh entdeckt worden.

Die Größe des Magnetfeldes das vom Bahndrehimpuls erzeugt wird,

$$B_l = \frac{\Delta E_{ls}}{\mu_B} = \frac{10^{-4} \text{eV}}{\mu_B} \approx 1T.$$

Die Forderung, dass das äußere Magnetfeld "schwach" sein soll, bezieht sich auf diese Größe. Erst wenn äußere Magnetfelder der Größenordnung 1T anliegen, wird die Kopplung von  $s$  und  $l$  beeinflusst.

Betrachten wir nun die Änderung des Hamilton-Operators,

$$\hat{H}_{FS} = \rho(r) \hat{l}\hat{s},$$

und verwenden  $\hat{l}\hat{s} = \frac{1}{2} (\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2)$ , ergibt sich

$$\langle \Delta E_{ls} \rangle = \langle \hat{H}_{FS} \rangle = \langle \rho(r) \hat{l}\hat{s} \rangle = \langle \rho(r) \rangle \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)],$$

wobei  $\langle \rho(r) \rangle = \frac{a}{\hbar^2}$ .  $a$  heißt **Spin-Bahn-Kopplungskonstante**. Für das H-Atom ist

$$\langle \Delta E_{ls} \rangle = a \cdot \begin{cases} \frac{l}{2}, & \text{für } j = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{l+1}{2}, & \text{für } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Die Lorentzkraft wirkt  $\perp$  zur Bewegungsrichtung und verrichtet daher keine Arbeit. Es kann somit nicht zur Verschiebung der Energie kommen. Wir sehen

dies auch bei der Aufspaltung, denn  ${}^2P_{3/2}$  ist 4-fach entartet, während  ${}^2P_{1/2}$  lediglich 2-fach entartet ist. Der Linienschwerpunkt bleibt daher erhalten. Für  $l = 0$  haben wir keine Aufspaltung.

Betrachten wir die Größe  $a$  genauer,

$$\begin{aligned} a &:= \hbar^2 \langle \rho(r) \rangle = \hbar^2 \int R_{nl}^* \rho(r) R_{nl} r^2 dr \dots \\ &= \frac{mc^2}{2} (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3 (l(l + \frac{1}{2})(l + 1))}, \end{aligned}$$

so ergibt sich als Energieskala die Ruheenergie  $\frac{mc^2}{2}$ .

Wenn wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung in  $\alpha$  entwickeln, hat diese die Ordnung  $\alpha^4$ . Um die Wirkung vollständig zu beschreiben, müssen wir daher nach anderen Effekten suchen, die die selbe Ordnung haben.

### ■ Relativistische Massenzunahme

Betrachte den relativistischen Ausdruck für die Energie des Elektrons,

$$E = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2}.$$

und entwickle in  $\vec{p}$ , so ergibt sich

$$E = mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + \dots$$

Verglichen mit der Energie  $\frac{\vec{p}^2}{2m}$  gilt für den ersten relativistischen Korrekturterm

$$\frac{\vec{p}^4/8m^3c^2}{\vec{p}^2/2m} = 4m^2 \frac{\vec{p}^2}{c^2} \sim \left(\frac{v}{c}\right)^2 \approx \alpha^2 \sim 5 \cdot 10^{-5}.$$

Die Korrektur der relativistischen Massenzunahme hat daher die Ordnung  $\alpha^4$  und somit dieselbe Ordnung in  $\alpha$  wie die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Sie erzeugt daher vergleichbar starke Effekte.

Für eine exakte Rechnung müssten wir nun zur relativistischen Schrödingergleichung (Dirac) übergehen. Wir wollen uns jedoch mit Korrekturen bis zur 4. Ordnung begnügen. Wenden wir die Störungstheorie auf die H-Wellenfunktion

an, ergibt sich,

$$\begin{aligned} \langle \Delta E_{\text{rel}} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{8m^3c^4} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_{nlm}^* \nabla^4 \Psi_{nlm} \, dV \\ &= -\frac{mc^2}{2} (Z\alpha)^4 \left( \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)} - \frac{3}{4n^4} \right). \end{aligned}$$

### ■ Feinstrukturaufspaltung.

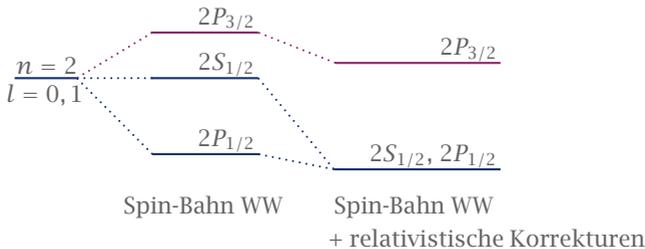
Wir wollen nun die Abweichung aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der relativistische Massenzunahme in der Feinstrukturaufspaltung zusammenfassen,

$$\Delta E_{\text{FS}} = \Delta E_{ls} + \Delta E_{\text{rel}}.$$

Für das H-Atom mit  $j = l \pm \frac{1}{2}$  ergibt sich somit,

$$\langle \Delta E_{\text{FS}} \rangle = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right).$$

$\Delta E_{\text{FS}}$  ist also unabhängig von  $l$ , d.h. Zustände mit gleichem  $j$  aber unterschiedlichem  $l$  und  $s$  sind weiter entartet.



### 96 Energieabsenkung aufgrund Spin-Bahn Wechselwirkung und relativistischen Korrekturen.

Experimentell lassen sich die entarteten Zustände dennoch unterscheiden. Mit der heutigen Präzessionsfrequenzmessung kann man weit über diese Korrekturen hinaus messen. Unsere Korrektur bringt eine 5-Stellen Genauigkeit  $\sim 10^{-5}$ .

Heute kann man über  $10^{-15}$  genau messen. Man müsste also mindestens Terme bis zur Ordnung 8 aufnehmen, um die heutigen Messungen zu bestätigen. Dabei ist zu berücksichtigen, dass es neben der Feinstruktur auch eine Hyperfeinstruktur gibt. Diese beschreibt die Kopplung des magnetischen Moments des Elektrons mit dem des Kerns. Da die Wechselwirkung  $\sim \frac{1}{m}$  ist, ist die des Kerns ca. 2000-mal kleiner als die des Elektrons und hat daher die Ordnung  $\approx \alpha^5$ . Liegt aber immernoch deutlich über dem heute messbaren Bereich.

