

# Das Münchener Unterrichtskonzept zur Quantenmechanik

Rainer Müller und Hartmut Wiesner

Teil 1:

Qualitativer Basiskurs

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Photonen</b>	<b>4</b>
1.1	Der Photoeffekt: Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen . . . . .	4
1.2	Deutung des Photoeffekts mit Photonen . . . . .	5
1.3	Experimentelle Überprüfung der Energiebilanz und Bestimmung der Planckschen Konstanten . . . . .	6
1.4	Impuls von Photonen . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Präparation dynamischer Eigenschaften</b>	<b>10</b>
2.1	Prismenversuch mit Licht . . . . .	10
2.2	Halbdurchlässiger Spiegel (Strahlteiler) . . . . .	12
2.3	Polarisation . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Wellen und Teilchen</b>	<b>17</b>
3.1	Licht im Interferometer . . . . .	17
3.2	Vom Lichtstrahl zu einzelnen Photonen . . . . .	18
3.3	Interferometrie mit einzelnen Photonen . . . . .	19
3.4	Kann man einem Photon einen Weg zuschreiben? . . . . .	21
3.5	Teilt sich das Photon? . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Die statistischen Aussagen der Quantentheorie</b>	<b>24</b>
4.1	Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen . . . . .	24
4.2	Das Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen und die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie . . . . .	26
4.3	Präparation und Wahrscheinlichkeitsaussagen . . . . .	27
<b>5</b>	<b>Elektronen als Quantenobjekte</b>	<b>29</b>
5.1	Elektronenbeugung . . . . .	29
5.2	Doppelspaltexperiment mit Elektronen und Atomen . . . . .	30
5.3	Die Wellenlänge von Elektronen . . . . .	32
5.4	Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen und mit Elektronen . . . . .	34

5.5	Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Wellenfunktion . . . . .	36
5.6	Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsverteilung beim Doppelspalt-Experiment . . . . .	38
<b>6</b>	<b>Eigenschaften von Elektronen und der quantenmechanische Messprozess</b>	<b>41</b>
6.1	Die Eigenschaft „Ort“ im Doppelspaltexperiment . . . . .	41
6.2	Messprozess und Komplementarität . . . . .	43
6.3	Messungen und Eigenschaften . . . . .	44
6.4	Zustandsreduktion . . . . .	46
6.5	Schrödingers Katze, Messprozess und Dekohärenz . . . . .	47
<b>7</b>	<b>Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation</b>	<b>51</b>
7.1	Gleichzeitige Präparation verschiedener Eigenschaften . . . . .	51
7.2	Präparation von Ort und Impuls bei Photonen . . . . .	52
7.3	Ein Maß für die „Güte“ einer Präparation . . . . .	53
7.4	Messverfahren und Eigenschaften . . . . .	54
7.5	Elektronen am Einzelspalt und die quantitative Formulierung der Unbestimmtheitsrelation	56
7.6	Unbestimmtheitsrelation und Bahnbegriff . . . . .	59
<b>8</b>	<b>Der Weg zur Schrödinger-Gleichung</b>	<b>62</b>
8.1	Mathematische Beschreibung von Quantenobjekten . . . . .	62
8.2	Präparation von Elektronen auf eine bestimmte kinetische Energie . . . . .	63
8.3	Wellenfunktion eines freien Elektrons . . . . .	64
8.4	Operatoren für physikalische Größen . . . . .	64
8.5	Der Operator der kinetischen Energie . . . . .	66
8.6	Eigenwertgleichung . . . . .	68
8.7	Operator der Gesamtenergie . . . . .	70
8.8	Die Grundgleichung der Quantenmechanik . . . . .	73
8.9	Das Auffinden stationärer Zustände mit der Schrödinger-Gleichung . . . . .	74
8.10	Elektronen im Potentialtopf . . . . .	75
<b>9</b>	<b>Atome</b>	<b>80</b>
9.1	Was sind Atome? . . . . .	80
9.2	Linienspektren . . . . .	80
9.3	Das Bohrsche Atommodell . . . . .	82
9.4	Abschied vom Bohrschen Atommodell . . . . .	84
9.5	Quantisierung der Energie im Franck-Hertz-Versuch . . . . .	85
9.6	Dreidimensionaler Potentialtopf und Orbitale . . . . .	86
9.7	Das Wasserstoff-Atom . . . . .	89

# Kapitel 1

## Photonen

### 1.1 Der Photoeffekt: Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen

Viele optische Experimente sprechen dafür, dass es sich beim Licht um eine elektromagnetische Welle handelt. Experimente wie die Beugung am Gitter, am Einzel- und am Doppelspalt lassen sich als Interferenzerscheinungen erklären, und Interferenz ist ein typisches Merkmal einer Welle. Wegen der vielen Bestätigungen, die die Wellentheorie des Lichts in der Optik erfahren hat, scheinen sich Zweifel an ihrer universellen Gültigkeit fast von selbst zu verbieten. Dennoch gibt es Phänomene, die sich der Erklärung durch die Wellentheorie widersetzen:

**Experiment 1.1 (Hallwachs-Effekt):** Eine frisch geschmirgelte Zinkplatte wird nach Abb. 1.1 auf ein Elektroskop gesteckt und durch einen kurzen Kontakt mit dem Minuspol einer Hochspannungsquelle negativ aufgeladen. Danach wird die Platte mit dem Licht aus einer Quecksilberdampfampe bestrahlt, das einen hohen Anteil an ultraviolettem Licht enthält. Die Platte entlädt sich rasch (der Elektroskopausschlag geht auf Null zurück). Dagegen entlädt sich das Elektroskop nicht, wenn man eine Glasplatte in den Strahlengang bringt.

Eine mögliche Erklärung für den Ausgang dieses Versuches besteht darin, dass Elektronen das Metall verlassen, wenn man es mit Licht bestrahlt. Das Licht scheint Elektronen aus der Zinkplatte „herauszuschlagen“ (Abb. 1.2). Dies erklärt den Abbau des Elektronenüberschusses auf der negativ geladenen Platte und damit die Entladung des Elektroskops. Allerdings kann nur UV-Licht den Effekt auslösen,

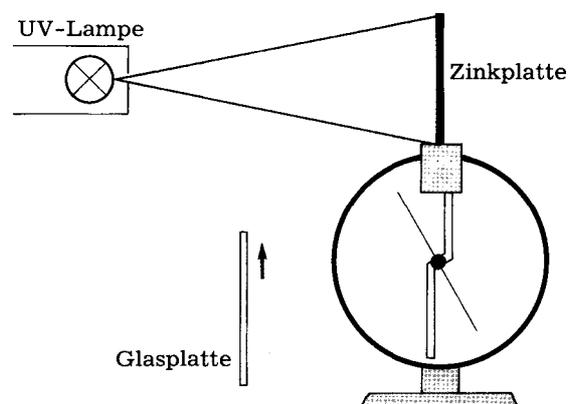


Abbildung 1.1: Versuchsaufbau zum Hallwachs-Effekt (Experiment 1.1)

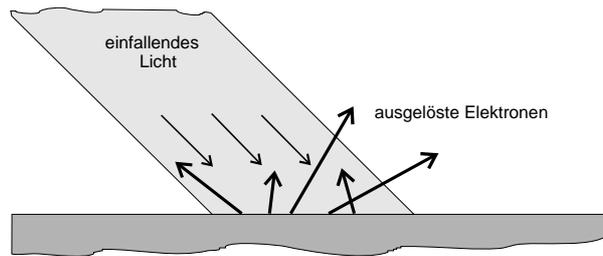


Abbildung 1.2: Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen

wie das Einführen der Glasplatte zeigt. Es wird von der Glasplatte absorbiert, woraufhin die Entladung nicht stattfindet. Sichtbares Licht kann dagegen die Glasplatte fast ungehindert passieren. Die Auslösung von Elektronen aus einer Metalloberfläche durch Licht wird als äußerer **Photoeffekt** bezeichnet.

Kann man den Effekt mit der Wellentheorie des Lichts erklären? Nach der Wellentheorie werden die Elektronen von der einfallenden Lichtwelle zu Schwingungen angeregt. Bei größerer Lichtintensität ist auch die elektrische Feldstärke größer. Dann sollten die Elektronen mit größerer Amplitude schwingen, so dass sie leichter aus dem Metall abgelöst würden.

Dies steht aber im Widerspruch zu den Beobachtungen: Bei der Bestrahlung mit sichtbarem Licht werden *keine* Elektronen ausgelöst, selbst wenn man die Intensität sehr stark erhöht. Nur hochfrequentes UV-Licht ist in der Lage, Elektronen auszulösen (und zwar selbst bei sehr niedriger Intensität). Die Wellentheorie des Lichts gerät hier in Erklärungsschwierigkeiten.

## 1.2 Deutung des Photoeffekts mit Photonen

Um den Photoeffekt zu erklären, benötigt man eine *neuartige Modellvorstellung* von der Natur des Lichts. In dem neuen Modell strömt Licht nicht als kontinuierliche elektromagnetische Energie von der Lichtquelle weg, sondern als eine Vielzahl von **Energieportionen**, vergleichbar einem *Strom von Teilchen*. Diese Energieportionen nennt man Lichtquanten oder **Photonen**. Der Photoeffekt wird in diesem Modell als „Stoß“ zwischen Photonen und Elektronen gedeutet. Ein Elektron wird aus dem Metall herausgeschlagen, wenn es von einem Photon getroffen wird und dessen gesamte Energie übernimmt.

Welche Eigenschaften besitzen diese Lichtquanten? Beim Photoeffekt ist ihr hervorsteckendstes Merkmal die Energie, die sie an das Elektron übertragen. Experimentell hat sich gezeigt, dass die Fähigkeit, Elektronen auszulösen (also Energie zu übertragen) um so größer ist, je größer die Frequenz  $f$  des eingestrahnten Lichts ist. Es ist also zu vermuten, dass die Energie der Photonen mit der Frequenz wächst. Wir stellen die Hypothese auf, dass die Energie eines Photons proportional zu  $f$  ist:  $E \sim f$ . Bezeichnet man die Proportionalitätskonstante mit  $h$ , erhält man die Beziehung

$$E = hf. \tag{1.1}$$

Der Photoeffekt wird dann folgendermaßen mit Hilfe der Photonenvorstellung gedeutet:

**Beim Photoeffekt treffen Photonen auf eine Metalloberfläche. Wenn ein Photon auf ein Elektron trifft, wird es absorbiert. Die Energie  $hf$  des Photons wird auf das Elektron übertragen; mit der gewonnenen Energie kann das Elektron das Metall verlassen.**

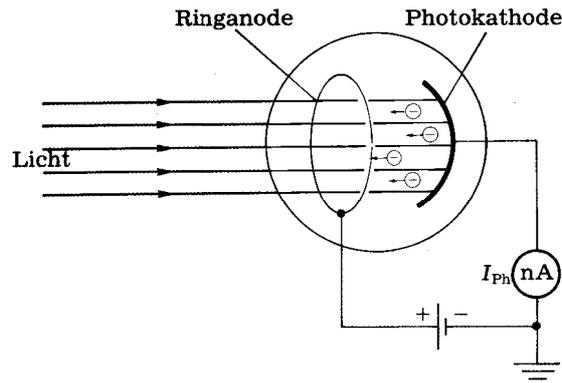


Abbildung 1.3: Nachweis des Photostroms mit einer Photozelle

Um die Metalloberfläche von innen nach aussen zu zu überwinden, muss das Elektron eine für das jeweilige Metall charakteristische Arbeit leisten, die man **Austrittsarbeit**  $W_A$  nennt. Zusätzlich können die Elektronen bereits im Innern des Metalls durch Stöße Energieverluste erleiden.

Die Energiebilanz sieht dann folgendermaßen aus: Vor dem Prozess besitzt das Photon die Energie  $hf$ . Nach dem Verlassen des Metalls hat das Elektron die Austrittsarbeit  $W_A$  geleistet und durch Stöße die Energie  $W_S$  abgegeben. Es gilt also die Bilanzgleichung:

$$hf = E_{\text{kin}} + W_A + W_S. \quad (1.2)$$

Da die Energie  $W_S$  für jedes ausgelöste Elektron unterschiedlich ist, erhält man auch verschiedene Werte der kinetischen Energie. Der maximal mögliche Wert  $E_{\text{kin,max}}$  der kinetischen Energie tritt auf, wenn  $W_S = 0$  ist. Für ihn gilt demnach

$$E_{\text{kin,max}} = hf - W_A. \quad (1.3)$$

Dieser Maximalwert von  $E_{\text{kin}}$  lässt sich im Experiment ermitteln. Damit ist auch die Hypothese, dass die Energie eines Photons der Frequenz proportional ist, einem experimentellen Test zugänglich.

### 1.3 Experimentelle Überprüfung der Energiebilanz und Bestimmung der Planckschen Konstanten

Um die Energiebilanz (1.3) experimentell zu prüfen, muss ein Messverfahren gefunden werden, mit dem die kinetische Energie der Elektronen für verschiedene Photonen-Energien  $hf$  bestimmt werden kann.

**Experiment 1.2:** In einer evakuierten Röhre befinden sich zwei Elektroden (Abb. 1.3). Auf die Kathode ist eine metallische Schicht (z. B. Kalium) aufgedampft. Die Anode besteht aus einem Metallring und dient als Auffangelektrode für die ausgelösten Elektronen. Man nennt eine solche Röhre eine Photozelle; die Metallschicht auf der Kathode wird auch als Photoschicht bezeichnet. Wird die Photoschicht von außen mit Licht bestrahlt, so zeigt das über einen Messverstärker angeschlossene Amperemeter einen Strom  $I_{Ph}$ , den Photostrom, an.

Im Unterschied zu Experiment 1.1 wurde hier ein Metall verwendet, bei dem der Photoeffekt auch mit sichtbarem Licht auftritt. Das bedeutet, dass schon bei sichtbarem Licht Elektronen aus dem Metall austreten können. Die ausgelösten Elektronen werden zur Anode hingezogen. In der Photoschicht entsteht durch die fehlenden Elektronen ein Ladungsdefizit. Es wird dadurch ausgeglichen, dass über das Amperemeter Elektronen nachfließen. Diese Elektronenverschiebung wird als Photostrom  $I_{Ph}$  registriert.

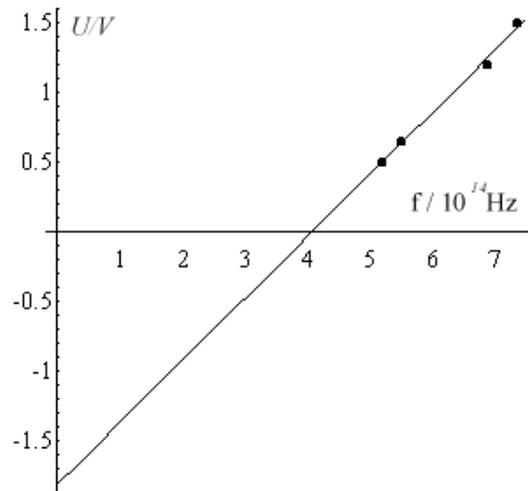


Abbildung 1.4: Gemessene Gegenspannungen für verschiedene Frequenzen

Die Bestimmung der kinetischen Energie der Elektronen gelingt mit der sogenannten *Gegenfeldmethode*. Dabei werden die Elektronen auf dem Weg zur Anode durch eine Gegenspannung  $U_g$  abgebremst. Der Photostrom wird Null, wenn die Gegenspannung gerade so weit erhöht wird, dass auch die schnellsten Elektronen die Potentialdifferenz zwischen Kathode und Anode nicht mehr überwinden können. Für die Energie der schnellsten Elektronen gilt dann  $E_{\text{kin,max}} = eU_g$ . Damit lässt sich die maximale Elektronenenergie über die angelegte Gegenspannung bestimmen.

**Experiment 1.3:** Die Kathode der Photozelle wird von mit einer Quecksilberdampf Lampe beleuchtet. Um monochromatisches Licht zu erhalten, werden Interferenzfilter oder ein Geradsichtprisma benutzt.<sup>1</sup> Für die verschiedenen Lichtfrequenzen werden die Gegenspannungen  $U_g$  bestimmt, bei denen der Photostrom verschwindet und die Messwerte in ein  $eU_g$ - $f$ -Diagramm übertragen.

Da der Photostrom nur sehr allmählich abfällt, ist es schwierig, den Nullpunkt exakt festzulegen. Man stellt fest, dass die für verschiedene Frequenzen des auffallenden Lichts gemessenen Werte für die Gegenspannung auf einer Geraden liegen (Abb. 1.4). Dies stimmt mit Gleichung (1.3) überein, die umgeformt die Gestalt der Geradengleichung

$$eU_g = hf - W_A \quad (1.4)$$

besitzt. Die dieser Gleichung zugrundeliegende Hypothese, dass die Photonenenergie proportional zur Frequenz ist, findet damit ihre Bestätigung. Aus dem Vergleich der Geradengleichung mit den gemessenen Daten kann man die Werte der Konstanten  $h$  und  $W_A$  ablesen. Die Steigung der Geraden bestimmt die Proportionalitätskonstante  $h$  zwischen Photonenenergie und Frequenz. Aus präzisen Messungen ergibt sich der Wert von  $h$  zu  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ . Die fundamentale Naturkonstante  $h$  wird als *Plancksches Wirkungsquantum* bezeichnet. Sie ist eine kennzeichnende Größe für das Auftreten von Quanteneffekten.

Die gemessene Gerade schneidet die  $f$ -Achse bei der sogenannten *Grenzfrequenz*  $f_{gr}$ . Für sie ist die kinetische Energie  $E_{\text{kin,max}} = eU_g$  der ausgelösten Elektronen Null. Die Photonenenergie reicht dann

<sup>1</sup>Man nutzt dabei aus, dass im Licht der Quecksilberdampf Lampe nicht alle Frequenzen enthalten sind, sondern nur ganz bestimmte. Auf diese sogenannten *Spektrallinien* wird im Zusammenhang mit dem Aufbau der Atome noch ausführlich eingegangen.

gerade aus, um die Austrittsarbeit aufzubringen. Licht mit einer Frequenz  $f < f_{gr}$  kann keine Elektronen aus dem betreffenden Metall auslösen. Die Austrittsarbeit  $W_A$  erhält man nach Gleichung (1.4) durch Extrapolation der Geraden zum Wert  $f = 0$ . Der Schnittpunkt mit der Ordinate liegt bei  $eU_g = -W_A$ . Aus Abb. 1.4 liest man einen Wert von etwa 1,7 eV ab. Benutzt man Photozellen, bei denen andere Metalle als Kalium auf die Kathode aufgedampft sind, ergeben sich Geraden mit der gleichen Steigung wie in Abb. 1.4, die aber wegen der verschiedenen Austrittsarbeiten andere Achsenschnittpunkte aufweisen.