### 3-6 Hyperfeinstruktur

Bisher sind wir vom kugelsymmetrischen Coulomb-Potential ausgegangen und haben die stationären Lösungen der Schrödingergleichung in diesem Potential berechnet. Anschließend haben wir die Feinstrukturaufspaltung berücksichtigt, die im Wesentlichen auf der magnetischen Wechselwirkung des Elektronenspins mit dem Magnetfeld, welches durch die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt wird, beruht.

Bei Messungen mit sehr hoher Auflösung stellt man nun fest, dass die Feinstrukturlinien im H-Atom selbst wieder aufgespalten sind. Diese Aufspaltung ist (oft) kleiner als die Dopplerbreite, d.h. sie kann nur mit *dopplerfreien* spektroskopischen Methoden aufgelöst werden und heißt **Hyperfeinstruktur** der Spektrallinien.

Um diese zu erklären, betrachten wir den Kern des H-Atoms, das Proton, welches als Spin  $\frac{1}{2}$  Teilchen selbst ein magnetisches Moment trägt

$$\hat{\mu}_p = g_p \mu_K \frac{\hat{s}_p}{\hbar},$$

wobei  $\hat{s}_p$  den Kernspin bezeichnet.<sup>22</sup> Das Kernmagneton ist

$$\mu_p = \frac{e\hbar}{2c} \frac{1}{m_p} = \frac{m_e}{m_p} \mu_B \approx \frac{1}{1836} \mu_B.$$

Der  $g$ -Faktor des Protons ist,

$$g_p = 5.59 \Rightarrow \frac{\mu_e}{\mu_p} = \frac{2}{5.59} \cdot 1836 \approx 658.$$

---

<sup>22</sup>In der Literatur findet man auch häufig die Bezeichnung  $\hat{i}$ .

Obwohl der  $g$ -Faktor des Protons größer ist, als der des Elektrons ist das magnetische Moment des Protons wesentlich kleiner. Die  $\hat{l}$ ,  $\hat{s}$  Kopplung bleibt daher auch unter Berücksichtigung des Kernmoments dominant und wir können die Kernwechselwirkung im Rahmen der Störungstheorie einführen. Diese Störung führt zu einer weiteren Aufspaltung der Energieniveaus, sie heißt **Hyperfeinstruktur**.

Die Energieaufspaltung erfüllt folgende Proportionalität,

$$\Delta E_{\text{HFS}} \sim \frac{\hat{\mu}_p \hat{\mu}_l}{r^3},$$

was wir als magnetische Dipol/Dipol-Wechselwirkung identifizieren können.

**BSP** Wasserstoff Atom.  $\Delta E_{\text{HFS}} \approx 5 \cdot 10^{-6} \text{eV} \ll \Delta E_{\text{FS}} \approx 10^{-4} \text{eV}$ . ■

$\hat{s}_p$  und  $\hat{j}$  koppeln zu einem neuen totalen Drehimpuls  $\hat{f}$ , analog zur  $\hat{l}$ ,  $\hat{s}$ -Kopplung,

$$\hat{f} = \hat{s}_p + \hat{j}.$$

$\hat{f}^2$  hat die Eigenwerte  $f(f+1)\hbar^2$ ,  $\hat{f}_z$  die Eigenwerte  $m_f \hbar$ . Analog zu  $\hat{j}$  sehen wir, dass  $f$  ganz und halbzahlige sein kann,

$$f = j + s_p, j + s_p - 1, \dots, |j - s_p|,$$

$$m_f = -f, -f + 1, \dots, f$$

Gleichzeitig beobachtbar sind  $\hat{l}^2$ ,  $\hat{s}^2$ ,  $\hat{j}^2$ ,  $\hat{s}_p^2$ ,  $\hat{f}^2$  und  $\hat{f}_z$ .

Drücken wir die Wechselwirkungsenergie durch die Eigenwerte aus,

$$\langle E_{\text{HFS}} \rangle = A \frac{\langle \hat{s}_p \hat{j} \rangle}{\hbar} = \frac{A}{2} [f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)],$$

wobei  $A = \frac{g_p \mu_K}{\sqrt{j(j+1)}} B_0$  als **Intervallfaktor** bezeichnet wird mit  $B_0$  dem effektiven Magnetfeld am Kernort.

Die Stärke des Magnetfelds  $B_0$  am Kernort erfüllt die Proportionalität,

$$B_z \sim \frac{Z^3}{n^3} \sqrt{s(s+1)}.$$

**Bsp** Wasserstoff im Grundzustand.  $s = \frac{1}{2}$ ,  $l = 0$ ,  $j = \frac{1}{2}$ ,  $s_p = \frac{1}{2}$ .

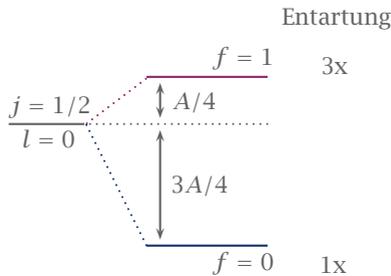
$$\Rightarrow \Delta E_{\text{HFS}} = \begin{cases} \frac{A}{4}, & \text{für } f = 1, \quad \uparrow j \uparrow s_p, \\ -\frac{3A}{4}, & \text{für } f = 0, \quad \uparrow j \downarrow s_p. \end{cases}$$

Das Magnetfeld  $B_0$  hat die Größenordnung,

$$n = 1 \Rightarrow B_0 \approx 29\text{T},$$

$$n = 2 \Rightarrow B_0 \approx 3.6\text{T}.$$

Dies entspricht dem  $B_I$  aus der  $l,s$ -Kopplung bis auf den Thomas Faktor.



## 97 Hyperfeinstrukturaufspaltung im Wasserstoff.

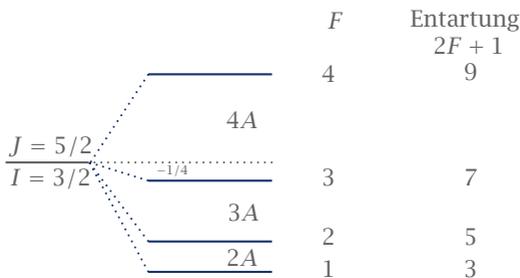
Das Wasserstoffatom ist ein Boson, obwohl es aus Fermionen (Proton, Elektron) besteht. Deren halbzahlige Spins ( $s = \frac{1}{2}$ ,  $s_p = \frac{1}{2}$ ) addieren sich zu einem ganzzahligen (0, 1). Bei starkem Abkühlen geht ein spinpolarisiertes Gas ununterscheidbarer H-Atome in ein Bose-Einstein-Kondensat über.

Für Deuterium ist  $s_p = 1$  und daher der Gesamtspin halbzahlig. Als Fermion verhält es sich bei starkem Abkühlen wie ein Fermigas. ■

Die Hyperfeinstruktur beruht auf der magnetischen Wechselwirkung, welche keine Arbeit verrichtet, denn  $\vec{F} \sim \vec{v} \times \vec{B} \Rightarrow \vec{F} \perp \vec{v}$ . Wie bei der Feinstrukturaufspaltung bleibt daher der Linienschwerpunkt erhalten.

Für beliebiges  $F$ , d.h. auch in "komplexen" Kernen gilt die Formel,

$$\Delta E_{F+1} - \Delta E_F = \frac{A}{2} [F(F+1) - (F+1)(F+2)] = A[F+1].$$



98 Zur Intervallregel.

Sie heißt **Invervallregel**.

Die HFS-Übergänge sind als magnetische Dipol/Dipol-Übergänge zwar sehr schwach, da jedoch sehr viel Wasserstoff im Universum existiert, lässt sich auch sehr viel dieser Strahlung messen. Die Strahlung, die bei Hyperfeinstruktur-Übergängen entsteht, durchdringt aufgrund der niedrigen Frequenz auch optisch dichte Bereiche im Universum. Ihre Messung und Interpretation liefert daher Bilder von sonst unzugänglichen Bereichen.

*Bemerkungen.* 1.) Die Übergänge in der HFS-Aufspaltung des H-Atoms im Grundzustand emittieren Strahlung der Frequenz 1420MHz. Diese Strahlung ist die Grundlage für die Radioastronomie. In den 50ern wurde diese Strahlung erstmals gemessen. Heute wird der ganze Himmel mit immer besser werdenden Teleskopen überwacht. Die gemessene Intensität gibt Aufschluss darüber, wie viel Wasserstoff im Universum existiert. Die Messung der Frequenzverschiebung (Dopplereffekt) und die Berücksichtigung relativistischer Effekte gibt uns Informationen darüber, wie schnell sich der Wasserstoff bewegt.

2.)  $1420\text{MHz} \hat{=} 70\text{mK}$ . Die Hintergrundtemperatur liegt bei 2.7K, d.h.  $F = 1$  ist bereits thermisch angeregt.

Man hat festgestellt, dass manchen den Bereichen, in denen die Wasserstoff Konzentration hoch ist, auch mehr Wasserstoff mit  $F = 1$  als mit  $F = 0$  existiert (Maseraktivität). Diese Populationsinversion kann z.B. durch inhomogene Magnetfelder dynamisch erzeugt werden.

3.) Die Sekunde ist über die Hyperfeinstrukturaufspaltung im Cäsiumatom ( $s = \frac{1}{2}$ ,  $s_p = \frac{7}{2}$ ) definiert. Im Cäsium entspricht der Übergang zwischen  $F = 3$  und  $F = 4$  gerade 9.2MHz.

Da die Frequenzmessung in Cäsium-Uhren sehr genau möglich ist

$$\frac{\delta\nu}{\nu} \approx 10^{-15},$$

wurde diese Frequenz verwendet, um die Sekunde zu definieren. →

### 3-7 Paschen-Back-Effekt vs. Zeeman-Effekt

Bisher sind wir davon ausgegangen, dass das äußere Magnetfeld "klein" ist. Zeeman-Effekt, Feinstruktur und Hyperfeinstruktur haben zu folgenden Korrekturen im Hamiltonian geführt,

$$\hat{H} = \dots \hat{p}^2 + \underbrace{\dots \hat{l}\hat{s}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}} + \underbrace{\dots \hat{p}^4}_{\text{rel. Korrekturen}} + \underbrace{\dots \hat{\mu}\hat{B}}_{\text{Zeeman}} + \underbrace{\dots \hat{j}\hat{s}_p}_{\text{Kopplung Kern, } e^-}.$$

Die Korrekturen sind nur so lange gültig, wie  $\hat{\mu}_s \hat{B}_{\text{ext}}$  klein gegenüber der Kopplung von  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  bzw.  $\hat{\mu}_p \hat{B}_{\text{ext}}$  klein gegenüber der Kopplung von  $\hat{j}$  und  $\hat{s}_p$  ist. Wir wollen nun die Größenordnung abschätzen, ab der wir  $\hat{\mu} \hat{B}_{\text{ext}}$  nicht mehr als kleine Störung betrachten können. Diesen Fall bezeichnet man als **Paschen-Back-Effekt**.

Das magnetische Moment des Kerns ist gegeben durch,

$$\hat{\mu}_p = g_p \mu_B \frac{\hat{s}_p}{\hbar}, \quad g_p \approx 5.58, \quad \frac{\mu_K}{\mu_B} = \frac{1}{1836}.$$

Die Energieaufspaltung durch die Hyperfeinstruktur ist gegeben durch,

$$\Delta E_{\text{HFS}} = \frac{A}{2} (f(f+1) - j(j+1) - s_p(s_p+1)), \quad A = \frac{g_p \mu_K}{\sqrt{j(j+1)}} B_0.$$

**BSP** Effektives Magnetfeld der Elektronenhülle am Kernort im Wasserstoff,

$$n = 1 \Rightarrow B_0 \approx 29\text{T} \quad \hat{=} \Delta E_{\text{HFS}} = 5.9 \cdot 10^{-6} \text{eV},$$

$$n = 2 \Rightarrow B_0 \approx 3.6\text{T} \quad \hat{=} \Delta E_{\text{HFS}} = 7.3 \cdot 10^{-7} \text{eV}.$$

Man kann Magnetfelder dieser Größe im Labor erzeugen, der Paschen-Back-Effekt ist also beobachtbar. Die Energieaufspaltung durch die Feinstruktur beträgt,

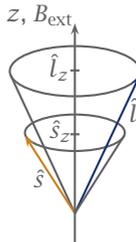
$$\Delta E_{\text{FS}} = 10^{-4} \text{eV.} \quad \blacksquare$$

D.h. es gibt zwei Bereiche für starke Magnetfelder,

- (a)  $B_{\text{ext}} > B_0$ . Das äußere Magnetfeld ist stärker als das Magnetfeld der Elektronenhülle, so dass sowohl die Kopplung von  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  also auch die von  $\hat{j}$  und  $\hat{s}_p$  aufgebrochen wird. Dieser Effekt heißt **Paschen-Back-Effekt**.
- (b)  $B_{\text{ext}} > B_p$ . Das äußere Magnetfeld ist lediglich stärker als das Magnetfeld des Kerns, so dass nur die Kopplung von  $\hat{j}$  und  $\hat{s}_p$  aufgebrochen wird. Dieser Effekt heißt **Paschen-Back-Effekt der Hyperfeinstruktur**.