Mit dem Versuchsaufbau von Experiment 1.3 lassen sich weitere Belege für die Photonentheorie finden:

**Experiment 1.4:** In Experiment 1.3 wird die Intensität des Lichts, das auf die Photoschicht fällt, abgeschwächt. Man beobachtet einen kleineren Photostrom, aber die Gegenspannung  $U_g$  zur Abbremsung der schnellsten Photoelektronen bleibt gleich.

Experiment 1.4 zeigt, dass die kinetische Energie der Photoelektronen nur von der Frequenz und nicht von der Intensität des Lichts abhängt. Nach der Photonentheorie ist das einsichtig, denn die Frequenz bestimmt die Photonenenergie. Nach der klassischen Wellentheorie hingegen sollte Licht höherer Intensität mehr Energie auf die Elektronen übertragen, weshalb die kinetische Energie der Photoelektronen mit der Intensität zunehmen sollte. Das Versuchsergebnis deutet also darauf hin, dass beim Photoeffekt die Energie in einem quantenhaften Einzelprozess auf die Elektronen übertragen wird.

## 1.4 Impuls von Photonen

Die erfolgreiche Interpretation des Photoeffekts mit Hilfe des Photonenbegriffs legt eine Teilchentheorie des Lichts nahe. Dafür spricht auch ein weiterer experimenteller Befund: Sie besitzen einen *Impuls*, den sie auf materielle Teilchen übertragen können. Das zeigt sich z. B. im Phänomen des Staubschweifens von Kometen. Er ist immer von der Sonne weggerichtet, weil die Photonen des Sonnenlichts einen Impuls auf die Staubteilchen übertragen. Der direkte Nachweis des Impulsübertrags von Photonen auf Atome gelang 1933, als Otto Frisch einen Strahl aus Natriumatomen zur Seite ablenken konnte, indem er die Atome mit dem Licht einer Natriumdampflampe bestrahlte. Heutzutage gehört das Abbremsen oder Beschleunigen von Atomen durch Laserlicht zur Routine in den Physiklabors.

Der Impuls, den Strahlung auf Materie überträgt, ist mit der Strahlungsenergie  $E$  über die Gleichung  $p = E/c$ . Man kann diese Gleichung experimentell bestätigen; sie lässt sich aber auch theoretisch aus der Relativitätstheorie herleiten. Mit ihr kann man den Impuls bestimmen, den ein einzelnes Photon besitzt. Wir wissen bereits, dass ein Photon mit der Frequenz  $f$  die Energie  $E = h \cdot f$  besitzt. Damit erhält man ergibt sich

$$p = \frac{h \cdot f}{c}. \quad (1.5)$$

Wir können unsere Ergebnisse zu Energie und Impuls von Photonen folgendermaßen zusammenfassen.

**Ein Photon der Frequenz  $f$  besitzt eine Energie  $E = h \cdot f$  und einen Impuls  $p = h \cdot f/c$ .**

So sehr die quantenhafte Übertragung von Energie und die Existenz des Photonenimpulses auf ein Teilchenmodell des Lichts hindeuten: Wie sind dann die zahlreichen Befunde zur Interferenz des Lichts einzuordnen, die stark auf eine Wellentheorie hindeuten? Sie lassen sich nicht ohne weiteres mit einer Teilchenvorstellung erklären. Man stellt sich zu Recht die Frage, was das Licht denn nun eigentlich ist:

Welle, Teilchen, oder etwas ganz anderes? Wellen- und Teilchenvorstellung sind so verschieden, dass man sich nicht vorstellen kann, dass beide gleichzeitig zutreffen.

An dieser Stelle zeigt sich zum ersten mal, dass die begrifflichen Grundlagen der Quantenmechanik weitaus komplexer sind als die der klassischen Physik. Eine eindeutige Antwort auf die Frage „Welle oder Teilchen?“ ist in der Quantenphysik nicht möglich. Quantenobjekte sind komplizierter. Sie lassen sich nicht ohne weiteres auf eine der beiden Alternativen festlegen.

Ob sich bei einem Photon Wellen- oder Teilchenaspekte zeigen, hängt von den genauen Versuchsumständen ab, unter denen es beobachtet wird. In einem der folgenden Abschnitte wird sich zeigen, dass mitunter sehr kleine Veränderungen an der Versuchsanordnung ausreichen, um vom Wellen- zum Teilchencharakter „umzuschalten“. Die „Entscheidung“ für das eine oder für das andere bleibt jedoch nicht dem Zufall überlassen. Mit der Quantenmechanik lässt sich das Verhalten von Photonen und anderen Quantenobjekten vorhersagen und beschreiben. In allen Experimenten, die bisher an Quantenobjekten durchgeführt wurden, hat sich Übereinstimmung zwischen Experiment und theoretischer Beschreibung ergeben.

Allerdings ist die Quantenmechanik keine anschauliche Theorie. Die korrekte Beschreibung des oftmals seltsam anmutenden Verhaltens der Quantenobjekte wird mit einer gewissen Abstraktheit erkaufte. Um sich trotzdem in der Quantenwelt zurechtzufinden, ist es nützlich, zuerst einige begriffliche Grundlagen zu klären, die das Verständnis der Gesetzmäßigkeiten im Quantenbereich erleichtern. Dies wird im nächsten Abschnitt unternommen, wo der Begriff der „dynamischen Eigenschaft“ von Quantenobjekten eingeführt wird.

## Kapitel 2

# Präparation dynamischer Eigenschaften

Physikalische Objekte, die in einem Experiment untersucht werden sollen, müssen vorher in einen vom Experimentator genau bestimmten Zustand gebracht werden. Es müssen kontrollierte *Anfangsbedingungen* hergestellt werden. Will man beispielsweise in der Mechanik das Gesetz für die Bahnkurve des horizontalen Wurfs überprüfen, muss eine Abschussvorrichtung hergestellt werden, die es erlaubt, Kugeln gleicher Masse mit möglichst identischen Anfangswerten von Ort und Geschwindigkeit abzuschießen (Abb. 2.1).

Ein Verfahren, mit dem Objekte in einen bestimmten Zustand gebracht werden, nennt man **Präparation**. Durch Präparation stellt man physikalische Systeme mit bestimmten **Eigenschaften** her. Die Abschussvorrichtung beim horizontalen Wurf präpariert z. B. Kugeln mit den beiden Eigenschaften „befindet sich am Abschussort  $(x_0, y_0)$ “ und „besitzt die Abschussgeschwindigkeit  $(v_{x0}, v_{y0})$ “.

Die durch Präparation hergestellten Eigenschaften sind nicht unveränderlich. Deshalb werden sie als „dynamische Eigenschaften“ bezeichnet. Im Gegensatz dazu sind z. B. Ladung und Ruhemasse eines Elektrons unveränderlich; es handelt sich dabei um dynamische Eigenschaften.

In der klassischen Physik ist das Präparieren von Eigenschaften physikalischer Objekte so selbstverständlich, dass selten ausführlicher darauf eingegangen wird. Dagegen tauchen in der Quantenphysik neue Phänomene auf, die es nötig machen, den Begriff der dynamischen Eigenschaft neu zu überdenken. Daher sollen in diesem Abschnitt die begrifflichen Grundlagen behandelt werden, die es ermöglichen, einen Zugang zu den neuartigen Problemen der Quantenphysik zu finden.

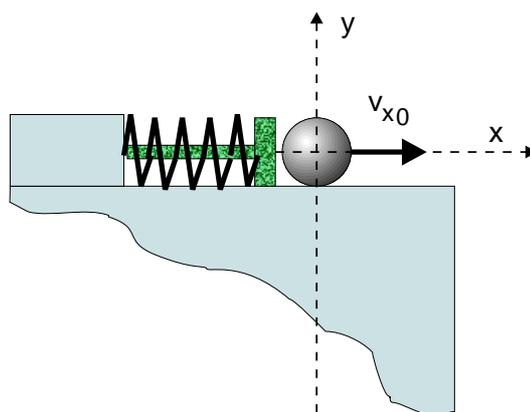


Abbildung 2.1: Präparation von Ort und Geschwindigkeit beim horizontalen Wurf

### 2.1 Prismenversuch mit Licht

**Experiment 2.1:** Leiten Sie in einem abgedunkelten Raum weißes Licht von einer 12 V-Lampe durch eine Spaltblende auf ein Prisma (Abb. 2.2 (a)). Auf dem Schirm sehen Sie das aus der

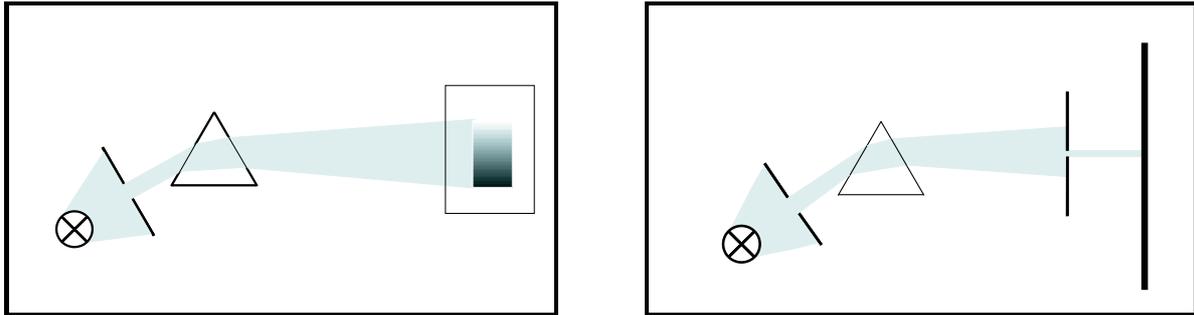


Abbildung 2.2: (a) Aufspaltung eines Lichtbündels im Prisma; (b) Ausblenden einer bestimmten Farbe

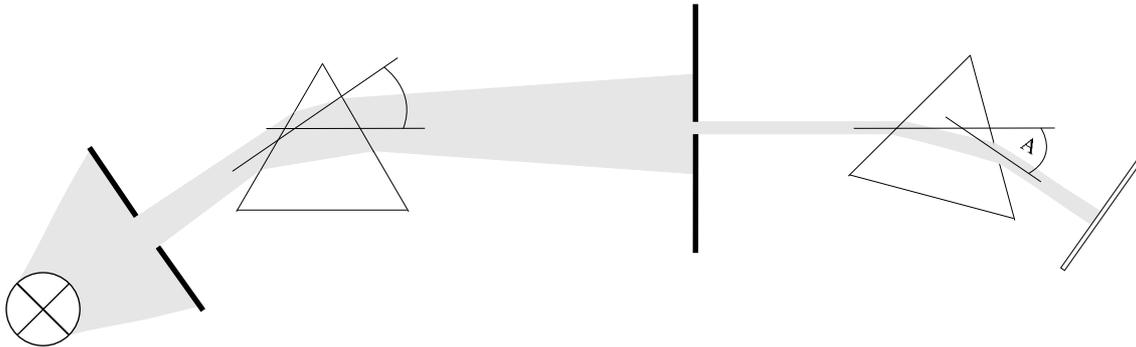


Abbildung 2.3: Test auf Präparation einer Eigenschaft

elementaren Optik bekannte farbige Regenbogenspektrum. Sie können Licht einer bestimmten Farbe herstellen, indem Sie hinter das Prisma eine weitere Spaltblende stellen, die nur das Licht aus einem eng begrenzten Farbbereich (z. B. grün) durchlässt (Abb. 2.2 (b)).

Man vermutet, dass Licht einer bestimmten Farbe eine *Eigenschaft* besitzt, die dazu führt, dass es im Prisma um einen ganz bestimmten Winkel  $\alpha$  abgelenkt wird. Diese Vermutung kann man folgendermaßen testen:

**Experiment 2.2:** Lenken Sie das vorher erzeugte grüne Lichtbündel durch ein zweites Prisma auf den Schirm (Abb. 2.3). Sie werden sehen, dass es im zweiten Prisma nicht mehr aufgefächert wird. Wie vermutet wird es um den gleichen Winkel  $\alpha$  wie im ersten Prisma abgelenkt.<sup>1</sup>

Das im Experiment erzeugte Licht einer bestimmten Spektralfarbe besitzt also tatsächlich die Eigenschaft „wird um einen bestimmten Winkel abgelenkt“. Das weiße Licht der Lampe besitzt diese Eigenschaft nicht; es wird aufgefächert. Wie wir wissen ist die in diesem Experiment gefundene Eigenschaft mit einer anderen identisch: „besitzt eine bestimmte Wellenlänge“. Die Eigenschaft „Wellenlänge“ bestimmt den Ablenkwinkel ebenso wie die Eigenschaft „Farbe“. Auch ohne dies zu wissen könnten wir durch das methodische Vorgehen bei dem Experiment Licht herstellen, das die Eigenschaft „Wellenlänge“ besitzt. Dadurch kann man auch in physikalisch unvertrauteren Situationen Eigenschaften analysieren, ohne die physikalischen Hintergründe im Detail kennen zu müssen.

Analysieren wir das Verfahren im Hinblick auf den Begriff der Präparation:

<sup>1</sup>Der Winkel, um den der Strahl abgelenkt wird, hängt natürlich vom Einfallswinkel auf das Prisma ab. Nur wenn dieser bei beiden Prismen der gleiche ist, wird der Strahl in beiden Prismen um den gleichen Winkel abgelenkt.

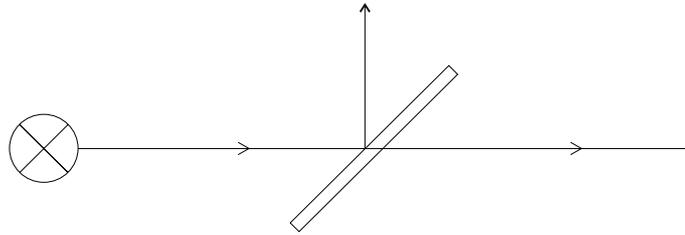


Abbildung 2.4: Durchgelassener und reflektierter Strahl am halbdurchlässigen Spiegel

1. Die Blende hinter dem ersten Prisma lässt nur Licht durch, das um einen bestimmten Winkel abgelenkt wurde (vgl. Abb. 2.2 (b)). Das durchgelassene Licht besitzt die dynamische Eigenschaft „wird um einen bestimmten Winkel abgelenkt“. Prisma und Blende haben Licht mit dieser Eigenschaft *präpariert*.
2. Das zweite Prisma hat eine andere Funktion. Es dient als *Test*, um zu bestätigen, dass wirklich eine Präparation stattgefunden hat.

Das hier aufgezeigte Verfahren aus Präparation und Test kann ganz allgemein angewandt werden. Zunächst versucht man, an einem physikalischen Objekt (z. B. Licht oder Elektron) eine bestimmte dynamische Eigenschaft (z. B. Wellenlänge oder kinetische Energie) herzustellen. Um sicherzustellen, dass es die gewünschte Eigenschaft tatsächlich besitzt, führt man ein zweites (evtl. gleichartiges) Experiment durch, das diese Eigenschaft überprüft. Besitzt das Objekt die Eigenschaft, zeigt es sie in diesem Test.

Wenn man mit Sicherheit vorhersagen kann, dass ein Test eine bestimmten Eigenschaft bestätigt, dann ist die Vorstellung erlaubt, dass das Objekt diese Eigenschaft wirklich *besitzt*, sie also dem Objekt auch unabhängig vom Test zukommt. Wir werden später sehen, dass im Bereich der Quantenphysik diese Vorschrift sehr genau beachtet werden muss. Es wird sich herausstellen, dass es Fälle gibt, in denen man in Widerspruch zu den Phänomenen gerät, wenn man Quantenobjekten eine Eigenschaft unabhängig von einer Präparation, einem Test oder einer Messung zuschreibt.

## 2.2 Halbdurchlässiger Spiegel (Strahlteiler)

Betrachten wir ein zweites Beispiel für die Frage, ob eine dynamische Eigenschaft vorhanden ist oder nicht:

**Experiment 2.3:** Senden Sie Licht, wird unter einem Winkel von  $45^\circ$  auf einen Strahlteiler (einen halbdurchlässigen Spiegel; Abb. 2.4). Das Licht wird teilweise durchgelassen und teilweise reflektiert. Durchgelassener und reflektierter Strahl besitzen die gleiche Intensität.

Besitzt der durchgelassene Anteil des Lichts eine besondere Eigenschaft, die dazu führt, dass er durchgelassen wird? Hat der Strahlteiler einen Strahl mit der Eigenschaft „wird durchgelassen“ präpariert? Diese Frage können wir mit dem allgemeinen Schema von Präparation und Test beantworten. Stellen Sie dazu in den durchgelassenen Strahl einen zweiten Strahlteiler. Er stellt den *Test* dar. Wenn sich im durchgelassenen Strahl nur Licht mit der Eigenschaft „wird durchgelassen“ befindet, dann muss sich diese Eigenschaft im Test zeigen. Am zweiten Strahlteiler müsste dann alles Licht durchgelassen werden; nichts darf reflektiert werden.

**Experiment 2.4:** Leiten Sie den durchgelassenen Strahl auf einen zweiten Strahlteiler (Abb. 2.5). Er wird erneut in einen durchgelassenen und einen reflektierten Anteil aufgespalten.

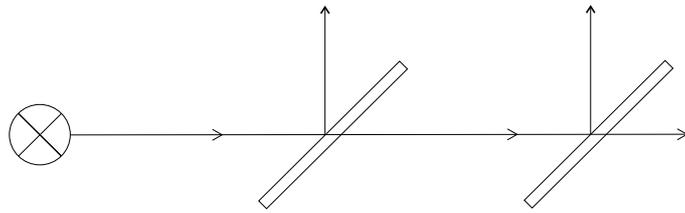


Abbildung 2.5: Test: Wurde am durchgelassenen Strahl eine Eigenschaft präpariert?

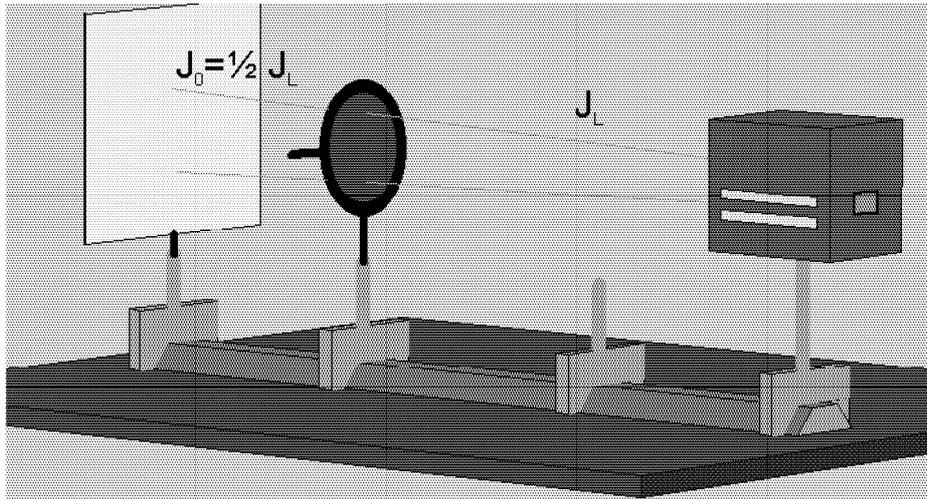


Abbildung 2.6: Herstellung von polarisiertem Licht

Das Versuchsergebnis zeigt, dass der durchgelassene Strahl keine Eigenschaft „wird durchgelassen“ besitzen hat. Ein Strahlteiler führt keine solche Präparation durch. Tatsächlich kann man einen Lichtstrahl gar nicht so präparieren, dass er gänzlich durch einen halbdurchlässigen Spiegel durchgelassen wird.