### ■ Paschen-Back-Effekt

Die Kopplung von  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  erfordert eine feste Phase zwischen den Größen. In Abwesenheit bzw. Anwesenheit eines schwachen äußeren Magnetfelds, wird die feste Phase durch die Spin-Bahn-Kopplung erzeugt.  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  sind einzeln unscharf, lassen sich aber aufgrund der festen Phase wohldefiniert zu  $\hat{j}$  addieren.



#### 99 Aufhebung der $\hat{l}$ , $\hat{s}$ -Kopplung.

Falls  $B_{\text{ext}} > B_0 \sim \frac{a}{\hbar^2}$  koppeln sowohl  $\hat{l}$  als auch  $\hat{s}$  an das äußere Feld.  $\hat{s}$  und  $\hat{l}$  sind dann unabhängig voneinander, d.h. zwischen  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  besteht keine feste Phase mehr. Auch  $\hat{s}_p$  entkoppelt. Die Summe  $\hat{l} + \hat{s}$  wird unscharf und  $j$ ,  $m_j$  sind keine guten Quantenzahlen mehr. Da aber die Kopplung von  $\hat{l}$  und  $\hat{s}$  aufgehoben ist, sind nun  $\hat{l}^2$ ,  $\hat{l}_z$ ,  $\hat{s}^2$ ,  $\hat{s}_z$  gleichzeitig messbar. Die Energieaufspaltung ist

gegeben durch,

$$\Delta E_{\text{PB}} = -\hat{\mu} \hat{B}_{\text{ext}} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \hat{B}_{\text{ext}} = \mu_B B_{\text{ext}} (m_l + 2m_s).$$

### ■ Paschen-Back-Effekt der Hyperfeinstruktur

Ohne äußeres Magnetfeld koppeln  $\hat{s}_p$  und  $\hat{j}$  zu  $\hat{f}$  über die Wechselwirkung zwischen  $\hat{\mu}_{s_p}$  und  $B_j$ . Gleichzeitig messbar sind,

$$\hat{j}^2, \hat{l}^2, \hat{s}^2, \hat{s}_p^2, \hat{f}^2, \hat{f}_z.$$

Für kleine äußere Magnetfelder bleibt diese Kopplung erhalten.

Ist nun  $\vec{B}_{\text{ext}} > \frac{A}{\mu_K}$  aber  $B_{\text{ext}} < \frac{a}{\mu_B}$ , so entkoppeln  $\hat{s}_p$  und  $\hat{j}$  aber die  $\hat{l}, \hat{s}$ -Kopplung ist weiterhin dominant. Die stärkste Wechselwirkung ist nun die magnetische Wechselwirkung von  $\hat{\mu}_j$  mit dem äußeren Feld  $\vec{B}_{\text{ext}}$ . Analog zum Zeeman-Effekt bilden sich  $2j + 1$ -Niveaus aus mit

$$\Delta E_Z = \hat{\mu}_j \hat{B}_{\text{ext}} = g_j \mu_B m_j B_{\text{ext}}.$$

Der nächst kleinere Term ist die Wechselwirkung des Kernmoments  $\hat{\mu}_p$  mit dem Magnetfeld der Hülle  $\vec{B}_0$ ,

$$\Delta E = \hat{\mu}_p \hat{B}_0 = A m_j m_{s_p}$$

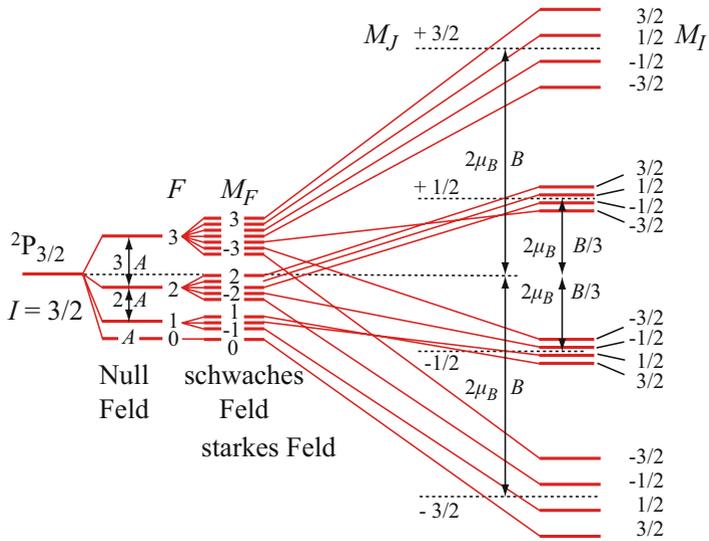
Die Energieaufspaltung ist nun gegeben durch,

$$\Delta E_{\text{PB}}^{\text{HFS}} = g_j \mu_B m_j B_{\text{ext}} + A m_j m_{s_p} - g_{s_p} \mu_K m_{s_p} B_{\text{ext}},$$

wobei der letzte Term die Wechselwirkung des Kerns mit dem äußeren Magnetfeld beschreibt und nur bei extrem hohen Feldern berücksichtigt werden muss. Man beobachtet also die Zeemanlinien der Hülle mit zusätzlicher Hyperfeinstrukturaufspaltung.

*Bemerkungen.* 1.) Der Übergang zwischen dem Zeeman und Paschen-Back Bereich ist nicht scharf sondern kontinuierlich.

- 2.) Neben den bisher eingeführten Korrekturen gibt es noch den **Lamb-Shift**, der die Energieverschiebung aufgrund von Vakuumfluktuationen beschreibt. Dieser wird in der Quantenfeldtheorie und der fortgeschrittenen Atomphysik ausführlicher behandelt. ∞



I. Hertel, C. P. Schulz, Atome, Moleküle und optische Physik 1, S. 366

100 Hyperfeinaufspaltung im schwachen und Starken Magnetfeld.

## Drehimpulskopplung

3 Drehimpulse -> 6 Quantenzahlen

Operatoren	Eigenwerte	Wertebereich
Bahndrehimpuls	$\hat{l}^2$	$\ell(\ell+1)\hbar^2$
	$\hat{l}_z$	$m_\ell \hbar$
e Spin	$\hat{s}^2$	$s(s+1)\hbar^2$
	$\hat{s}_z$	$m_s \hbar$
Kern Spin	$\hat{i}^2$	$i(i+1)\hbar^2$
	$\hat{i}_z$	$m_i \hbar$

$(B_l \gg B_i, B_{ext})$   $\ell, s$  Kopplung dominant,  $l_z$  und  $s_z$  unscharf

Gesamt-drehimpuls	$\hat{j}^2$	$j(j+1)\hbar^2$	$j = l + s, \dots,  l - s $
	$\hat{j}_z$	$m_j \hbar$	$m_j = -j, \dots, j$

$(B_l \gg B_i \gg B_{ext})$   $j, i$  Kopplung,  $j_z$  und  $i_z$  unscharf

totaler Gesamt-drehimpuls	$\hat{f}^2$	$f(f+1)\hbar^2$	$f = j + i, \dots,  j - i $
	$\hat{f}_z$	$m_f \hbar$	$m_f = -f, \dots, f$

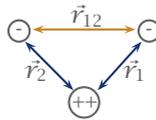
$(B_l \gg B_{ext} \gg B_i)$  Paschen Back,  $f^2$  und  $f_z$  unscharf  
 $i$  und  $j$  entkoppeln  
 „gute“ QZ:  $l, s, j, i, m_j, m_i$

$(B_{ext} \gg B_i, B_l)$  Paschen Back,  $j^2$  und  $j_z$  unscharf  
 $l$  und  $s$  entkoppeln  
 „gute“ QZ:  $l, s, i, m_l, m_s, m_i$

### 3-8 He-Atom

Bislang hatten wir unsere Betrachtung auf das H-Atom beschränkt, das sich als Einelektronensystem in einem anziehenden Coulomb-Potential beschreiben ließ. In diesem Fall ließ sich die Schrödungsgleichung aufgrund der Kugelsymmetrie des Coulomb-Potential in Radial- und Winkelanteil separieren und daher leicht analytisch lösen. Für Alkaliatome lässt sich dieses Modell aufrechterhalten indem man die vollen Schalen und den Kern als effektives Einelektronensystem in einem abgeschirmten anziehenden Coulomb-Potential zusammenfasst. Für die übrigen Atome stößt dieses Modell jedoch auf Probleme, da sich die Valenzelektronen ja paarweise gegenseitig abstoßen und dem Pauli-Prinzip gehorchen müssen. Wir wollen die grundlegenden Probleme nun am Beispiel des Heliumatoms diskutieren.

Das Helium-Atom hat die Kernladungszahl  $Z = 2$ , es besteht aus 2 Protonen im Kern und 2 Elektronen in der Hülle. Im Prinzip haben wir es hier mit einem 3-Körper-Problem zu tun, dem Kern und den zwei Elektronen.



#### 102 Zum Dreikörperproblem.

Das Potential dieses Systems ist gegeben durch,

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{1,2}}.$$

Dabei ist der dritte Term, der die Wechselwirkung der Elektronen untereinander beschreibt, der problematische, denn ohne diesen könnten wir uns auf den Fall von zwei voneinander unabhängigen Zweikörperproblemen zurückziehen. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung hat nun die Form,

$$\left[ \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(r_1, r_2) \right] \Psi(r_1, r_2) = E\Psi(r_1, r_2).$$

Diese Schrödingergleichung ist nicht mehr exakt lösbar. Da auch das klassische 3 Körperproblem nicht allgemein analytisch lösbar ist, darf man das von

der Schrödingergleichung auch nicht erwarten. Es liegt keine Kugelsymmetrie vor, wir sind daher nicht in der Lage die Gleichung in Radial- und Winkelanteil zu separieren. Es ist auch nicht möglich die Gleichung in zwei Einteilchen-Wellenfunktionen aufzuspalten, d.h.

$$\Psi(r_1, r_2) \neq \Psi(r_1)\Psi(r_2)!$$

### ■ Naiver Ansatz

Um störungstheoretisch an das Problem heranzugehen, wollen wir zunächst den naiven Ansatz wählen, dass die Wechselwirkung der Elektronen untereinander,  $\frac{e^2}{r_{1,2}}$ , klein ist, d.h.

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}.$$

somit erhalten wir zwei unabhängige "H-artige" Probleme, die wir durch Separation lösen können,

$$\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r_1)\Psi(r_2).$$

Für die Energie erhalten wir die Gleichung,

$$E = -\left(\frac{RhcZ^2}{n^2}\right)_1 - \left(\frac{RhcZ^2}{n^2}\right)_2,$$

was als Ionisierungsenergie  $E_{\text{ion}} = -108.8\text{eV}$  liefert. Im Experiment sehen wir jedoch,

$$E_{\text{ion}} = -79\text{eV},$$

wobei

$$E_{\text{ion},1} = -24.6\text{eV}, \quad \text{Ionisierungsenergie 1. Elektron,}$$

$$E_{\text{ion},2} = -54.4\text{eV}, \quad \text{Ionisierungsenergie 2. Elektron.}$$

Dabei entspricht die Ionisierungsenergie des 2. Elektrons gerade dem vierfachen von 13.6eV, was gut mit der Erwartung übereinstimmt, denn  $Z = 2$  und  $E \sim Z^2$ . D.h. für Einelektronenatome wie  $\text{He}^+$  liefert der Ansatz brauchbare Ergebnisse, für Mehrelektronenatome ist die Abweichung zu groß.