## 2.3 Polarisation

**Experiment 2.5:** Beleuchten Sie mit dem Licht einer 12 V-Lampe Experimentierleuchte ein waagrecht eingestelltes Polarisationsfilter (Abb. 2.6). Das Licht (Intensität  $J_L$ ) wird durch das Polarisationsfilter abgeschwächt; der durchgelassene Anteil besitzt etwa die halbe Intensität des ursprünglichen Lichts ( $J_0 = \frac{1}{2}J_L$ ).

Das Polarisationsfilter hat etwa die Hälfte des Lichts absorbiert. Wieder stellt sich die Frage: Wurde am durchgegangenen Anteil eine Eigenschaft präpariert? Auch diese Frage lässt sich nach dem vorher angewandten allgemeinen Schema klären.

**Experiment 2.6:** Stellen Sie ein zweites waagrecht eingestelltes Polarisationsfilter in den Strahlengang (Abb. 2.7). Sie werden keine merkliche Abschwächung der Lichtintensität beobachten; sowohl vor als auch hinter dem zweiten Polarisationsfilter ist die Intensität  $J = J_0$ .

Das Experiment zeigt, dass das erste Polarisationsfilter am Licht der Lampe eine Eigenschaft präpariert hat. Sie wird *Polarisation* genannt. Das waagrecht eingestellte Polarisationsfilter hat *waagrecht polarisiertes Licht* hergestellt. Das zweite Polarisationsfilter dient als Test für die Eigenschaft „waage-

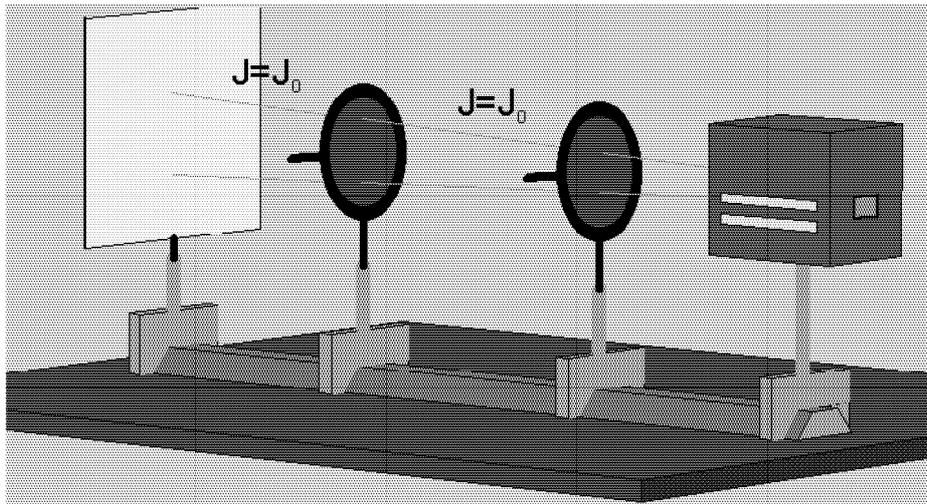


Abbildung 2.7: Test auf Präparation der Eigenschaft „waagrecht polarisiert“

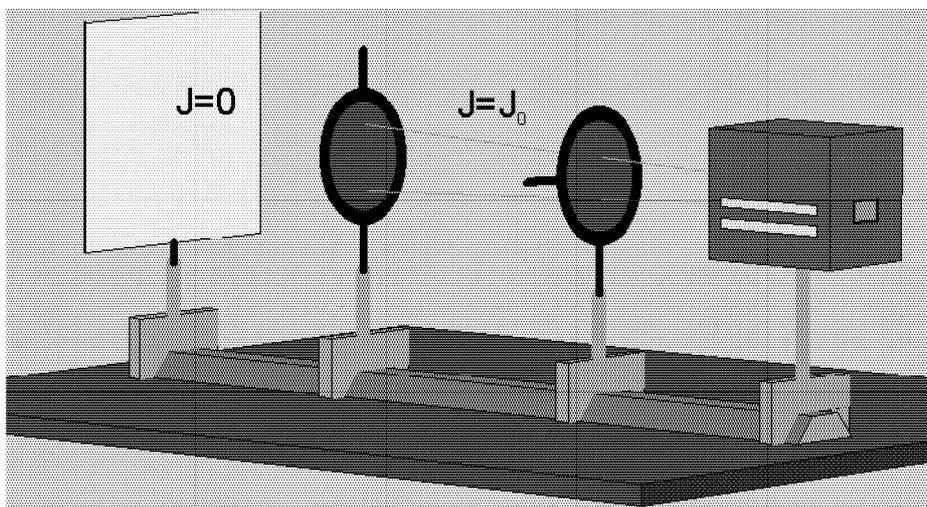


Abbildung 2.8: Waagrechte und senkrechte Polarisation

recht polarisiert“. Das vom ersten Polarisationsfilter auf diese Eigenschaft präparierte Licht konnte es ungehindert passieren.

**Experiment 2.7:** Nun werden beide Polarisationsfilter zunächst senkrecht gestellt. Wieder wird das Licht im zweiten Polarisationsfilter fast ungehindert durchgelassen. Wenn Sie das erste Filter langsam in die waagrechte Stellung drehen, wird die Intensität immer kleiner, bis schließlich fast kein Licht mehr durchgelassen wird (Abb. 2.8).

Im ersten Teil des Versuchs wurde Licht mit einer anderen Eigenschaft präpariert, nämlich *senkrecht polarisiertes Licht*. Der Test mit dem zweiten senkrecht gestellten Polarisationsfilter zeigt, dass auch dies eine Eigenschaft des Lichts ist.

Im zweiten Teil des Experiments passiert etwas Neues. Nachdem das erste Polarisationsfilter in die waagrechte Stellung gedreht wurde, präpariert es waagrecht polarisiertes Licht. Dieses Licht fällt auf das senkrecht eingestellte zweite Polarisationsfilter, das einen Test für die Eigenschaft „senkrecht polarisiert“ darstellt. Der Ausgang des Tests ist eindeutig: Waagrecht polarisiertes Licht besitzt die

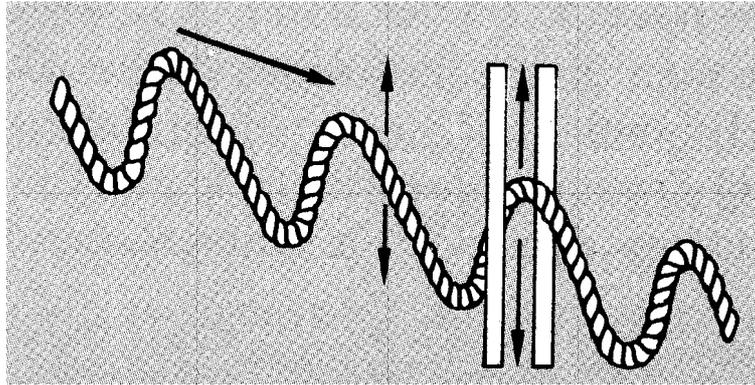
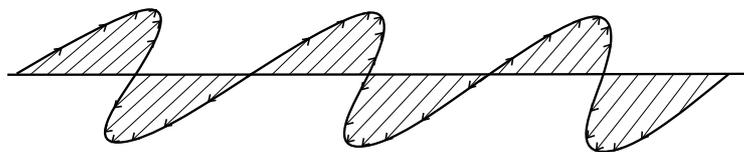
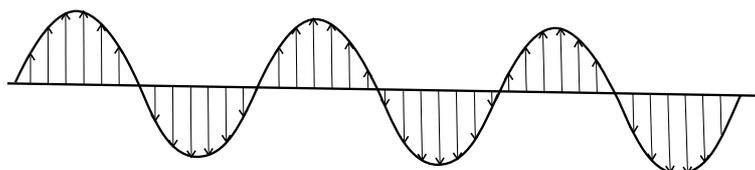


Abbildung 2.9: Modellversuch zur Polarisation



waagrecht polarisiertes Licht



senkrecht polarisiertes Licht

Abbildung 2.10: Waagrecht und senkrecht polarisiertes Licht

Eigenschaft „senkrecht polarisiert“ *nicht*. Die beiden dynamischen Eigenschaften sind nicht gleichzeitig präparierbar. Es handelt sich um *einander ausschließende Eigenschaften*.

In der Wellentheorie des Lichts kann man sich die Eigenschaft „Polarisation“ und die Wirkungsweise eines Polarisationsfilters mit einem Modellversuch veranschaulichen:

**Experiment 2.8:** Zwei Stativstangen werden wie in Abb. 2.9 verbunden und in senkrechter Stellung befestigt. Mit einem Seil werden Wellen in senkrechter Richtung erzeugt. Die Seilwellen können das „Filter“ ungehindert passieren. Waagerechte Seilwellen werden dagegen von den Stativstangen aufgehalten („absorbiert“).

Bei den Seilwellen hängt es von der *Schwingungsrichtung* ab, ob die Welle durchgelassen wird oder nicht. Die Eigenschaft „Polarisation“ des Lichts lässt sich analog erklären, wenn man auf die Vorstellung von Licht als einer elektromagnetischen Welle Bezug nimmt. Hier ist es die Schwingungsebene des elektrischen Felds, welche die Polarisationsrichtung des Lichts bestimmt (Abb. 2.10). Schwingt das elektrische Feld in waagerechter Richtung, handelt es sich um waagrecht polarisiertes Licht. Allgemein

lässt sich das folgendermaßen formulieren: Besitzt das elektrische Feld einer Lichtwelle ausschließlich eine Komponente in eine bestimmte Raumrichtung, ist das Licht in dieser Richtung polarisiert.

# Kapitel 3

## Wellen und Teilchen

### 3.1 Licht im Interferometer

Einer der interessantesten und rätselhaftesten Aspekte der Quantenmechanik ist die Tatsache, dass sich Photonen und andere Quantenobjekte unter gewissen Umständen wie Wellen und unter anderen Umständen wie Teilchen verhalten. Dieser sogenannte *Welle-Teilchen-Dualismus* wurde bereits in Abschnitt 1.4 angesprochen. Der Versuch, ein tieferes Verständnis dieses eigenartigen Quantenverhaltens zu gewinnen, soll Gegenstand der folgenden Abschnitte sein.

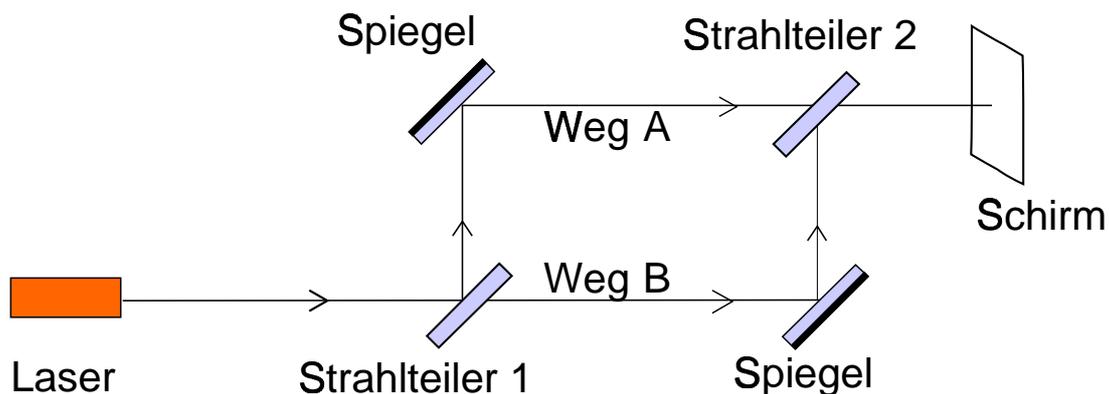


Abbildung 3.1: Mach-Zehnder-Interferometer

Ein charakteristisches Merkmal für Wellenverhalten ist das Auftreten von *Interferenz*. Betrachten wir deshalb einen Versuchsaufbau, bei dem die Interferenz im Vordergrund steht: ein Interferometer. Der folgende Versuch ist als Realexperiment durchführbar, wenn ein Interferometer zur Verfügung steht.<sup>1</sup> Andernfalls kann der Versuch als Computersimulation durchgeführt werden (Das Programm *Interferometer.exe* kann von <http://www.physik.uni-muenchen.de/sektion/didaktik/Computer> heruntergeladen werden).

**Experiment 3.1 (Realexperiment oder Computersimulation):** Abb. 3.1 zeigt den Aufbau eines *Mach-Zehnder-Interferometers*. Das Licht eines Lasers fällt auf einen Strahlteiler (einen

<sup>1</sup>Die Versuche im vorliegenden Abschnitt werden am Mach-Zehnder-Interferometer besprochen, da dieses einen einfach zu durchschauenden Aufbau besitzt. Sollte jedoch ein Michelson-Interferometer vorhanden sein, ist das Experiment auch damit durchführbar.

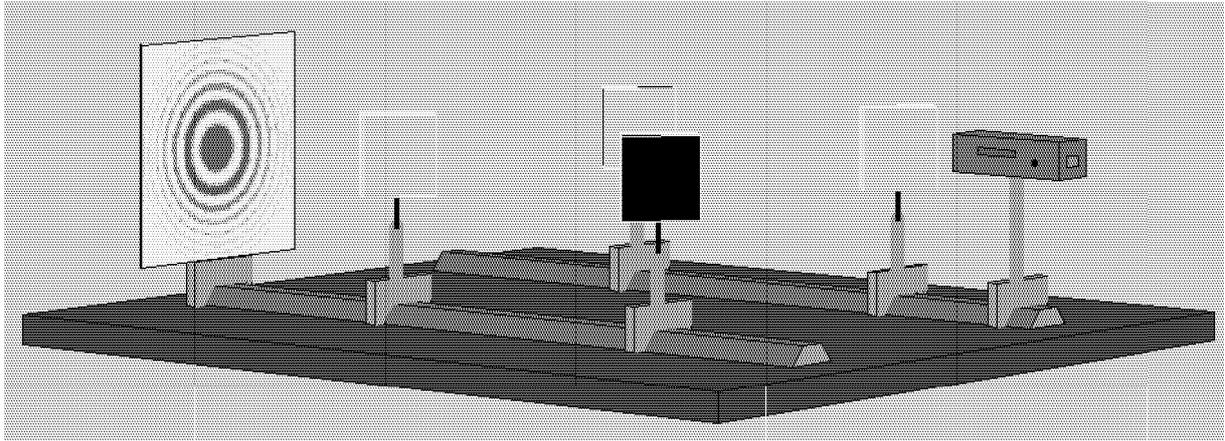


Abbildung 3.2: Interferenzmuster bei intensivem Laserlicht

halbdurchlässigen Spiegel) und wird von diesem in zwei Anteile aufgespalten, die entlang verschiedener Wege laufen (Weg A und Weg B). Beide Teilstrahlen werden durch Spiegel um  $90^\circ$  umgelenkt. An ihrem Schnittpunkt steht ein weiterer Strahlteiler, der die beiden Teilstrahlen wieder „mischt“.

Schalten Sie den Laser ein (mit der Maus auf den Einschaltknopf drücken). Auf dem Schirm erscheint ein Muster aus konzentrischen Kreisen (Abb. 3.2)

Das Wesentliche am Interferometer ist, dass das Licht in zwei Teilstrahlen aufgespalten wird, die auf verschiedenen Wegen laufen, bis sie vom zweiten Strahlteiler wieder zusammengeführt werden. Die Gangunterschiede, die sich auf den verschiedenen Wegen von der Quelle zum Schirm ergeben, führen zu einem **Interferenzmuster**.

Experiment 3.1 ist ein Interferenzexperiment; es demonstriert also die **Welleneigenschaften** des Lichts. Andererseits wissen wir, dass dies noch nicht die ganze Wahrheit ist. Im Photoeffekt (Kapitel 1) hat Licht auch **Teilcheneigenschaften** gezeigt. Dies führte zur Modellvorstellung von Licht als einem Strom von Energiequanten, den Photonen.

Es wäre eine spannende Angelegenheit, wenn man das Experiment mit *einzelnen Photonen* durchführen könnte. Was würde dann passieren? Könnte man Welleneigenschaften und Teilcheneigenschaften *im gleichen Experiment* beobachten? Würden die beiden Verhaltensweisen irgendwie koexistieren? Oder schließen sie sich gegenseitig aus? Wir sollten versuchen, das Experiment tatsächlich durchzuführen, um diese interessanten Fragen zu beantworten.

## 3.2 Vom Lichtstrahl zu einzelnen Photonen

Um Experimente mit einzelnen Photonen durchzuführen, muss man das Licht extrem „verdünnen“. Die Frage ist: Wie stellt man derartiges Licht her und wie weist man es nach? Die Erzeugung ist nicht schwierig:

**Experiment 3.2:** In einem gut abgedunkelten Raum wird vor einen Laser ein Graufilter nach dem anderen gestellt, so lange bis das Licht nicht mehr zu erkennen ist (Abb. 3.3).