## ■ Qualitative Aussagen

Was können wir qualitativ über die Wellenfunktion des He-Atoms aussagen? Nehmen wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung als klein an, können wir die Wellenfunktion in einen Spin und einen Ortsanteil separieren,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \underbrace{\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{Ort}} \underbrace{\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{Spin}}.$$

Da das Elektron ein Fermion ist, muss die Wellenfunktion antisymmetrisch sein, d.h. entweder ist die Spin-Wellenfunktion antisymmetrisch und die Ortswellenfunktion symmetrisch oder umgekehrt,

$$\Psi_{1,2} = \Phi_S \chi_A \text{ oder } \Psi_{1,2} = \Phi_A \chi_S.$$

Die allgemeine Form einer antisymmetrischen Zweiteilchen-Wellenfunktion ist,

$$|\Psi\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1 |\alpha\rangle_2).$$

Eine Vertauschung von  $\alpha$  und  $\beta$  ändert offensichtlich das Vorzeichen. Die allgemeine Form einer symmetrischen Zweiteilchen-Wellenfunktion ist,

$$|\Psi\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 + |\beta\rangle_1 |\alpha\rangle_2).$$

Vertauschung von  $\alpha$  und  $\beta$  ändert das Vorzeichen nicht.

Wir wollen nun die zwei Fälle symmetrische bzw. antisymmetrische Spinwellenfunktion unterscheiden.

- a) *Symmetrischer Spinanteil.* Dieser Fall wird als **Tripplet**-Zustand bezeichnet. Es gibt drei mögliche Kombinationen,

$$\begin{aligned} |\chi\rangle_{12} &= |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, & s = 1, m_s = 1 \\ |\chi\rangle_{12} &= |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, & s = 1, m_s = -1 \\ |\chi\rangle_{12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2), & s = 0, m_s = 0. \end{aligned}$$

In diesem Fall ist die Ortswellenfunktion antisymmetrisch, d.h. zwei Elektronen müssen sich in  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  oder  $m_s$  unterscheiden. Dies gibt uns eine Vorschrift, wie ein System besetzt wird:

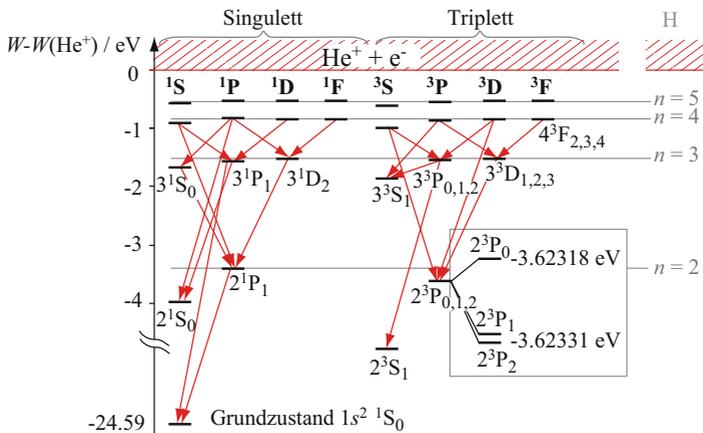
- Die Energie wird minimiert.
- Ist ein Zustand besetzt, muss jedes weitere Elektron einen anderen Zustand annehmen.

b) *Asymmetrischer Spinanteil*. Dieser Fall wird als **Singulett**-Zustand bezeichnet. Es gibt nur eine Kombinationsmöglichkeit,

$$|\chi\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2), \quad s = 0, m_s = 0.$$

In diesem Fall ist die Ortswellenfunktion symmetrisch.

Interessanterweise sieht man auch im Experiment dass es 2 "Arten" von Heliumatomen zu geben scheint. In den Anfängen der Helium-Spektroskopie ging man noch davon aus, dass es wirklich zwei verschiedene Sorten von Helium nämlich Para- und Orthohelium gibt. Heute weiß man jedoch, dass es sich lediglich um verschiedene Spinkopplungszustände handelt, den Triplet- und den Singulett-Zustand.



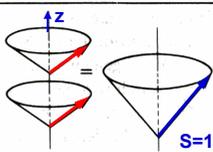
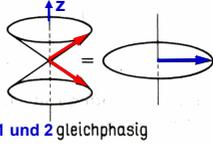
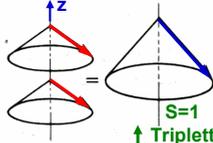
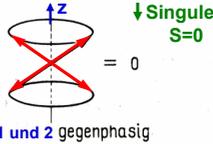
I. Hertel, C. P. Schulz, *Atome, Moleküle und optische Physik 1*, S. 253

104 Termschema des neutralen Helium Atoms. Man beachte, dass die Lage des Grundzustands  $1^1S_0$  nicht maßstäblich gezeichnet ist. Zum Vergleich sind rechts die äquivalenten Energien des H-Atoms eingezeichnet.

**Gesamtspin S**

↓

z - Komponente

$\chi$	$\psi_r$	$\chi$	$S m_s$	
$\chi_S$ , symmetrisch (Triplett, „Spin parallel“)	$\psi_A(r)$ antisymmetrisch	$\chi_1^1 = \chi^+(1) \chi^+(2)$ ↑ ↑	1 1	
		$\chi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \chi^+(1) \chi^-(2) + \chi^+(2) \chi^-(1) \}$ ↑ ↓ + ↓ ↑	1 0	 1 und 2 gleichphasig
		$\chi_1^{-1} = \chi^-(1) \chi^-(2)$ ↓ ↓	1 -1	 ↑ Triplett
$\chi_A$ (Singulett) antisymmetrisch	$\psi_S(r)$ symmetrisch	$\chi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \chi^+(1) \chi^-(2) - \chi^+(2) \chi^-(1) \}$ ↑ ↓ - ↓ ↑	0 0	 ↓ Singulett S=0 1 und 2 gegenphasig

103 Darstellung der Wellenfunktion in einem Zweielektronensystem.

Im He-Atom tritt wie beim H-Atom eine  $\hat{L}\hat{S}$ -Kopplung auf, die **Russell-Saunders-Kopplung**. Dabei koppeln zunächst alle  $\hat{s}_i$  zu  $\hat{S}$  und alle  $\hat{l}_i$  zu  $\hat{L}$ .<sup>23</sup> Diese koppeln dann zu  $\hat{f} = \hat{S} + \hat{L}$ . Dabei ist zu beachten, dass

$$\hat{l}_i \hat{s}_j \ll \hat{l}_i \hat{l}_j, \hat{s}_i \hat{s}_j,$$

d.h. die Spin-Bahn-Kopplung der einzelnen Elektronen ist aufgrund der Austausch-Wechselwirkung viel kleiner als die gegenseitige Kopplung der  $\hat{l}_i \hat{l}_j$  bzw.  $\hat{s}_i \hat{s}_j$ . Die Austauschwechselwirkung basiert auf dem Pauliprinzip für ununterscheidbare Elektronen. Die gegenseitige Coulombabstoßung zwischen den Elektronen führt für symmetrische bzw. antisymmetrische räumliche Wellenfunktionen zu einer Aufspaltung der Energieniveaus, die viel größer ist als die Feinstrukturaufspaltung.