Mit jedem Graufilter wird das Licht weiter abgeschwächt, bis die Intensität schließlich so gering ist, dass man nichts mehr wahrnimmt. Einzelne Photonen sieht man dabei aber nicht. „Schuld“ daran ist

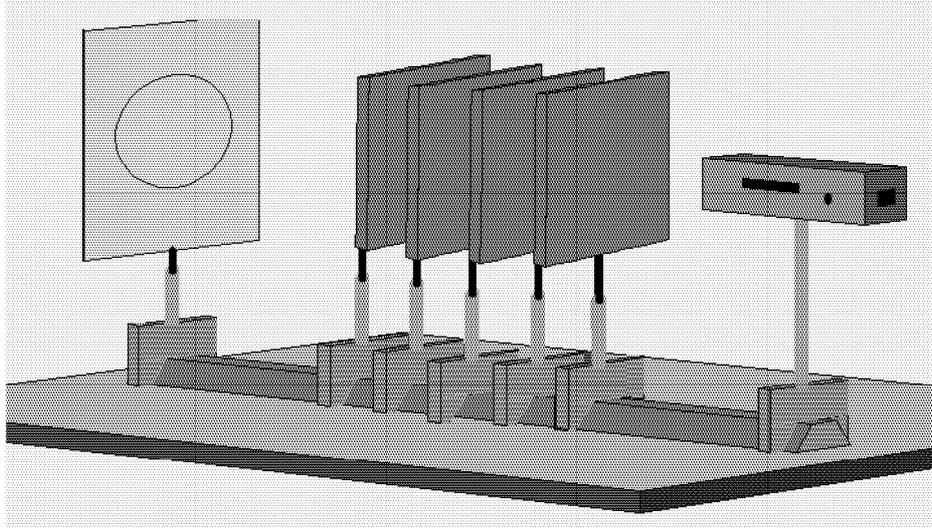


Abbildung 3.3: Abschwächen von Laserlicht

aber nicht unser Auge, sondern das visuelle Nervensystem, das für die Verarbeitung von optischen Reizen zuständig ist. Tatsächlich konnte nachgewiesen werden, dass die Stäbchen in der menschlichen Netzhaut auf einzelne Photonen reagieren. Die Verschaltung der Nerven, die von der Netzhaut zum Gehirn führen, macht es aber notwendig, dass innerhalb von 100 ms etwa 9 Photonen in einem gewissen Netzhautbereich registriert werden, damit ein Signal ins Gehirn weitergeleitet wird.

Das Problem besteht also im Nachweis der Photonen. Das bloße Auge ist nicht dazu geeignet, einzelne Photonen nachzuweisen. Ein Gerät, mit dem dies gelingt, ist ein CCD-Element, wie es z. B. auch in Videokameras verwendet wird. Ein CCD-Element ist eine flächenhafte Anordnung von Halbleiter-Detektorbausteinen, die die Photonen nachweisen. Empfindliche CCD-Elemente können sogar einzelne Photonen registrieren. Der Ort, wo die Photonen auftreffen, wird elektronisch gespeichert, so dass die räumliche Verteilung der Photonen sichtbar gemacht werden kann.

Damit sind die Grundvoraussetzungen erfüllt, um optische Experimente mit einzelnen Photonen diskutieren zu können. Da solche Experimente als Realexperimente nur sehr schwierig durchzuführen sind, müssen wir zur Computersimulation übergehen. Im Simulationsprogramm kann man zwischen dem Laser und der Quelle für einzelne Photonen einfach per Mausklick umschalten.

### 3.3 Interferometrie mit einzelnen Photonen

Führen wir das oben betrachtete Interferenzexperiment nun also mit einzelnen Photonen durch

**Experiment 3.3 (Computersimulation):** Starten Sie das Interferometer-Simulationsprogramm. Wählen Sie an der Lichtquelle „einzelne Photonen“ aus und schalten Sie die Quelle ein. Sie werden bemerken, dass jedes Photon nur einen einzelnen Detektorbaustein auf dem CCD-Element anspricht. Die räumliche Verteilung, die sich nach dem Nachweis von nur wenigen Photonen ergibt, ist in Abb. 3.4 gezeigt. Sie weist scheinbar keinerlei Regelmäßigkeit auf.

Wenn die Zahl der registrierten Photonen langsam ansteigt, sehen Sie, wie sich aus den Spuren der einzeln nachgewiesenen Photonen langsam ein Muster herausbildet. Es handelt sich um das kreisförmige Interferenzmuster, das schon in Experiment 3.1 mit intensivem Licht

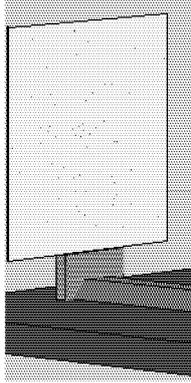


Abbildung 3.4: Verteilung weniger nachgewiesener Photonen

beobachtet wurde. Abbildung 3.5 zeigt den allmählichen Aufbau des Musters aus einzelnen Photonen-„Einschlägen“.

Dieses Experiment ist ein Beispiel für den „Dualismus“ von Welle und Teilchen für Photonen. Jedes Photon überträgt seine ganze Energie auf einen einzigen Detektorbaustein. Ein solches Verhalten, bei dem eine Wechselwirkung ganz lokalisiert erfolgt, ist typisch für Teilchen. Eine Welle ist dagegen über den ganzen Bereich ausgedehnt. Sie würde ihre Energie gleichmäßig verteilen. Sie würde also eine ganze Anzahl von Detektorbausteinen ansprechen. Das Interferenzmuster wäre von Anfang an vorhanden, wenn auch in abgeschwächter Form.

Aber auch das Teilchenmodell reicht alleine nicht aus, um das Experiment zu erklären. Das Interferenzmuster, das sich aus vielen Einzeleinschlägen von Photonen aufbaut, ist ein charakteristisches Merkmal einer Welle. Es ist nicht klar, wie ein Teilchenmodell die Entstehung dieses Musters erklären könnte. Dies illustriert noch einmal deutlich: *Eine einfache Alternative zwischen Welle und Teilchen gibt es in der Quantenmechanik nicht* (vgl. Abschnitt 1.4).

**Es ist nicht möglich, das physikalische Verhalten von Photonen in einem reinen Teilchen- oder Wellenmodell zu beschreiben. Eine befriedigende Erklärung muss Elemente beider Modelle in sich vereinigen.**

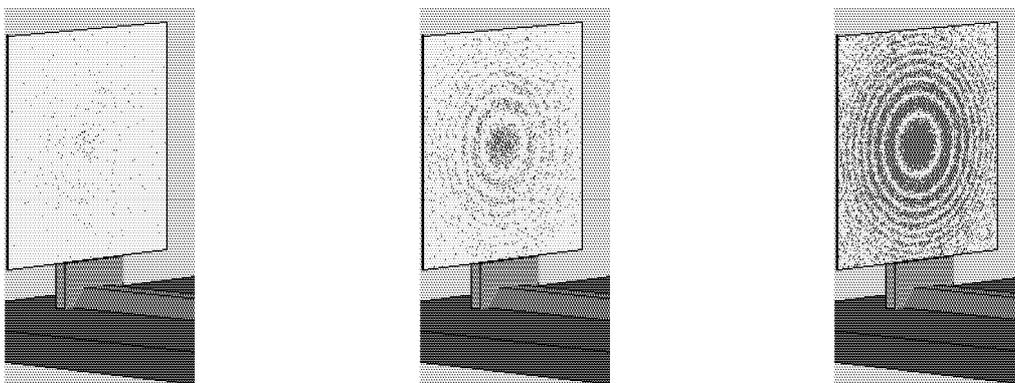


Abbildung 3.5: Aufbau des Interferenzmusters aus den Spuren einzelner Photonen

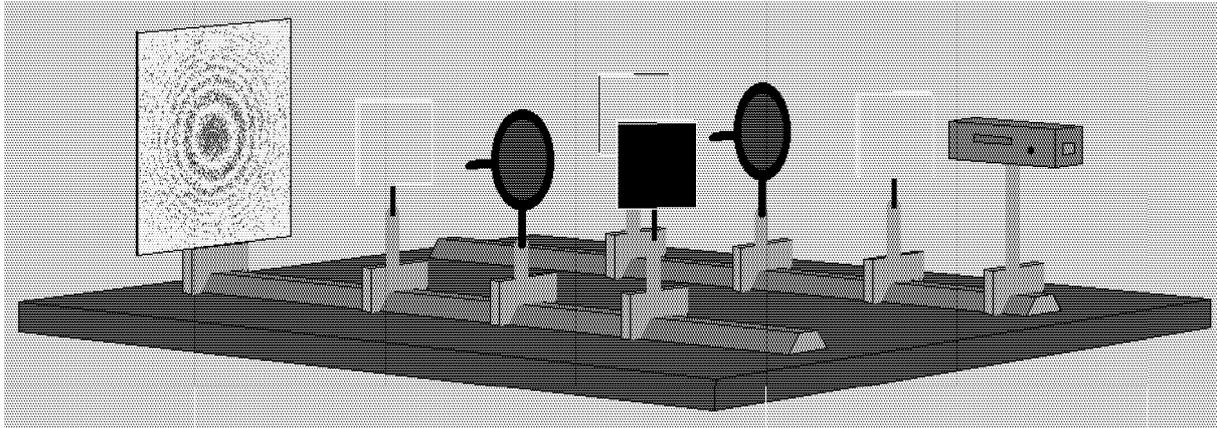


Abbildung 3.6: Mach-Zehnder-Interferometer mit Polarisationsfiltern

Man kann den scheinbaren Konflikt zwischen Wellen- und Teilchenverhalten sogar noch verschärfen. Wir stellen uns dazu eine Serie von Experiment mit einzelnen Photonen vor. Das heisst, dass in jedem Experiment nur ein einzelnes Photon nachgewiesen wird. Die Experimente sollen zeitlich so weit auseinanderliegen, daß ein gegenseitiger Einfluß ausgeschlossen ist. In jedem dieser Einzelexperimente findet man einen Fleck, der vom Nachweis des Photons herrührt. Er befindet sich an einer vermeintlich zufälligen Stelle. Notiert man bei jedem dieser Experimente die Koordinaten der Flecke und trägt sie in ein gemeinsames Diagramm ein, zeigt sich in den Eintragungen eine überraschende Struktur: das bekannte Interferenzmuster. Obwohl jedes der Experimente für sich nur einen einzelnen Fleck lieferte, der sicherlich nicht als ein Wellenphänomen oder als ein abgeschwächtes Interferenzbild aufgefaßt werden kann, liefert die Gesamtheit der unabhängigen Experimente das wellentypische Beugungsmuster.

### 3.4 Kann man einem Photon einen Weg zuschreiben?

Die Tatsache, dass im selben Experiment sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften sichtbar werden, ist schon recht eigentümlich. In der Tat verhalten sich Photonen aber noch viel erstaunlicher. Beim Nachweis regen Photonen nur einen einzigen Detektorbaustein an. Dürfen wir sie uns *innerhalb* des Interferometers ähnlich gut lokalisiert (also teilchenhaft) vorstellen? Wenn das der Fall wäre, müsste jedes einzelne Photon entweder auf Weg A oder auf Weg B in Abb. 3.1 zum Detektor gekommen sein (und zwar nur auf einem der beiden Wege).

Um dies zu klären, benutzen wir den Begriff der dynamischen Eigenschaft. Wir fragen, ob ein Photon innerhalb des Interferometers die Eigenschaft „Weg“ besitzt. Das ist sicher dann der Fall, wenn man an jedem Photon eine *Markierung* anbringen kann, die eine Entscheidung zwischen Weg A und Weg B erlaubt. Um die Photonen zu markieren, kann man die Eigenschaft „Polarisation“ benutzen (vgl. Abschnitt 2.3). Dazu zunächst ein Vorversuch:

**Experiment 3.4 (Computersimulation):** Klicken Sie auf den Labortisch. Ein Fenster erscheint, in dem Sie die Konfiguration des Labors verändern können. Aktivieren Sie das Polarisationsfilter in jedem der beiden Interferometerwege. Mit den Hebeln an den Polarisationsfiltern können Sie mit der Maus die jeweilige Polarisationsrichtung einstellen. Stellen Sie beide Polarisationsfilter zunächst senkrecht ein und schalten Sie die Quelle ein. Sie werden feststel-

len, dass sich wie in Versuch 3.3 aus den „Einschlägen“ vieler einzelner Photonen nach und nach das Interferenzmuster zusammensetzt. Das gleiche Resultat ergibt sich, wenn wir beide Polarisationsfilter in waagerechte Stellung bringen und das Experiment wiederholen.

Das Einbringen der beiden gleich eingestellten Polarisationsfilter hat an dem Ergebnis des Experiments nichts verändert. Der einzige Unterschied zu Experiment 3.3 ist, dass die Polarisationsfilter im Mittel die Hälfte der Photonen absorbieren, so dass es länger dauert, bis sich das Interferenzmuster zusammensetzt.

Nun können wir zum eigentlich interessanten Punkt kommen. Wir markieren mit den Polarisationsfiltern die beiden Wege A und B. Dazu wird das Polarisationsfilter in Weg B waagrecht eingestellt, das Polarisationsfilter in Weg A bleibt senkrecht eingestellt.

Jedes Photon trägt nun eine Markierung, aus der wir zurückschließen können, welches Polarisationsfilter es passiert hat. Überlegen wir uns, was wir folgern können, wenn wir ein senkrecht polarisiertes Photon auf dem Schirm nachweisen. Es muss offenbar auf Weg A zum Detektor gekommen sein. Weg B scheidet aus, denn das Polarisationsfilter ist dort waagrecht eingestellt und würde kein senkrecht polarisiertes Photon durchlassen. Durch Messung der Polarisationsrichtung können wir für jedes einzelne Photon entscheiden, ob es Polarisationsfilter A oder B passiert hat. So wird die Eigenschaft „Weg“ durch die Polarisation markiert.

Die Frage ist: Hat die Tatsache, dass man von jedem Photon sagen kann, dass es entweder Weg A oder Weg B genommen hat, irgendwelche Auswirkungen auf das Versuchsergebnis? Führen wir das Experiment durch:

**Experiment 3.5 (Computersimulation):** Bringen Sie das in Weg B befindliche Polarisationsfilter in waagerechte Stellung und schalten Sie die Quelle ein. Wieder regt jedes einzelne Photon nur einen Detektorbaustein an. Aus den Spuren vieler Photonen bildet sich jedoch *kein* Interferenzmuster, sondern eine strukturlose Verteilung (Abb. 3.5).

Vergleichen wir die Experimente 3.4 und 3.5: Das einfache Verstellen des Polarisationsfilters in Weg B von der senkrechten in die waagerechte Stellung hat ausgereicht, um das Interferenzmuster zu verhindern. Der kleine, aber wesentliche Unterschied liegt darin, dass man im zweiten Experiment jedem Photon, das am Detektor eintrifft, die Eigenschaft „Weg“ zuschreiben kann, d. h. man kann mit Sicherheit sagen, dass es einen der beiden Wege genommen hat.

Umgekehrt können wir schließen – und das ist das eigentlich Erstaunliche bei diesem Experiment: Beim Experiment ohne Polarisationsfilter besitzen die Photonen die Eigenschaft „Weg“ *nicht*. Es ist nicht erlaubt, sich vorzustellen, dass ein bestimmtes Photon genau einen der beiden Wege genommen hat. Denn prägt man dem Photon eine Weginformation auf, erhält man kein Interferenzmuster.

Dabei macht es nichts aus, dass im Detektor die Polarisation der Photonen gar nicht gemessen wird. Es ist ausreichend, dass die Photonen die Information über den Weg in sich tragen, um die Interferenz zu verhindern.

Allgemein lässt sich sagen:

**In der Quantenmechanik ist es möglich, dass einem Quantenobjekt eine bestimmte Eigenschaft (z. B. „Weg A“ oder „Weg B“) *nicht* zugeschrieben werden kann.**

Man kann sich dies auch auf anschauliche Art plausibel machen: In Experiment 3.4, wo sich das Interferenzmuster zeigte, gab es Stellen auf dem Schirm, an denen kein einziges Photon nachgewiesen wurde. In Experiment 3.5 fanden wir an diesen Stellen dagegen Photonen. Stellen wir uns ein Photon nun als lokalisiertes Gebilde vorstellen, das auf einem der beiden Wege, z. B. Weg A, entlangläuft.

Dann muss es auf irgendeine Weise „wissen“, wie das Polarisationsfilter in Weg B steht, denn je nach dessen Stellung muss es die leeren Stellen vermeiden oder nicht. Es ist nicht leicht, sich auszumalen, wie das Photon das „Wissen“ über die Stellung des Polarisationsfilters im anderen Arm erlangt haben kann (Abb.). Die Vorstellung vom Photon als einem lokalisiertem Gebilde, das entweder auf Weg A oder auf Weg B zum Schirm gelangt, gerät hier in Schwierigkeiten. Die Quantenmechanik sagt, dass wir sie aufgeben müssen.

### 3.5 Teilt sich das Photon?

Wir haben bisher gesehen, dass man ein Photon im Interferometer weder als Teilchen noch als Welle betrachten kann. Ebenso darf man ihm die Eigenschaft „Weg“ zuschreiben. Ein naheliegender Ausweg, um das Verhalten der Photonen trotzdem mit anschaulichen Begriffen zu beschreiben, ist die Vorstellung, dass sich ein Photon am ersten halbdurchlässigen Spiegel irgendwie „aufspaltet“. Die getrennten Teile des Photons – so könnte man sich vorstellen – würden dann auf verschiedenen Wegen zum zweiten halbdurchlässigen Spiegel gelangen und sich dort wieder vereinigen. Diese Vorstellung böte eine elegante Lösung des Problems. Ihr einziger Nachteil ist: Sie ist falsch. Man kann experimentell demonstrieren, dass bei einer Messung keine „halben“ Photonen gefunden werden.

**Experiment 3.6 (Computersimulation):** Stellen Sie wie in Abb. 3.7 in die beiden Wege des Mach-Zehnder-Interferometers je einen Photonendetektor (Mit der Maus auf den Labor-tisch klicken und die Photonendetektor auswählen). Schalten Sie die Lichtquelle ein und lassen Sie sie einzelne Photonen emittieren. An den Detektoren blinkt ein Signal auf, wenn ein Photon nachgewiesen wurde. Es spricht jeweils nur einer der beiden Detektoren an, niemals beide gleichzeitig. Mehrere „Teile“ von Photonen werden demnach nicht gefunden.

Photonen spalten sich also an dem halbdurchlässigen Spiegel im Interferometer nicht in „Teile“ auf. Bei einer Messung wird ein Photon immer nur als Ganzes in einem der Wege A oder B gefunden.

Die Ergebnisse von Experiment 3.5 und 3.6 scheinen sich zunächst zu widersprechen: Experiment 3.5 sagt, dass man einem Photon keinen Weg zuordnen kann, wohingegen Experiment 3.6 zeigt, dass man bei einer Messung immer ein ganzes Photon in einem der Wege A oder B findet. Es handelt sich hierbei jedoch nicht um einen Widerspruch, sondern um einen zentralen Zug der Quantenmechanik: Obwohl ein Photon im Interferometer keine der Eigenschaften „Weg A“ oder „Weg B“ besitzt, wird es bei einer *Messung* immer als ganzes in einem der Arme gefunden. Der Begriff der Messung stellt in der Quantenmechanik nicht mehr eine einfache Zurkenntnisnahme einer dem Quantenobjekt bereits zukommenden Eigenschaft dar. Sie stellt im allgemeinen eine nicht zu vernachlässigende Beeinflussung des Systems dar. Bevor wir in den nachfolgenden Kapiteln zu einer tiefergehenden Analyse dieser Probleme übergehen, soll hier eine vorläufige Formulierung dieses Grundprinzips gegeben werden:

**Obwohl ein Quantenobjekt eine Eigenschaft (z. B. „Weg im Interferometer“) nicht besitzen muss, wird bei einer Messung dieser Eigenschaft immer ein bestimmter Wert gefunden (z. B. „Weg A“ oder „Weg B“).**

## Kapitel 4

# Die statistischen Aussagen der Quantentheorie

### 4.1 Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen

Ein Experiment, das in den nachfolgenden Kapiteln immer wieder betrachtet werden wird, ist das aus der Optik bekannte **Doppelspaltexperiment**:

**Experiment 4.1:** Verdunkeln Sie den Raum und lassen Sie das Licht eines Lasers auf einen Doppelspalt fallen. Sie werden ein ähnliches Muster wie in Abb. 4.1 sehen.

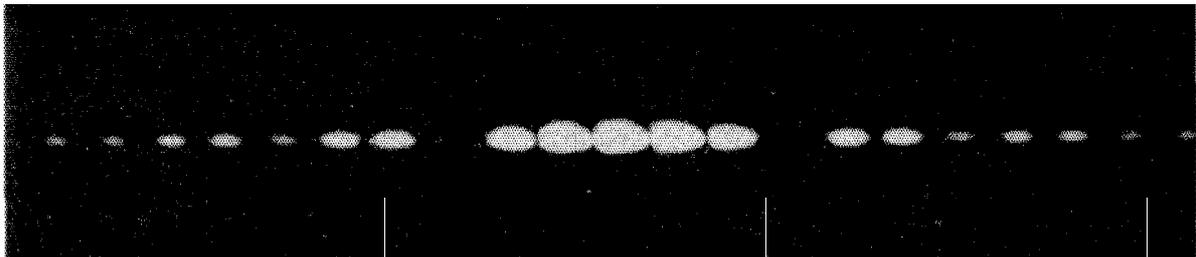


Abbildung 4.1: Doppelspaltversuch mit Laserlicht

In der klassischen Optik wird das beobachtete Muster dadurch erklärt, dass von beiden Spalten Elementarwellen ausgehen und miteinander interferieren. Ähnlich wie das Interferenzmuster in Experiment 3.1 (Mach-Zehnder-Interferometer) ist dieser Versuch ein Beispiel für die Interferenz von Licht – eine typische Welleneigenschaft.

Genau wie beim Interferometer-Versuch wollen wir dieses Experiment nun mit einzelnen Photonen durchführen, um auch hier die charakteristischen quantenmechanischen Eigenheiten kennenzulernen. Wie sich vor allem in Kapitel 6 zeigen wird, gibt es beim Doppelspalt-Experiment eine ganze Menge merkwürdiger Quantenerscheinungen zu entdecken.

Da ein reales Doppelspalt-Experiment mit einzelnen Photonen zwar möglich, aber doch sehr aufwendig ist, greifen wir auch hier zur Computersimulation.<sup>1</sup> Installieren Sie das Simulationsprogramm „Doppelspalt“ nun auf Ihrem Rechner (Datei „Doppelspalt\_V31.exe“ ausführen) und starten Sie es.

<sup>1</sup>Sie können das Programm „Doppelspalt“ von der Webseite:  
<http://www.physik.uni-muenchen.de/sektion/didaktik/Computer/Doppelspalt> herunterladen.

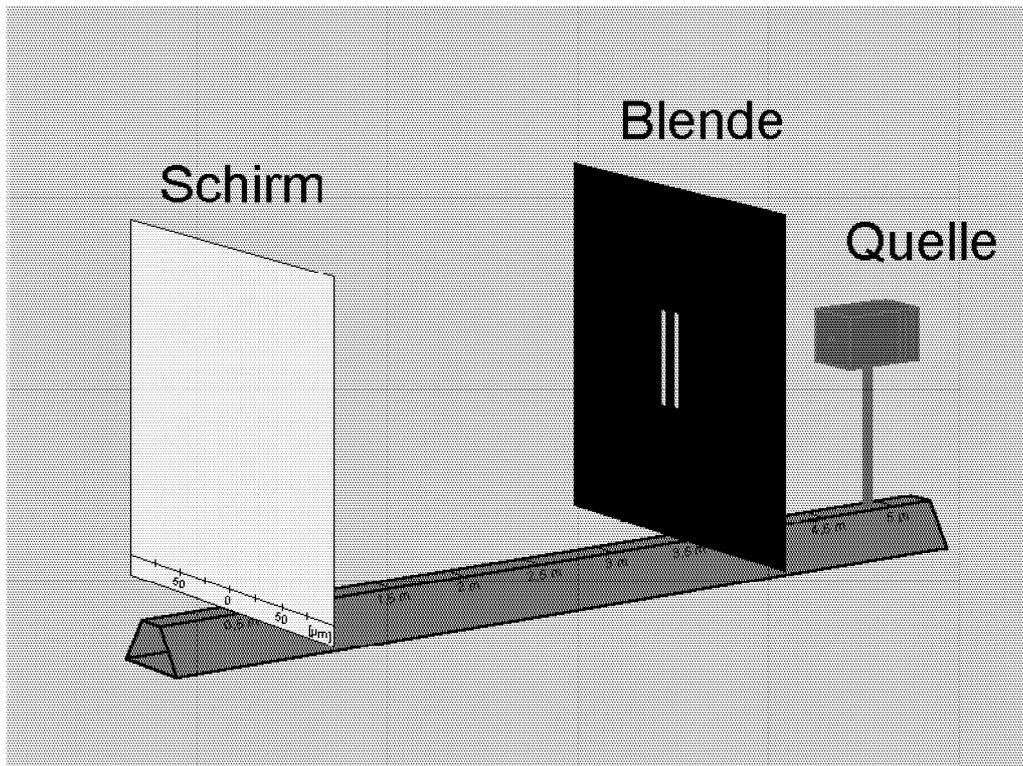


Abbildung 4.2: Das „interaktive Labor“ im Simulationsprogramm zum Doppelspalt-Experiment

Das Simulationsprogramm stellt ein interaktives „Labor“ zur Verfügung. Man kann die experimentellen Parameter variieren und ihren Einfluss auf das Ergebnis des Experiments untersuchen.

Das „Labor“ besteht im wesentlichen aus drei Komponenten (Abb. 4.2):

- einer Quelle, die verschiedene Arten von Quantenobjekten (Elektronen, Photonen, Atome) und klassischen Objekten aussenden kann. Klickt man mit der Maus auf die Quelle, erscheint ein Menü, in dem man die Art der ausgesendeten Objekte und ihre Energie einstellen kann;
- der Blende mit einem Doppel- oder Einfachspalt, deren Breite und Abstand ebenfalls einstellbar sind;
- dem Schirm, auf dem der Nachweis erfolgt.

Beim Aufruf des Programms ist zusätzlich eine Lichtquelle zwischen Blende und Schirm sichtbar. Sie wird erst später benötigt und kann im Moment unbeachtet bleiben.

Nehmen Sie sich einen Augenblick Zeit und probieren Sie das Programm aus. Sie können die Quelle in der Schaltfläche rechts unten oder durch Mausklick auf den Schalter in der Zuleitung einschalten. Bei Unklarheiten kann Ihnen die Hilfefunktion weiterhelfen.

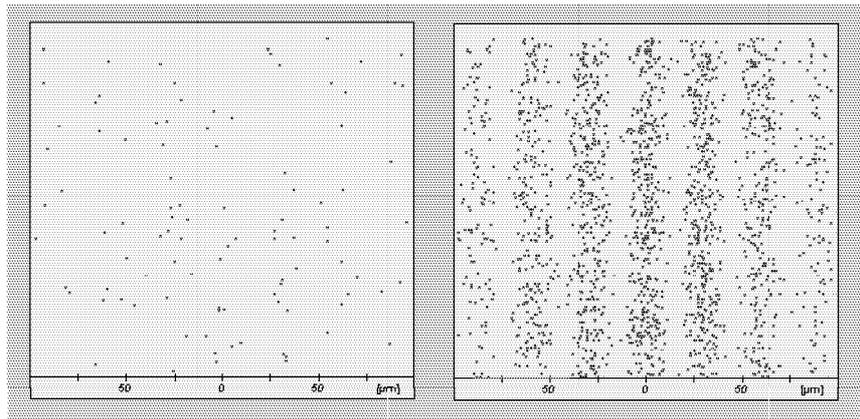


Abbildung 4.3: Allmählicher Aufbau des Doppelspalt-Interferenzmusters aus einzelnen „Einschlägen“

## 4.2 Das Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen und die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie

Mit dem Simulationsprogramm können wir nun das Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen durchführen.

**Experiment 4.2 (Computersimulation):** Führen Sie das folgende Simulationsexperiment durch: Wählen Sie Photonen mit einer Energie von 200 eV, eine Spaltbreite von 200  $\mu\text{m}$  und einen Spaltabstand von 700  $\mu\text{m}$ . Nach Einschalten der Quelle werden Photonen auf dem Schirm nachgewiesen. Sie hinterlassen punktförmige „Flecken“ an scheinbar zufälligen Stellen auf dem Schirm. Sie werden feststellen, dass sich ein Muster herausbildet, je mehr Photonen nachgewiesen werden (evtl. mit der Taste „Speed“ beschleunigen). Es handelt sich um das aus Experiment 4. 1 bekannte Doppelspalt-Interferenzmuster (Abb. 4.3).

Dieser allmähliche Aufbau des Interferenzmusters aus einzelnen „Einschlägen“ ist uns schon aus dem entsprechenden Versuch am Interferometer bekannt (Experiment 3.3). Dort diente der Versuch zur Verdeutlichung des „Welle-Teilchen-Dualismus“. Dies soll hier aber nicht weiter verfolgt werden. Stattdessen wollen wir uns darauf konzentrieren, welche Vorhersagen man über den Ort auf dem Schirm machen kann, an dem ein bestimmtes Photon nachgewiesen wird.

**Experiment 4.3 (Computersimulation):** Schalten Sie nun die Quelle aus und betrachten Sie das Muster, das die Photonen auf dem Schirm hinterlassen haben. Nehmen wir an, Sie wollten noch ein einzelnes weiteres Photon hinzufügen. Können Sie vorhersagen, an welcher Stelle auf dem Schirm dieses Photon nachgewiesen wird?

Wenn Sie den Versuch durchführen, indem Sie die Quelle für eine kurze Zeit einschalten, erscheint ein neuer Fleck auf dem Schirm. Es dürfte Ihnen nicht gelungen sein, den exakten Ort dieses neuen Flecks vorherzusagen.

**Experiment 4.4 (Computersimulation):** Die Vorhersage wird erfolgreicher, wenn man das Experiment ein wenig modifiziert. Es sollen nun 100 weitere Photonen hinzugefügt werden. Können Sie vorhersagen, an welchen Stellen viele Photonen landen werden und an welchen Stellen wenige?

Führen Sie den Versuch durch. Löschen Sie dazu das Schirmbild (auf den Schirm klicken und Reset drücken), schalten Sie die Quelle ein und warten, bis 100 Treffer gezählt wurden. Vergleichen Sie das Ergebnis mit Ihren Vorhersagen.

Vermutlich war ihre Vorhersage im letzten Experiment recht zuverlässig. Worin liegt der Unterschied zwischen den beiden Experimenten? Im zweiten Experiment haben wir die Spielregeln geändert: Wir sind von einer Aussage über ein **Einzelereignis** zu einer **Wahrscheinlichkeitsaussage** übergegangen. Tatsächlich ist es ein ganz allgemeiner Zug der Quantenmechanik, dass im allgemeinen keine Vorhersagen über Einzelereignisse möglich sind; man ist gezwungen, zu statistischen Aussagen überzugehen.

### 4.3 Präparation und Wahrscheinlichkeitsaussagen

Die Bedeutung der Wahrscheinlichkeitsaussagen in der Quantenmechanik wird klarer, wenn wir den in Kapitel 2 eingeführten Begriff der Präparation benutzen. Wir unterteilen das Doppelspaltexperiment in drei Phasen (die ganz allgemeingültig sind):

- **Präparation:** Die Quelle sendet Licht (Photonen) einer ganz bestimmten Frequenz aus. Dies entspricht der Präparation, bei der vom Experimentator genau bestimmte Anfangsbedingungen hergestellt werden müssen.
- **Wechselwirkung:** Die in der Quelle präparierten Photonen wechselwirken mit dem Doppelspalt. Der vorher präparierte Zustand wird dadurch verändert (umpräpariert). Meist ist die Untersuchung dieser Wechselwirkung das Ziel eines physikalischen Experiments.
- **Messung:** Die Messung besteht im Nachweis der Photonen auf dem Schirm und der Feststellung, an welcher Stelle ein Photon einen Fleck auf dem Schirm hinterlassen hat.

Experimente in der klassischen Physik laufen ebenfalls nach diesem Schema ab. Wenn man einen Basketball so wirft, dass er in den Korb fällt, besteht die Präparation darin, den Ball mit der richtigen Geschwindigkeit unter dem richtigen Winkel abzuwerfen. Die Wechselwirkung besteht in der Ablenkung durch die Erdanziehungskraft.

Führt man dieselbe Präparation (d. h. denselben Abwurf) mehrere Male hintereinander in genau der gleichen Weise aus, wird der Ball immer an derselben Stelle landen, d. h. in den Korb fallen. Das Ergebnis ist reproduzierbar. Ganz allgemein gilt in der klassischen Physik: Wenn man eine Reihe von Versuchen macht und dabei das Objekt immer auf gleiche Weise präpariert, findet auch die Wechselwirkung in gleicher Weise statt und das Ergebnis der Messung ist für alle Versuche in der Versuchsreihe identisch.

In der Quantenmechanik ist das anders. Beim Doppelspaltexperiment waren alle Photonen identisch präpariert. Sie besaßen gleiche Energie, wurden vom gleichen Ort in die gleiche Richtung emittiert. Trotzdem gelang es uns nicht, das Ergebnis der Messung (d. h. den Ort auf dem Schirm) für ein einzelnes Photon vorherzusagen. Die Photonen sind *nicht* an der gleichen Stelle gelandet; das einzelne Ergebnis war *nicht* reproduzierbar. Wir konnten nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage machen: Nimmt man eine große Anzahl von Photonen und unterwirft sie dem gleichen Präparationsverfahren, so ergibt sich nach der Wechselwirkung mit dem Doppelspalt eine *reproduzierbare Verteilung*. Die *relativen Häufigkeit* der an einem Ort nachgewiesenen Photonen (d. h. die Zahl der dort nachgewiesenen Photonen im Verhältnis zur Gesamtzahl der Photonen) ist zuverlässig vorhersagbar, wie sich in Experiment 4.4 herausgestellt hat.

Eine Menge von sehr vielen gleich präparierten Objekten, die sich gegenseitig nicht beeinflussen, nennt man ein **Ensemble**. Dieser Begriff wird sich später bei der statistischen Beschreibung von Quantenobjekten noch als nützlich erweisen.

Die Unmöglichkeit einer detaillierten Vorhersage über Einzelereignisse ist etwas ganz Neues und charakteristisch Quantenmechanisches. Es stellt sich die Frage, ob man einem Photon nicht doch irgendwie „ansehen“ kann, an welcher Stelle es auf dem Schirm landen wird. Mit anderen Worten: Vielleicht haben wir ja bei der Präparation nicht alle Eigenschaften des Photons erfasst und es besitzt noch ein weiteres Merkmal, das festlegt, wo es landet? Intuitiv bezweifelt man, dass das dem Zufall überlassen bleibt, denn es widerspräche allen Erfahrungen mit der klassischen Physik (wie dem Basketballwurf oben)

Nach der Quantenmechanik gibt es *kein* Merkmal und keine zusätzlichen Parameter, an denen sich vorher ablesen ließe, wo ein bestimmtes Photon auf dem Schirm landet. Es ist keine „vollständigere“ Präparation der Photonen möglich. Für ein einzelnes Photon wird der Ort des Nachweises tatsächlich vom Zufall bestimmt. Dies ist ein zentraler Zug der Quantenmechanik:

**Die Quantenmechanik macht statistische Aussagen über die relative Häufigkeit der Ergebnisse bei oftmaliger Wiederholung des gleichen Experiments. Aussagen über Einzelereignisse sind im allgemeinen nicht möglich.**

Bedeutet dieses Ergebnis, dass mit der Quantenmechanik die wissenschaftliche Vorhersagbarkeit, die einen der Grundpfeiler der Physik darstellt, zu Grabe getragen werden muss? Obwohl es auf den ersten Blick so scheinen mag, ist dies doch nicht der Fall. Die Physik beschäftigt sich nicht mit einzelnen Ereignissen, sondern immer nur mit reproduzierbaren (d. h. wiederholbaren) Phänomenen. Die Quantenmechanik legt nun nicht das Resultat einzelner Experimente fest (z. B. den Ort eines einzelnen Photons), sondern beschreibt eine ganze Serie von Experimenten, indem sie die relativen Häufigkeiten der einzelnen Messergebnisse vorhersagt. Diese statistischen Aussagen sind *reproduzierbar*: Jedesmal wenn die gleiche Serie von Experimenten durchgeführt wird, ergibt sich *dieselbe* Verteilung der relativen Häufigkeiten.

# Kapitel 5

## Elektronen als Quantenobjekte

### 5.1 Elektronenbeugung

In den vorausgegangenen Kapiteln wurde deutlich, dass die traditionelle Vorstellung vom Licht als einer Welle nicht ausreicht, um alle beobachteten Phänomene vollständig zu beschreiben. Es zeigte sich, dass man sowohl das Wellen- als auch das Teilchenmodell zur Beschreibung des Lichts benötigt und dass keines von beiden allein ausreicht, um sein Verhalten vollständig zu beschreiben.

Man kann sich fragen, ob die Natur so symmetrisch aufgebaut ist, dass sich Wellenphänomene auch bei Objekten nachweisen lassen, denen man üblicherweise Teilchencharakter zuschreibt. Im atomaren Bereich wären das Atome und ihre Bestandteile wie Elektronen, Protonen und Neutronen. Der Gedanke einer **Wellennatur der Materie** geht auf Louis de Broglie (1923) zurück. Er ist eine theoretische Vermutung, deren Konsequenzen sich im Experiment bewähren müssen.