**Bsp** Kopplung zweier  $p$ -Elektronen. Drehimpulskopplung mit  $l_1 = 1$  und  $l_2 = 1$

$$\begin{array}{ccc}
 l = 2 \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \uparrow \\ \hline \end{array} & l = 1 \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array} & l = 0 \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \downarrow \\ \hline \end{array} \\
 d\text{-Term} & p\text{-Term} & s\text{-Term}
 \end{array}$$

Spinkopplung mit  $s_1 = \frac{1}{2}$  und  $s_2 = \frac{1}{2}$

$$s = 1 \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \uparrow \\ \hline \end{array}$$

$\hat{L}\hat{S}$ -Kopplung zu  $\hat{f}$  für  $L = 2$  und  $S = 1$

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \uparrow \\ \hline \end{array} & \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array} & \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \downarrow \\ \hline \end{array} \\
 j = 3 & j = 2 & j = 1
 \end{array}$$

Man beobachtet, dass keine optischen Übergänge zwischen Singulett und Triplett-Zuständen aufgrund von elektrischen Dipolstrahlung möglich sind. Dies ist auch

<sup>23</sup>Bemerkung zur Notation. Bisher war  $\hat{S}$  für die Symmetrioperationen reserviert. In Mehrelektronenatomen bezeichnen wir damit den Gesamtspin.

einer der Gründe dafür, dass man früher davon ausging, dass es zwei Sorten von Helium gibt.

Das magnetische Moment eines  $\hat{j}$ -Zustandes ist

$$\hat{\mu}_J = \hat{\mu}_L + \hat{\mu}_S$$

$$\Rightarrow |\hat{\mu}_J| = -g_J \sqrt{J(J+1)} \mu_B.$$

Analog zum H-Atom lässt sich somit beispielsweise der Zeeman-Shift berechnen. Für den Landé-Faktor des He-Atoms erhält man,

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

analog zum H-Atom.

Unsere Betrachtung der Mehrelektronenatome ist noch lange nicht vollständig und wird in weiterführenden Vorlesungen fortgesetzt.

Es gilt festzuhalten, dass man für die Wellenfunktionen keine geschlossenen Lösungen angeben kann. Zur numerischen Berechnung der Eigenzustände der Energie existieren jedoch sehr gute Verfahren.

## ■ Das Periodensystem der Elemente

Zum Abschluss wollen wir das Schema des Periodensystems erklären. Man definiert sogenannte **Atomshalen** zu denen alle Elektronen eines Atoms mit der selben Hauptquantenzahl gehören. Die Schalen werden mit den Buchstaben  $K, L, M, N, \dots$  bezeichnet. Zur Schale mit der Hauptquantenzahl  $n$  gehören  $2n^2$  Zustände. Jeder Zustand kann aufgrund des Pauli-Prinzips mit genau einem Elektron besetzt werden. Befindet sich das Atom im Grundzustand werden zunächst die Zustände mit der größten Bindungsenergie (kleines  $n$ ) besetzt.

Schale	Zustände	$n$	Anzahl Zust.
$K$	$1s$	1	2
$L$	$2s, 2p$	2	8
$M$	$3s, 3p, 3d$	3	18
$N$	$4s, 4p, 4d, 4f$	4	32

Ist die oberste Schale nicht vollständig aufgefüllt, so dürfte es ohne den  $\frac{l}{r_{12}}$ -Term keinen Unterschied machen, wie die  $m_l$  und  $m_s$  Zustände besetzt werden,

da sie sich energetisch nicht unterscheiden. Man beobachtet jedoch, dass die Schalen nach einem bestimmten Prinzip aufgefüllt werden, das durch 3 **Hundsche Regeln** beschrieben wird.

1.) *Volle Schalen haben Gesamtdrehimpuls  $\hat{J}$  Null.*

Jeder Zustand darf nach dem Pauli-Prinzip mit höchstens einem Elektron besetzt werden. Sind alle möglichen Zustände einer Schale besetzt, so treten gleich viele parallele und antiparallele Bahndrehimpulse und Spins auf. Der Gesamtdrehimpuls  $J$  ist daher gerade Null. Volle Schalen tragen daher nichts zu  $J$  bei.

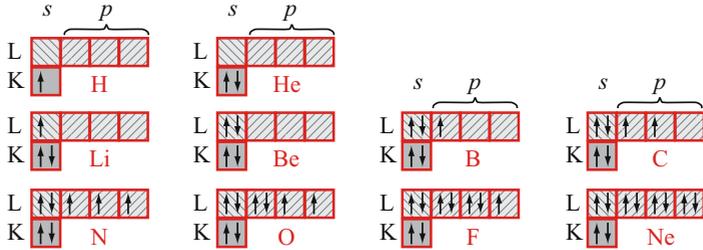
2.) *Der Gesamtspin  $\hat{S}$  nimmt den maximal möglichen Wert an.*

Die Spins der einzelnen Elektronen  $\hat{s}_i$  stehen also möglichst parallel. In einer Schale gibt es zu einer Spinrichtung  $2l + 1$  mögliche Werte für  $m_l$ . Der maximal mögliche Spin ist daher  $\frac{2l+1}{2}$ , der bei einer halb gefüllten Schale erreicht wird.

Bei einer bis zu halb gefüllten Schale führen parallele Spins zu einer symmetrischen Spin-Wellenfunktion. Die Ortswellenfunktion ist dann antisymmetrisch, die Elektronen nehmen dann aufgrund des Pauli-Prinzips den maximal möglichen Abstand zueinander ein. Dadurch wird die Coulomb-Energie minimiert. Da nach Voraussetzung die  $\hat{L}\hat{S}$ -Kopplung klein im Vergleich zur Coulomb-Energie ist, ist so auch die Gesamtenergie minimal.