Ein Beleg für Welleneigenschaften von Elektronen wäre der Nachweis von **Beugungs- oder Interferenzphänomenen** – den typischen Anzeichen eines Wellenphänomens. Im Fall der Röntgenstrahlung lassen sich Welleneigenschaften durch Beugung an den Netzebenen in einem Kristall aufzeigen. Ein ganz analoges Vorgehen ist auch bei Elektronen möglich, wie der folgende Versuch zeigt:

**Experiment 5.1 (Elektronenbeugung):** In einer Elektronenröhre (Abb 5.1 (a)) emittiert die mit 6 V geheizte Kathode einen Elektronen. Diese durchlaufen eine Beschleunigungsspannung  $U_B = 5 \text{ kV}$ . Sie werden von den nacheinander angeordneten Elektroden  $K_1$ ,  $K_2$  und  $A_1$  zu einem Elektronenstrahl gebündelt. In der durchbohrten Anode  $A_2$  durchquert der Strahl eine dünne Folie aus polykristallinem Graphit. Auf dem Leuchtschirm erkennt man mehrere helle

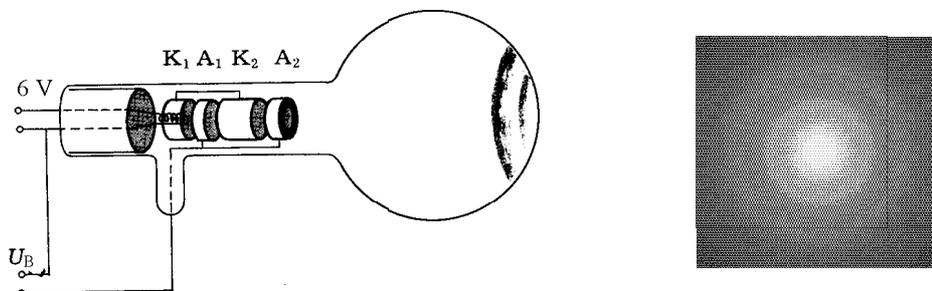


Abbildung 5.1: (a) Elektronenbeugungsröhre, (b) Beugungsmuster auf dem Leuchtschirm

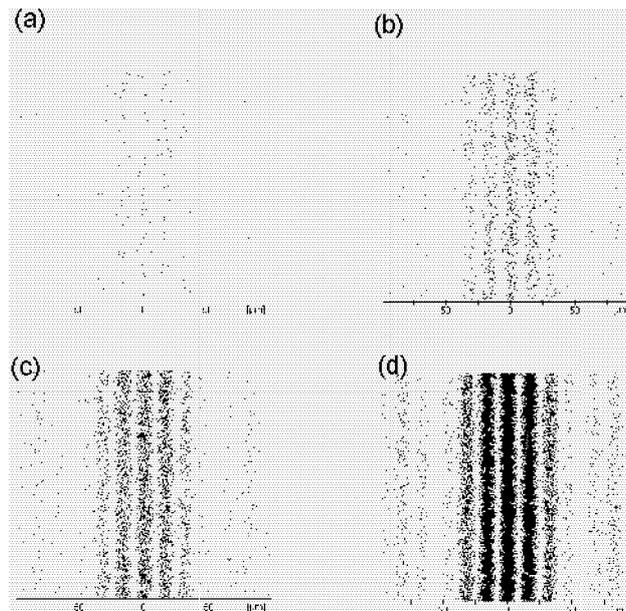


Abbildung 5.2: Aufbau des Interferenzmusters beim Doppelspalt-Experiment

Ringe um den zentralen Fleck in der Mitte (Abb. 5.1 (b)). Vergrößerung von  $U_B$  bewirkt eine Verkleinerung der Radien.

Die hellen Ringe werden durch **Elektronenbeugung** verursacht. Wie bei der Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlen werden die Elektronen am Kristallgitter des Graphits gebeugt. Dieses Beugungsphänomen ist ein starker Hinweis darauf, dass die Elektronen neben ihrem wohlbekannten Teilchenverhalten auch Wellenverhalten zeigen.

Nach unseren Erfahrungen mit Photonen ist zu vermuten, dass es auch bei Elektronen nicht ausreicht, die Beschreibung auf ein einfaches Teilchen- oder Wellenmodell zu beschränken. es ist zu vermuten, dass das Verhalten der Elektronen komplexer ist. Dem soll in den folgenden Abschnitten nachgegangen werden.

## 5.2 Doppelspaltexperiment mit Elektronen und Atomen

Im Fall der Photonen konnten wir Interferenzphänomene auch am Doppelspalt nachweisen. Ein analoges Experiment lässt sich auch mit Elektronen durchführen. Um das Prinzip zu veranschaulichen, benutzen wir wieder das Simulationsprogramm zum Doppelspalt-Experiment.

**Experiment 5.2 (Computersimulation):** Starten Sie das Simulationsprogramm zum Doppelspalt-Experiment. Wählen Sie Elektronen mit einer Energie von 50 keV, eine Spaltbreite von  $0,3 \mu\text{m}$  und einen Spaltabstand von  $1 \mu\text{m}$ . Schalten Sie die Quelle ein. Die ersten nachgewiesenen Elektronen hinterlassen einzelne punktförmige Spuren an scheinbar zufälligen Stellen auf dem Schirm. Je mehr Elektronen nachgewiesen werden, desto deutlicher setzen sich die punktförmigen Spuren zu dem bekannten Doppelspalt-Interferenzmuster zusammen (Abb. 5.2 (a) – (d)).

Das Verhalten der Elektronen im Doppelspalt-Experiment ist völlig analog zu dem von Photonen (Abschnitt 4.2). Jedes einzelne Elektron verhält sich beim Nachweis wie ein Teilchen. Es überträgt seine

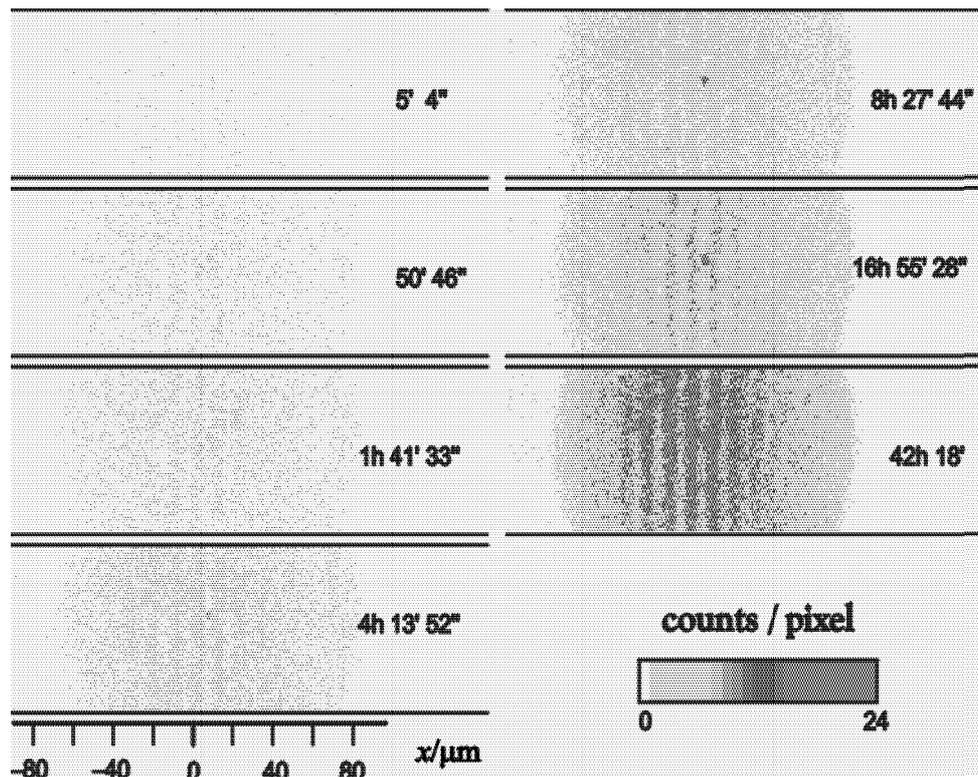


Abbildung 5.4: Aufbau des Interferenzmusters aus einzelnen nachgewiesenen Heliumatomen (experimentelle Originaldaten)

gesamte Energie auf eine einzelne Stelle auf dem Schirm. Erst wenn man die Verteilung aus vielen Einzelaufschlägen betrachtet, zeigt sich die charakteristische Wellenerscheinung des Interferenzmusters.

Auch im Fall von Elektronen zeigt sich damit, dass Quantenobjekte weder reines Wellenverhalten noch reines Teilchenverhalten zeigen. Wenn es sich um ein reines Wellenphänomen handelte, müsste das Interferenzmuster von Anfang an auf dem Schirm vollständig erscheinen, wenn auch mit sehr schwacher Intensität. Statt dessen wird ein wohlbestimmter Energiebetrag an eine bestimmte Stelle auf dem Schirm abgegeben, wie es für teilchenhaftes Verhalten charakteristisch ist. Mit teilchenhaftem Verhalten allein ist aber wiederum das Auftreten des Interferenzmusters nur schwer erklärbar.



Abbildung 5.3: Bei der Beugung von Helium-Atomen verwendeter Doppelspalt

Die technischen Schwierigkeiten bei der Durchführung eines Doppelspalt-Experiments mit Elektronen sind so groß, dass sie lange Zeit nur als Gedankenexperimente vorstellbar waren. Die Schwierigkeit liegt in der Herstellung von Spalten, deren Breite nur einen halben Mikrometer beträgt. Aus diesem Grund gelang es erst 1961 (an der Universität Tübingen), das Doppelspaltexperiment mit Elektronen durchzuführen. Spaltbreite, Spaltabstand und Elektronenenergie entsprachen dabei den in Experiment 5.2 eingestellten Werten.

Inzwischen konnten Beugungsexperimente auch mit Neutronen, mit ganzen Atomen und sogar mit Molekülen verwirklicht werden. An der Universität Konstanz wurde 1991 ein Doppelspaltexperiment realisiert, bei dem Helium-Atome als Ganzes zur Interferenz gebracht wurden. Dies gelang, indem man

sich Techniken aus der Halbleiterherstellung zunutze machte, um aus einer dünnen Goldfolie einen Doppelspalt mit zwei  $1\ \mu\text{m}$  breiten Spalten im Abstand von  $8\ \mu\text{m}$  herzustellen (Abb. 5.3). In dem Experiment wurden die Heliumatome vor dem Doppelspalt durch Elektronenstoß in einen angeregten Zustand gebracht. Dahinter trafen sie auf eine Goldfolie, die als Detektorschirm diente. Sie gaben dort ihre Anregungsenergie ab und wurden elektronisch registriert. Abb. 5.4 zeigt, wie sich nach und nach das Interferenzmuster aus den „Flecken“ einzelner Heliumatome aufbaut. Das Experiment erstreckte sich über einen Zeitraum von 42 Stunden, so dass trotz der großen Zahl der insgesamt nachgewiesenen Atome jedes Atom einzeln registriert werden konnte.

**Experiment 5.3 (Computersimulation):** Führen Sie eine Computersimulation des Doppelspalt-Experiments mit Helium-Atomen durch. Stellen Sie im Simulationsprogramm die oben angegebenen experimentellen Parameter und eine Energie von  $100\ \text{meV}$  ein. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit den Originaldaten aus Abb. 5.4.

### 5.3 Die Wellenlänge von Elektronen

Eine grundlegende Größe zur Charakterisierung einer Welle ist die **Wellenlänge**.<sup>1</sup> Wir gehen deshalb nun der Frage nach, welche Wellenlänge man Elektronen zuschreiben kann. Louis de Broglie, auf den die Idee vom Wellenverhalten der Elektronen zurückgeht, konnte auch einen Ausdruck für ihre Wellenlänge angeben. Man erhält ihn durch eine Analogiebetrachtung mit dem Fall von Photonen. Dort gilt die Relation (1.5) zwischen der Frequenz und dem Impuls eines Photons:

$$p = \frac{h \cdot f}{c}. \quad (5.1)$$

Setzt man in diese Gleichung  $\lambda \cdot f = c$  ein, ergibt sich

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (5.2)$$

In der Analogie zwischen Photonen und Elektronen stellte de Broglie die Hypothese auf, dass diese für Photonen abgeleitete Beziehung auch für Elektronen gilt.

**De-Broglie-Beziehung zwischen Wellenlänge und Impuls:**

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{bzw.} \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad (5.3)$$

Diese Hypothese muss nun experimentell getestet werden. Dies kann mit der schon in Experiment 5.1 benutzten Elektronenbeugungsröhre geschehen. Zunächst stellen wir eine theoretische Erwartung für die Wellenlänge der in Experiment 5.1 verwendeten Elektronen auf. Die Elektronen durchlaufen in der Elektronenstrahlröhre eine Beschleunigungsspannung  $U_B$ . Sie werden dabei auf die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = eU_B$  präpariert. Alle Elektronen, die von der Graphitfolie gebeugt werden, besitzen diesen Wert der kinetischen Energie.

<sup>1</sup>Die quantitative Erfassung der de-Broglie-Wellenlänge in diesem Abschnitt unterbricht die rein qualitativen Überlegungen in diesem Teil des Kurses. Die de-Broglie-Beziehung wird zur Ableitung der Unbestimmtheitsrelation in Kapitel 7 benötigt und kann wahlweise auch an dieser Stelle diskutiert werden.

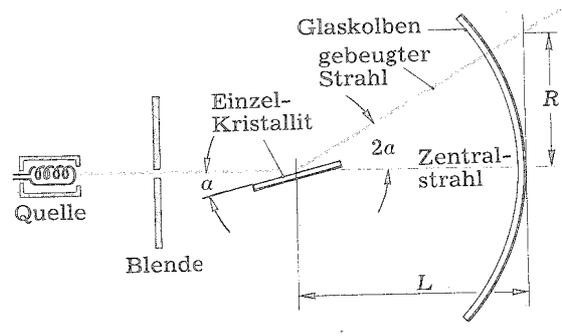


Abbildung 5.6: Geometrie bei der Elektronenbeugung)

Mit  $E_{\text{kin}} = p^2/(2m)$  bringen wir die de-Broglie-Beziehung in die Form

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} = \frac{h}{\sqrt{2meU_B}}. \quad (5.4)$$

Mit  $U_B = 5 \text{ kV}$  erhalten wir für die de-Broglie-Wellenlänge den Wert  $\lambda = 1,7 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ .

Werten wir nun das Experiment 5.1 quantitativ aus. Man muss dazu wissen, dass der Graphitkristall zwei Netzebenen mit den Abständen  $d = 0,213 \text{ nm}$  und  $d = 0,123 \text{ nm}$  besitzt (Abb. 5.5). In Analogie zur Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlung lautet die Bragg-Bedingung für die beiden hellen Ringe der Ordnung  $n = 1$  für beide Netzebenen:

$$\lambda = 2d \sin \alpha. \quad (5.5)$$

Für den hier vorliegenden Fall kleiner Winkel gilt  $2 \sin \alpha \approx \sin 2\alpha \approx \tan 2\alpha$ . Aus der Geometrie der Anordnung (Abb. 5.6) kann man ablesen:

$$\tan 2\alpha = R/L, \quad (5.6)$$

wobei  $R$  der Radius der Beugungsringe und  $L$  der Abstand des Kristalls vom Schirm ist (im vorliegenden Experiment ist  $L = 0,135 \text{ m}$ ). Gleichung (5.5) wird also zu

$$\lambda = \frac{d \cdot R}{L} \quad (5.7)$$

Man misst die Radien  $R_1 = 0,011 \text{ m}$  und  $R_2 = 0,019 \text{ m}$ . Für den ersten Ring mit dem Netzebenenabstand  $d_1 = 0,213 \text{ nm}$  ergibt sich also

$$\lambda = \frac{0,213 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 1,1 \cdot 10^{-2} \text{ m}}{0,135 \text{ m}} = 1,7 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (5.8)$$

Für den zweiten Ring mit  $d_2 = 0,123 \text{ nm}$  findet man

$$\lambda = \frac{0,123 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 1,9 \cdot 10^{-2} \text{ m}}{0,135 \text{ m}} = 1,7 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (5.9)$$

In beiden Fällen stimmt das experimentell erschlossene Ergebnis für  $\lambda$  mit der theoretischen Erwartung nach de Broglies Hypothese überein.

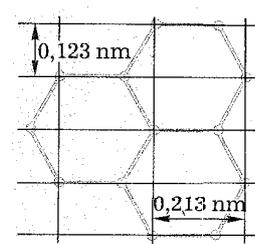


Abbildung 5.5: Netzebenen im Graphitkristall

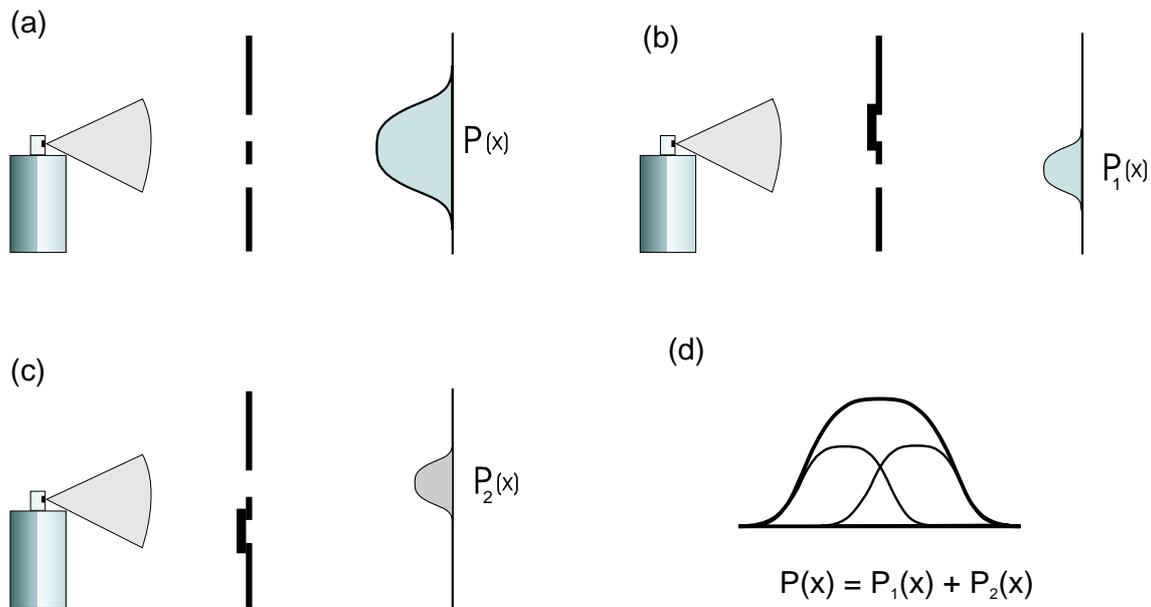


Abbildung 5.7: Doppelspaltversuch mit Farbtropfen (klassischen Teilchen)

## 5.4 Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen und mit Elektronen

Wir haben in den vorangegangenen Abschnitten gesehen, wie sich Elektronen im Doppelspalt-Experiment verhalten. Hätte man ähnliche Ergebnisse auch mit klassischen Teilchen erhalten? Ergibt sich mit Fußbällen, die man durch zwei Löcher in einer Mauer schießt, eine vergleichbare Verteilung? Um Elektronen und klassische Teilchen noch einmal deutlich gegeneinander zu stellen, führen wir den Doppelspalt-Versuch mit Farbspray durch. Es besteht aus kleinen Tröpfchen, und wir dürfen erwarten, dass diese sich nach dem klassischen Teilchenmodell verhalten.

**Experiment 5.4 (Experiment oder Simulation):** Schneiden Sie mit einer scharfen Klinge zwei Spalte in ein Blatt Papier oder Pappe. Sprühen Sie mit einer Farbsprühdose kleine Farbtropfen durch diesen „Doppelspalt“ auf einen dahinterliegenden Papierschirm. Wenn die beiden Spalte nicht zu weit auseinander liegen, werden Sie ein Muster wie in Abb. 5.7 (a) erhalten. Die Intensität der Farbe auf dem Papier ist hinter den Spalten am größten und nimmt nach außen hin kontinuierlich und ohne auffällige Strukturen ab. Wir beschreiben die Verteilung der Farbintensität durch eine Funktion  $P(x)$ .

Der Versuch zeigt, dass sich klassische Farbteilchen anders verhalten als Elektronen. Das von den Elektronen erzeugte Muster (Abb. 5.2) zeigte auffällige Strukturen aus hellen und dunklen Linien, die nicht als geometrischer „Schatten“ des Doppelspalts gedeutet werden konnten.

Es gibt aber auf einer fundamentalen Ebene einen weiteren Unterschied zwischen den von klassischen Teilchen und von Elektronen erzeugten Doppelspalt-Mustern. Er wird in der folgenden Versuchsserie sichtbar:

**Experiment 5.5 (Experiment oder Computersimulation):** In Experiment 5.4 wird Spalt 2 abgedeckt (Abb. 5.7 (b)), so dass nur Farbtropfen von Spalt 1 auf das Papier gelangen. Es ergibt sich die Farbintensitätsverteilung  $P_1(x)$ . Danach wird der andere Spalt abgedeckt, so dass nur Farbe von Spalt 2 auf das Papier gelangt. Man erhält so die Verteilung  $P_2(x)$  (Abb. 5.7 (c)).

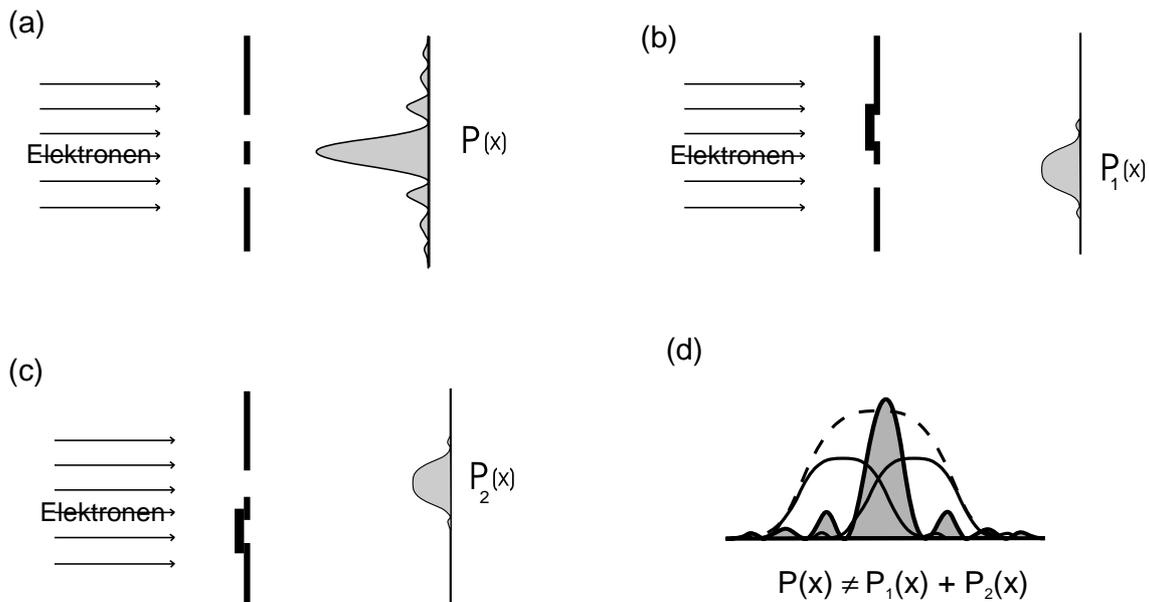


Abbildung 5.8: Doppelspaltversuch mit Elektronen

Für die in den beiden Experimenten gewonnenen Farbintensitätsverteilungen  $P(x)$ ,  $P_1(x)$  und  $P_2(x)$  gilt:

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) \quad (5.10)$$

Für klassische Teilchen ist die beim Doppelspalt gewonnene Verteilung gleich der *Summe der beiden Einzelspaltverteilungen* (Abb. 5.7 (d)).

Ganz anders verläuft ein entsprechendes Experiment mit Elektronen. Zunächst erinnern wir uns noch einmal an das Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten, bei dem sich auf dem Schirm das charakteristische Interferenzmuster ergab (Abb. 5.8 (a)). Die Intensitätsverteilung der Elektronen bezeichnen wir wieder mit  $P(x)$ . Nun wird jeweils einer der Spalte abgedeckt:

**Experiment 5.6 (Computersimulation):** Klicken Sie im Simulationsprogramm zum Doppelspaltversuch auf den Schirm und schließen Sie Spalt 2. Nun können die Elektronen nur noch durch Spalt 1. Wenn Sie die Quelle einschalten und warten, bis sich das Schirmbild aufgebaut hat, erhalten Sie eine Elektronenverteilung  $P_1(x)$ , deren Maximum hinter Spalt 1 liegt (Abb. 5.8 (b)).

Nun öffnen Sie Spalt 2 wieder und schließen Spalt 1. Alle Elektronen müssen jetzt durch Spalt 2. Nach Einschalten der Quelle ergibt sich die Verteilung  $P_2(x)$ , deren Maximum hinter Spalt 2 liegt (Abb. 5.8 (c)).

Legt man die beiden Verteilungsmuster übereinander (Abb. 5.8 (d)), ergibt sich eine *andere* Verteilung, als bei zwei gleichzeitig geöffneten Spalten.<sup>2</sup> Für Elektronen gilt

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x). \quad (5.11)$$

Im Gegensatz zu klassischen Teilchen stellt es für Elektronen einen Unterschied dar, ob beide Spalte gleichzeitig offen sind oder ob einer nach dem anderen geöffnet wird.

<sup>2</sup>Das Übereinanderlegen der beiden Verteilungen können Sie im Simulationsprogramm dadurch erreichen, dass sie auf den Schirm klicken und in dem Fenster, das daraufhin erscheint, auf den mit „A“ beschrifteten Knopf drücken. Damit wird das automatische Löschen des Schirms nach jeder Änderung der Konfiguration verhindert.

Eine Besonderheit fällt beim Vergleich von Abb. 5.8 (a) und (c) auf. Bei zwei geöffneten Spalten (Abb. 5.8 (a)) gibt es mehrere Intensitätsminima, an denen fast keine Elektronen nachgewiesen wurden. An diesen Stellen ist die Elektronenintensität *größer*, wenn nur ein Spalt geöffnet ist. Das heisst, dass dort mehr Elektronen nachgewiesen werden, obwohl man die „Zugangsmöglichkeiten“ (die Zahl der Spalte) verringert hat.

Man kann den Unterschied zwischen den Intensitätsverteilungen von Elektronen und klassischen Teilchen, der sich in den Gleichungen (5.10) und (5.11) manifestiert, auch quantitativ erklären. In den nächsten Abschnitten werden wir die dazu nötigen Begriffe erarbeiten.

## 5.5 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Wellenfunktion

Auf den ersten Blick mag das Verhalten von Elektronen, Photonen und anderen Quantenobjekten recht regellos erscheinen. Rufen wir uns noch einmal das Doppelspaltexperiment mit Elektronen ins Gedächtnis: Nach Einschalten der Quelle wurden einzelne Elektronen als „Flecke“ auf dem Schirm nachgewiesen. Niemand konnte vorhersagen, wo das nächste Elektron landen wird.

Ein anderer verwirrender Punkt ist, dass sich Quantenobjekte einmal wie Wellen, ein anderes Mal wie Teilchen zu verhalten scheinen. Auch hier ist die Vorhersage nicht einfach, wann sie welches Verhalten zeigen.

Un doch erlaubt die Quantenmechanik, die Ergebnisse aller an Quantenobjekten durchgeführten Experimente korrekt vorherzusagen. Dabei wird der „naive“ Welle-Teilchen-Dualismus – die unreflektierte Nebeneinanderbenutzung beider Modelle – überwunden. Den Schlüssel dazu liefert eine Erkenntnis, die wir schon in Abschnitt 4.2 im Zusammenhang mit Photonen gewonnen haben: die Tatsache, dass die Quantenmechanik über Einzelereignisse nur **Wahrscheinlichkeitsaussagen** macht.

Ein solches Einzelereignis stellt auch die Registrierung eines Elektrons auf dem Schirm im Doppelspaltexperiment dar. Es lässt sich nicht im voraus sagen, an welchem Ort das nächste Elektron nachgewiesen werden wird. Man kann aber die *Wahrscheinlichkeit* dafür angeben. Im Fall der Photonen hatten wir gesehen, dass wir zwar nicht erraten konnten, wo das nächste Photon nachgewiesen wird. Wenn 100 Photonen hinzugefügt werden sollten, konnten wir aber mit hoher Zuverlässigkeit angeben, an welchen Stellen viele und an welchen wenige landen. Wir sind von einer Aussage über ein Einzelereignis zu einer Wahrscheinlichkeitsaussage übergegangen.

Die Intensitätsverteilung der Elektronen wurde in den Versuchen aus dem letzten Abschnitt durch eine Verteilungsfunktion  $P(x)$  charakterisiert, die angab, wie hoch die Intensität an einer bestimmten Stelle  $x$  war. Diese Verteilungsfunktion  $P(x)$  interpretiert man quantenmechanisch als eine **Wahrscheinlichkeitsdichte**.  $P(x) \cdot \Delta V$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron im Raumbereich  $\Delta V$  um den Ort  $x$  herum zu finden.  $P(x)$  hat an Stellen mit hoher Nachweiswahrscheinlichkeit einen großen Wert, an Stellen mit niedriger Wahrscheinlichkeit einen kleinen Wert. An Stellen, wo man niemals ein Elektron findet, ist  $P(x)$  Null.

**Für Quantenobjekte kann man eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(x)$  angeben, die bestimmt, mit welcher Wahrscheinlichkeit das Quantenobjekt bei einer Messung am Ort  $x$  gefunden wird.**

Eine derartige Wahrscheinlichkeitsaussage lässt sich natürlich nur überprüfen, indem man eine große Zahl von Experimenten an identisch präparierten einzelnen Elektronen macht. Genau dies wird im Dop-

pelspaltexperiment getan: Sehr viele voneinander unabhängige Elektronen durchlaufen die gleiche Versuchsanordnung und werden nachgewiesen. Eine solche Menge von sehr vielen identisch präparierten und einander nicht beeinflussenden Elektronen wurde in Abschnitt 4.2 als ein **Ensemble** bezeichnet. Der Begriff des Ensembles spielt eine zentrale Rolle, wenn es darum geht, das Verhalten von Quantenobjekten mathematisch – also quantitativ – zu charakterisieren.

Im Experiment entspricht der Wahrscheinlichkeit  $P(x) \cdot \Delta V$  die relative Häufigkeit, mit der man ein Elektron um den Ort  $x$  herum findet. An den Stellen, wo die Wahrscheinlichkeit hoch ist, werden viele Elektronen registriert. Entsprechend werden an Stellen mit niedriger Wahrscheinlichkeit weniger Elektronen gefunden.

Mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(x)$  lassen sich Elektronen und andere Quantenobjekte mathematisch beschreiben. Wenn  $P(x)$  bekannt ist, kann man z. B. die Verteilung der Elektronen auf dem Schirm vorhersagen. Das Ziel quantenmechanischer Berechnungen ist es, die Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$  in der jeweils interessierenden physikalischen Situation zu ermitteln.

Es hat sich als vorteilhaft herausgestellt, nicht mit  $P(x)$  selbst zu arbeiten, sondern mit einer Funktion  $\psi(x)$ , die man **Wellenfunktion** nennt. Man erhält  $P(x)$  aus  $\psi(x)$  durch Quadrieren:  $P(x) = |\psi(x)|^2$ .

Die Wellenfunktion ist einem *Ensemble von identisch präparierten Quantenobjekten* zugeordnet. Der zentrale Punkt, der es erlaubt, den Welle-Teilchen-Dualismus in der Quantenmechanik zu überwinden, ist nun, dass die Wellenfunktion  $\psi(x)$  sich nach den **Gesetzen der klassischen Wellenlehre** entwickelt. Das bedeutet, dass sich  $\psi(x)$  ähnlich wie eine klassische Wasser-, Schall- oder elektromagnetische Welle ausbreitet, wobei alle typischen Wellenphänomene wie Interferenz oder Beugung auftreten.

Die Interpretation von  $P(x) = |\psi(x)|^2$  als Wahrscheinlichkeitsdichte ist eines der zentralen Elemente der Quantenmechanik. Sie wurde von Max Born begründet und ist nach ihm benannt:

**Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation: Quantenobjekte werden durch eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  beschrieben. Sie breitet sich nach Wellengesetzen aus. Die Wellenfunktion bestimmt die Wahrscheinlichkeit, ein Quantenobjekt am Ort  $x$  nachzuweisen:**

$$P(x) \cdot \Delta V = |\psi(x)|^2 \cdot \Delta V. \quad (5.12)$$

Machen wir uns nun anhand des Doppelspaltexperiments klar, welche Konsequenzen die wellenmäßige Ausbreitung von  $\psi(x)$  zusammen mit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $|\psi(x)|^2$  hat. In diesem Versuch zeigte sich besonders deutlich, was wir als „Dualismus“ von Wellen- und Teilchenmodell bezeichnet hatten. Die Elektronen wurden auf dem Schirm als „Flecke“ detektiert, zeigten also beim Nachweis teilchenhaftes Verhalten. Andererseits bildete sich aus vielen dieser Flecke das Interferenzmuster heraus, das typisch für Wellenverhalten ist.

Im Licht der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation haftet diesem Ergebnis nichts Geheimnisvolles mehr an. Die Elektronen werden durch eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  beschrieben, die sich nach den klassischen Wellengesetzen ausbreitet. In Analogie zur Wellenoptik bildet sich eine Beugungsfigur. Abb. 5.9 zeigt ihren Verlauf als graue Schattierung.

Dagegen gibt  $|\psi(x)|^2 \cdot \Delta V$  die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron an einem bestimmten Ort, also teilchenhaft nachzuweisen. Beim Nachweis verhält sich ein Elektron teilchenhaft, d. h. es hinterlässt einen genau lokalisierten Fleck auf dem Schirm (schwarze Punkte in Abb. 5.9).

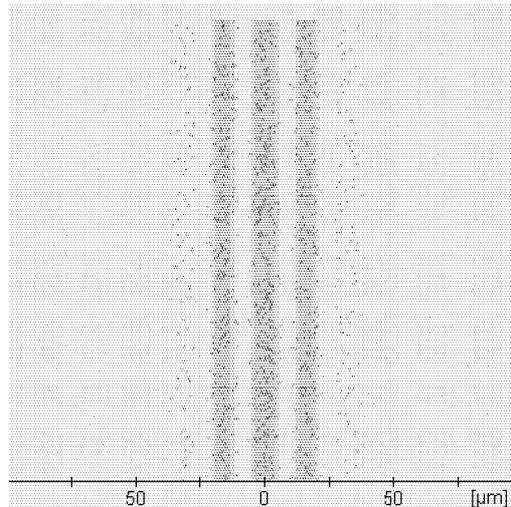


Abbildung 5.9: Wahrscheinlichkeitsverteilung (graue Schattierung) und nachgewiesene Elektronen (schwarze Punkte). Je dunkler die Schattierung, um so größer ist  $|\psi(x)|^2$ .

Damit erklärt die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation mit ihrer Verbindung von wellenhafter Ausbreitung und teilchenhaftem Nachweis das Ergebnis des Doppelspaltexperiments: Den Aufbau des Interferenzmusters aus einzelnen Flecken. Der naive Welle-Teilchen-Dualismus ist damit überwunden.

**Der naive Welle-Teilchen-Dualismus wird durch die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation aufgelöst. Das wellenhafte Verhalten der Wellenfunktion und das teilchenhafte Verhalten beim Nachweis der Quantenobjekte erfassen die beiden scheinbar gegensätzlichen Züge in einem einheitlichen Bild.**

## 5.6 Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsverteilung beim Doppelspalt-Experiment

Machen wir uns nun anhand des Doppelspaltexperiments klar, welche Konsequenzen die wellenmäßige Ausbreitung von  $\psi(x)$  zusammen mit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $|\psi(x)|^2$  hat. Betrachten wir noch einmal das Experiment 5.6, bei dem nur Spalt 1 geöffnet ist (Abb. 5.8 (b)). Man ordnet diesen Atomen eine Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  zu, die sich wie eine Wasserwelle halbkreisförmig hinter Spalt 1 ausbreitet (Abb. 5.10 (a)). Die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron auf dem Schirm an der Stelle  $x$  zu finden, ist durch  $P_1(x) = |\psi_1(x)|^2$  gegeben. Sie ist hinter Spalt 1 am größten.

Das Ensemble von Elektronen, auf das sich die Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  bezieht, besteht aus einer Menge von einzelnen Elektronen, die alle dem gleichen Präparationsverfahren unterzogen wurden, indem sie Spalt 1 durchquert haben. Jedes dieser Elektron wird an einem anderen Ort auf dem Schirm nachgewiesen, wobei es einen teilchenhaften Fleck hinterlässt. Die Verteilung, die sich auf dem Schirm nach dem Nachweis von sehr vielen Elektronen ergibt, ist ein Abbild der Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P_1(x)$ .