3.) *Gibt es mehrere Konfigurationsmöglichkeiten für einen Gesamtspin  $\hat{S}$ , so werden die  $m_l$  so besetzt, dass  $\hat{L}$  maximal wird.*

Der mittlere Abstand des Elektrons zum Kern nimmt mit der  $z$ -Komponente des Drehimpulses, also dem Wert  $m_l$  zu. Je größer  $m_l$ , desto weiter ist das Elektron auch von allen anderen Elektronen entfernt. Dabei wird die Coulomb-Energie minimiert. Der Effekt ist hier jedoch schwächer als für parallele Spins.



I. Hertel, C. P. Schulz, Atome, Moleküle und optische Physik 1, S. 87

105 Besetzung der K- und L-Schale mit Elektronen. Pfeile deuten die Spinrichtung an.

Periode	Gruppe																	
	1	2											3	4	5	6	7	8
1	$1^1\text{H}$ 1s																	$2^2\text{He}$ 1s
2	$3^3\text{Li}$ 2s	$4^4\text{Be}$ 2s											$5^5\text{B}$ 2p	$6^6\text{C}$ 2p	$7^7\text{N}$ 2p	$8^8\text{O}$ 2p	$9^9\text{F}$ 2p	$10^{10}\text{Ne}$ 2p
3	$11^{11}\text{Na}$ 3s	$12^{12}\text{Mg}$ 3s											$13^{13}\text{Al}$ 3p	$14^{14}\text{Si}$ 3p	$15^{15}\text{P}$ 3p	$16^{16}\text{S}$ 3p	$17^{17}\text{Cl}$ 3p	$18^{18}\text{Ar}$ 3p
4	$19^{19}\text{K}$ 4s	$20^{20}\text{Ca}$ 4s	$21^{21}\text{Sc}$ 3d	$22^{22}\text{Ti}$ 3d	$23^{23}\text{V}$ 3d	$24^{24}\text{Cr}$ 3d	$25^{25}\text{Mn}$ 3d	$26^{26}\text{Fe}$ 3d	$27^{27}\text{Co}$ 3d	$28^{28}\text{Ni}$ 3d	$29^{29}\text{Cu}$ 3d	$30^{30}\text{Zn}$ 3d	$31^{31}\text{Ga}$ 4p	$32^{32}\text{Ge}$ 4p	$33^{33}\text{As}$ 4p	$34^{34}\text{Se}$ 4p	$35^{35}\text{Br}$ 4p	$36^{36}\text{Kr}$ 4p
5	$37^{37}\text{Rb}$ 5s	$38^{38}\text{Sr}$ 5s	$39^{39}\text{Y}$ 4d	$40^{40}\text{Zr}$ 4d	$41^{41}\text{Nb}$ 4d	$42^{42}\text{Mo}$ 4d	$43^{43}\text{Tc}$ 4d	$44^{44}\text{Ru}$ 4d	$45^{45}\text{Rh}$ 4d	$46^{46}\text{Pd}$ 4d	$47^{47}\text{Ag}$ 4d	$48^{48}\text{Cd}$ 4d	$49^{49}\text{In}$ 5p	$50^{50}\text{Sn}$ 5p	$51^{51}\text{Sb}$ 5p	$52^{52}\text{Te}$ 5p	$53^{53}\text{I}$ 5p	$54^{54}\text{Xe}$ 5p
6	$55^{55}\text{Cs}$ 6s	$56^{56}\text{Ba}$ 6s	$71^{71}\text{Lu}^*$ 5d	$58^{58}\text{Hf}$ 5d	$59^{59}\text{Ta}$ 5d	$60^{60}\text{W}$ 5d	$61^{61}\text{Re}$ 5d	$62^{62}\text{Os}$ 5d	$63^{63}\text{Ir}$ 5d	$78^{78}\text{Pt}$ 5d	$79^{79}\text{Au}$ 5d	$80^{80}\text{Hg}$ 5d	$81^{81}\text{Tl}$ 6p	$82^{82}\text{Pb}$ 6p	$83^{83}\text{Bi}$ 6p	$84^{84}\text{Po}$ 6p	$85^{85}\text{At}$ 6p	$86^{86}\text{Rn}$ 6p
7	$87^{87}\text{Fr}$ 7s	$88^{88}\text{Ra}$ 7s	$103^{103}\text{Lr}^{**}$ 6d	$104^{104}\text{Rf}$ 6d	$105^{105}\text{Db}$ 6d	$106^{106}\text{Sg}$	$107^{107}\text{Bh}$	$108^{108}\text{Hs}$	$109^{109}\text{Mt}$	$110^{110}\text{Uun}$	$111^{111}\text{Uuu}$	$112^{112}\text{Uub}$	$114^{114}\text{Uuq}$	$116^{116}\text{Uuh}$				
*Lanthaniden:			$57^{57}\text{La}$ 4f	$58^{58}\text{Ce}$ 4f	$59^{59}\text{Pr}$ 4f	$60^{60}\text{Nd}$ 4f	$61^{61}\text{Pm}$ 4f	$62^{62}\text{Sm}$ 4f	$63^{63}\text{Eu}$ 4f	$64^{64}\text{Gd}$ 4f	$65^{65}\text{Tb}$ 4f	$66^{66}\text{Dy}$ 4f	$67^{67}\text{Ho}$ 4f	$68^{68}\text{Er}$ 4f	$69^{69}\text{Tm}$ 4f	$70^{70}\text{Yb}$ 4f		
**Aktiniden:			$89^{89}\text{Ac}$ 5f	$90^{90}\text{Th}$ 5f	$91^{91}\text{Pa}$ 5f	$92^{92}\text{U}$ 5f	$93^{93}\text{Np}$ 5f	$94^{94}\text{Pu}$ 5f	$95^{95}\text{Am}$ 5f	$96^{96}\text{Cm}$ 5f	$97^{97}\text{Bk}$ 5f	$98^{98}\text{Cf}$ 5f	$99^{99}\text{Es}$ 5f	$100^{100}\text{Fm}$ 5f	$101^{101}\text{Md}$ 5f	$102^{102}\text{No}$ 5f		

I. Hertel, C. P. Schulz, Atome, Moleküle und optische Physik 1, S. 89

106 Periodensystem der Elemente.