Wie in Experiment 5.6 kann man nun Spalt 1 verschließen und dafür Spalt 2 öffnen. Die Wellenfunktion  $\psi_2(x)$  ist dann eine Welle, die von Spalt 2 ausgeht. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion ist durch

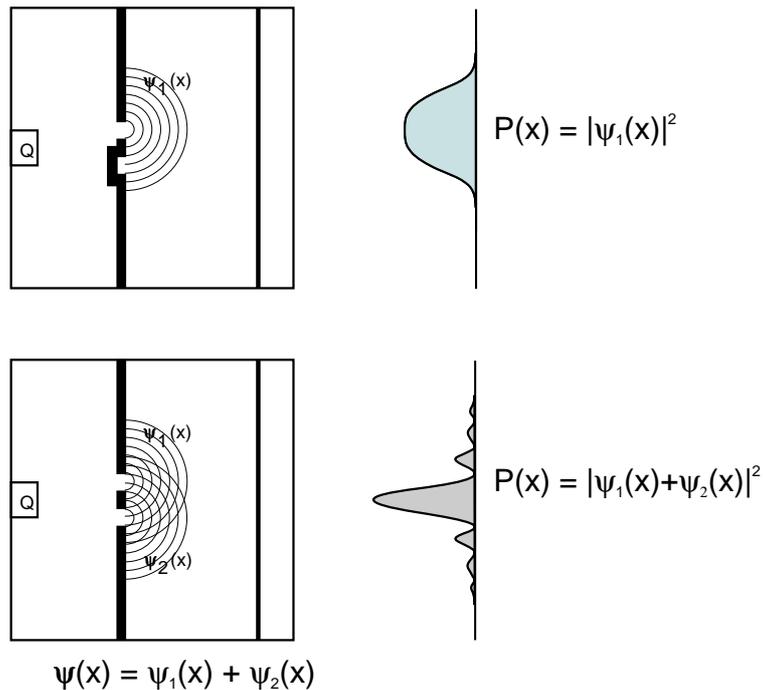


Abbildung 5.10: Wellenfunktion beim Doppelspalt-Experiment

$P_2(x) = |\psi_2(x)|^2$  gegeben. Nimmt man die beiden Verteilungen der getrennt durchgeführten Experimente zusammen, erhält man die Gesamtverteilung

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x), \quad (5.13)$$

wie in Gleichung (5.10).

Anders sieht die Situation aus, wenn im Doppelspaltexperiment beide Spalte geöffnet sind. Jetzt geht von beiden Spalten eine Welle aus: von Spalt 1 die Wellenfunktion  $\psi_1(x)$ , von Spalt 2 die Wellenfunktion  $\psi_2(x)$  (Abb. 5.10 (b)). Nach der klassischen Wellentheorie *überlagern* sich die beiden Wellen, wie man es z. B. auf der Oberfläche eines Sees beobachten kann, wenn man zwei Steine nicht allzuweit entfernt voneinander ins Wasser wirft. Mathematisch wird dies durch die Addition beider Wellenfunktionen zum Ausdruck gebracht:

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x). \quad (5.14)$$

Man sagt, dass die Elektronen, die durch eine solche Wellenfunktion beschrieben werden, sich in einem **Überlagerungszustand** aus  $\psi_1(x)$  und  $\psi_2(x)$  befinden.

Nun kommt der entscheidende Punkt: Die Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$  erhält man aus der Wellenfunktion (5.14) durch Quadrieren:  $P(x) = |\psi(x)|^2$ . Setzt man die Wellenfunktion (5.14) ein, ergibt sich der folgende Ausdruck<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} P(x) &= |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\ &= |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2\psi_1(x)\psi_2(x). \end{aligned} \quad (5.15)$$

In der Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$  tritt zu den beiden Einzelspalt-Verteilungsfunktionen  $|\psi_1(x)|^2 = P_1(x)$  und  $|\psi_2(x)|^2 = P_2(x)$  noch ein *zusätzlicher Term* hinzu, den man *Interferenzterm*

<sup>3</sup>Hier wird angenommen, dass die Wellenfunktion reell ist. Hat man komplexe Zahlen eingeführt, lautet der Ausdruck:  $P(x) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x)\psi_2^*(x) + \psi_1^*(x)\psi_2(x)$ .

nennt. Er ergibt sich beim Ausmultiplizieren, weil die Wellenfunktion aus einer *Summe* zweier Terme besteht. Er ist deshalb charakteristisch für einen Überlagerungszustand wie (5.14).

Man kann die letzte Gleichung auch folgendermaßen schreiben

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) + 2\psi_1(x)\psi_2. \quad (5.16)$$

Man kann so *erklären*, warum man beim Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten eine Verteilung der Elektronen findet, für die gilt (vgl. refoq62):

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x), \quad (5.17)$$

für die man also nicht einfach die beiden Einzelspaltverteilungen  $P_1(x)$  und  $P_2(x)$  addieren kann. Der Vergleich mit (5.16) macht es deutlich: Der Interferenzterm, der sich beim Ausmultiplizieren ergeben hat, ist dafür verantwortlich, dass in (5.17) kein Gleichheitszeichen steht.

Die Wahrscheinlichkeitsfunktion (5.15) beschreibt das beim Doppelspaltexperiment beobachtete Interferenzmuster (Abb. 5.3 und 6.4 (b)). Da wir die explizite mathematische Form der Wellenfunktion an dieser Stelle noch nicht kennen, können wir zwar noch nicht bestätigen, dass die genaue Form der Verteilung tatsächlich korrekt wiedergegeben wird. Wir können aber an der *Struktur* der Gleichung und ihrer Interpretation ablesen, dass das Problem des naiven Welle-Teilchen-Dualismus, dass das Verständnis der Quantenphänomene so erschwert, überwunden ist.

Um dies noch einmal zu verdeutlichen, vollziehen wir noch einmal im Detail den Ablauf des Doppelspaltexperiments nach: Das Ensemble von sehr vielen Elektronen, die die Versuchsanordnung einzeln durchlaufen, wird durch die Wellenfunktion  $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$  beschrieben. Durch Quadrieren der Wellenfunktion erhält man die Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$ , die die für einen Überlagerungszustand charakteristischen Interferenzterme enthält. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion wiederum bestimmt die Wahrscheinlichkeit für jedes einzelne Elektron, an einer bestimmten Stelle auf dem Schirm gefunden zu werden. Dabei wird es als *Teilchen* nachgewiesen. Sehr viele Elektronen, die auf dem Schirm nachgewiesen werden, hinterlassen dort eine Verteilung auf dem Schirm, die die *Wellenstruktur* der Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$  widerspiegelt.

## Kapitel 6

# Eigenschaften von Elektronen und der quantenmechanische Messprozess

### 6.1 Die Eigenschaft „Ort“ im Doppelspaltexperiment

In Abschnitt 3.4 wurde gezeigt, dass man einem Photon im Interferometer die Eigenschaft „Weg“ nicht zuschreiben kann. Versuchte man festzulegen, auf welchem der beiden Wege das Photon gegangen war, zeigten sich keine Interferenzstreifen mehr. Ein analoges Experiment kann man für Elektronen am Doppelspalt durchführen. Dabei wird die Eigenschaft „Ort in der Spaltebene“ untersucht, d. h. die Frage, ob man einem ein Elektron einen der beiden Spalte zuordnen kann, durch den es gegangen ist.

Für klassische Teilchen, z. B. für Farbtröpfchen, würde man das Doppelspaltexperiment folgendermaßen beschreiben: Etwa die Hälfte der Farbtröpfchen geht durch Spalt 1, die restlichen durch Spalt 2. Aufgrund der mangelnden experimentellen Auflösung lässt sich allerdings nicht angeben, durch welchen der beiden Spalte ein bestimmtes Farbtröpfchen gegangen ist. Das Farbtröpfchen ist also durch genau einen der beiden Spalte gegangen, wir wissen nur nicht, durch welchen.

Diese Darstellung trifft zwar für klassische Teilchen zu. Nach der Quantenmechanik ist sie für Elektronen aber *falsch*. Man kann einem Elektron keinen Spalt zuordnen, durch den es „in Wirklichkeit“ gegangen ist. Das Verhalten von Quantenobjekten weicht so radikal von den gewohnten klassischen Vorstellungen ab, dass selbst ein scheinbar so harmloses Bild wie das obige mit ihr in Konflikt gerät. Das kann man mit der folgenden Überlegung einsehen:

Nehmen wir an, in Wirklichkeit sei jedes der Elektronen sei durch einen bestimmten Spalt gegangen, den wir aber nicht kennen. Wenn diese Annahme stimmt, müsste das auf dem Schirm nachgewiesene Muster unverändert bleiben, wenn man die Elektronen „umsortiert“. Dazu lässt man zuerst alle diejenigen Elektronen den Doppelspalt passieren, die durch Spalt 1 gehen und erst danach die durch Spalt 2 gehenden.

Das Experiment, mit dem dieses „Umsortieren“ erreicht wird, haben wir als Experiment 5.6 schon durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 6.1 noch einmal dargestellt. Zuerst deckt man Spalt 2 ab, damit alle dort ankommenden Elektronen absorbiert werden und nur die bei Spalt 1 eintreffenden durchgelassen werden. Auf dem Schirm ergibt sich die in in (Abb. 6.1 (a)) gezeigte Verteilung, die mit  $P_1(x)$  bezeichnet wird.

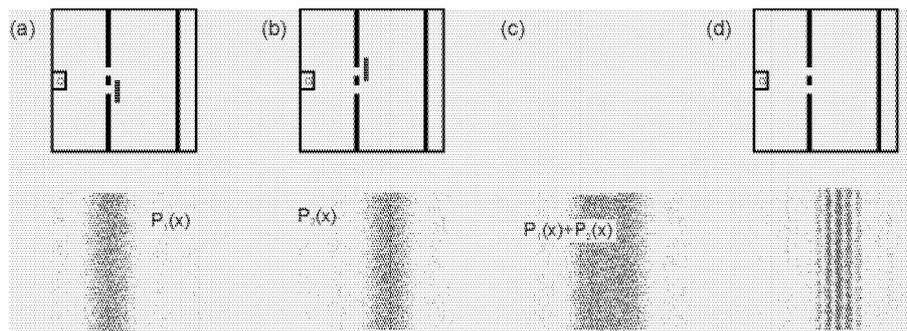


Abbildung 6.1: Ortseigenschaft im Doppelspaltexperiment

Nun wird Spalt 1 abgedeckt, damit umgekehrt nur Elektronen durchgelassen werden, die durch Spalt 2 gegangen sind. Diese Elektronen führen auf dem Schirm zur Verteilung  $P_2(x)$  (Abb. 6.1 (b)). Beide Verteilungen zusammen ergeben

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x). \quad (6.1)$$

Die Verteilung  $P(x)$  ist in Abb. 6.1 (c) gezeigt. Sie entspricht gerade *nicht* der beim ursprünglichen Doppelspalt-Versuch gefundenen Verteilung, die zum Vergleich noch einmal in Abb. 6.1 (d) dargestellt ist.

Was bedeutet dieses Versuchsergebnis? Zu  $P(x)$  tragen alle Elektronen bei, die durch Spalt 1 gehen und alle, die durch Spalt 2 gehen. Andere Möglichkeiten scheint es nicht zu geben. Und doch zeigt der Vergleich von Abb. 6.1 (c) und (d), dass die Annahme, dass jedes Elektron durch einen ganz bestimmten Spalt geht, das charakteristische Doppelspalt-Interferenzmuster nicht erklären kann.

Unsere Ausgangsannahme bei diesem Experiment war, dass jedes Elektron durch einen bestimmten, aber unbekanntem Spalt gegangen sei. In Anbetracht dieses Versuchsergebnisses scheint sie nicht mehr haltbar zu sein. Im Doppelspalt-Experiment ist es nicht möglich, die Elektronen in solche einzuteilen, die durch Spalt 1 gehen und in solche, die durch Spalt 2 gehen. Die klassische Vorstellung von Elektronen als lokalisierten Gebilden stößt hier an ihre Grenzen. Dies wird noch erstaunlicher, wenn man bedenkt, dass im analogen Experiment mit Atomen (Abschnitt 5.2) der Spaltabstand etwa 150 000 mal größer ist als der „typische Atomdurchmesser“.

Da die Zuordnung der Elektronen zu einem bestimmten Spalt nicht möglich ist, kann man auch nicht sagen, dass ein bestimmtes Elektron durch einen bestimmten Spalt gegangen ist. In der Quantenmechanik ist es *falsch* zu behaupten, das Elektron habe in der Spaltebene einen bestimmten Ort, den wir nur nicht kennen. Die Eigenschaft „Ort“ kann einem Elektron unter diesen Umständen nicht zugeschrieben werden. Dies ist ein grundlegender Zug der Quantenmechanik, der auch für andere Quantenobjekte (z. B. Atome) und andere Eigenschaften (z. B. Energie, Impuls) gilt:

**In der Quantenmechanik ist es möglich, dass einem Quantenobjekt klassisch wohldefinierte Eigenschaften *nicht* zugeschrieben werden können. Zum Beispiel besitzt ein Elektron im Doppelspaltexperiment die Eigenschaft „Ort“ nicht.**

## 6.2 Messprozess und Komplementarität

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, daß man beim Doppelspaltversuch einem Elektron in der Spaltebene die Eigenschaft „Ort“ nicht zuschreiben kann. Ein naheliegender Einwand darauf ist, daß man den Ort der Elektronen in der Spaltebene doch *messen* kann.

**Experiment 6.1 (Computersimulation):** Im Simulationsprogramm sehen Sie zwischen Blende und Schirm eine Lampe, die wir bisher noch nicht benutzt haben (Abb 6.2). Schalten Sie sie nun ein. Schalten Sie auch die Quelle ein, damit Elektronen emittiert werden. Sie werden Lichtblitze hinter den Spalten erkennen. Die Elektronen streuen das Licht der Lampe. Der dadurch erzeugte Lichtblitz kann registriert werden. Man führt mit der Lichtquelle eine **Ortsmessung** durch.

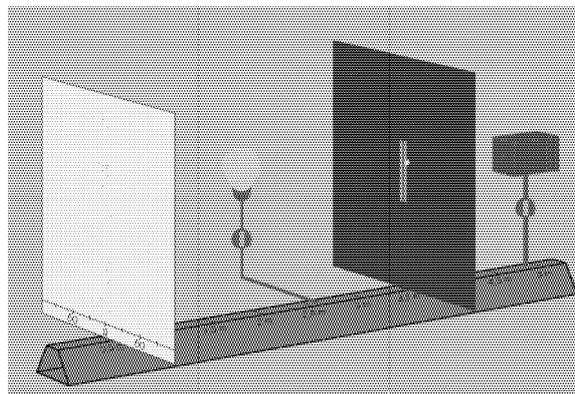


Abbildung 6.2: Ortsmessung der Elektronen mit Laserlicht

Für jedes einzelne Elektron sieht man einen Lichtblitz an einer ganz bestimmten Stelle. Das bedeutet, daß man jedes Elektron bei der Ortsmessung an einem wohldefinierten Ort findet, und zwar mit hoher Wahrscheinlichkeit hinter einem der beiden Spalte. Hinter welchem Spalt man ein bestimmtes Elektron findet, läßt sich im voraus nicht sagen.

Hat man damit die Quantenmechanik „überlistet“ und jedem Elektron doch noch einen Spalt zugeordnet, durch den es gegangen ist? Nein, denn wenn sie etwas länger warten (oder die Taste „Speed“ drücken), werden Sie feststellen, daß bei dem so durchgeführten Versuch *kein Interferenzmuster* auftritt. Stattdessen findet man wieder die Summe der beiden Einzelspalt-Verteilungen  $P_1(x) + P_2(x)$ . Das bedeutet:

**Ortseigenschaft und Interferenzmuster sind nicht gleichzeitig realisierbar, sondern schließen sich gegenseitig aus. Dies ist ein Spezialfall eines allgemeinen Prinzips, das man nach Niels Bohr *Komplementarität* nennt.**

Das Konzept der Komplementarität war für Bohr ein ganz zentraler Begriff der Quantenmechanik. Versuchsanordnungen, in denen sich die Interferenz von Quantenobjekten zeigt sind komplementär zu solchen, in denen die Quantenobjekte „teilchenhaft“, also mit einem bestimmten Ort, auftreten. Komplementäre Versuchsanordnungen sind nicht zugleich realisierbar. Sie geben nur gemeinsam Aufschluss über die Realität. Die Wirklichkeit ist nicht in einem einzigen anschaulichen Bild erfassbar.

Mit einem weiteren Experiment kann man die Komplementarität von Ortseigenschaft und Interferenzmuster noch deutlicher illustrieren:

**Experiment 6.2 (Computersimulation):** Klicken Sie auf den Schirm und wählen Sie „theoretische Verteilung“. Nun wird die Verteilung auf dem Schirm dargestellt, ohne dass wir jedesmal warten müssten, bis sich das Schirmbild aufgebaut hat. Klicken Sie jetzt auf die Lampe. Ein Fenster erscheint, in dem Sie die Intensität der Lampe verändern können. Wenn Sie die Intensität langsam von 100 % auf 0% verändern, können Sie beobachten, wie die strukturlose Verteilung nach und nach in das Interferenzmuster übergeht.

Eine schwächere Intensität der Lampe bedeutet, dass nicht mehr alle Elektronen nachgewiesen werden. Die nicht nachgewiesenen tragen zum Interferenzmuster bei. Im Gegensatz dazu kann man den nachgewiesenen Atomen die Eigenschaft „Ort“ zuschreiben. Sie tragen zur strukturlosen Verteilung bei. Mit dem Intensitätsregler der Lampe kann man den Übergang zwischen den komplementären Größen „Ortseigenschaft“ und „Interferenzmuster“ erforschen.

Noch ein anderer charakteristischer Zug der quantenmechanischen Messung läßt sich an dem Experiment ablesen: Schon die Veränderung eines kleinen Teils der Versuchsanordnung (hier das Einschalten der Lichtquelle) reicht unter Umständen aus, um das Versuchsergebnis qualitativ zu verändern (Auftreten des Interferenzmusters oder nicht). Auch dies war für Bohr ein wichtiges Merkmal der Quantenmechanik, das er als die **Ganzheitlichkeit der Quantenphänomene** bezeichnet hat.

**Das Ergebnis von Experimenten hängt in der Quantenmechanik empfindlich von der Versuchsanordnung ab.**

### 6.3 Messungen und Eigenschaften

Die gerade diskutierte Ortsmessung ist nur ein Beispiel für einen quantenmechanischen **Meßprozeß**. An ihr kann man die Besonderheiten illustrieren, die in der Quantenphysik mit dem Begriff der Messung verbunden sind. In der klassischen Physik bedeutet die Messung einer Größe einfach die Zurkenntnisnahme ihres vorher bereits wohldefinierten Wertes. Führt man eine Ortsmessung an einem klassischen Gegenstand (z. B. einem Stein oder Ball) durch, wird z. B. durch Anlegen eines Maßstabes festgestellt, wo sich der Gegenstand im Augenblick der Messung befindet. Das ist so einfach, daß man sich üblicherweise keine Rechenschaft darüber ablegt.

Mit unserem bisherigen Wissen über die Eigenschaften von Quantenobjekten können wir schon absehen, daß die Verhältnisse bei einer quantenphysikalischen Messung nicht mehr so unkompliziert sein werden. Wir haben bereits gesehen, daß ein Elektron in der Spaltebene die Eigenschaft „Ort“ gar nicht besitzt. Eine Ortsmessung kann daher nicht einfach darin bestehen, daß man rein passiv die bereits feststehende Ortskoordinate zur Kenntnis nimmt. A priori ist keineswegs klar, was es bedeutet, an einem Quantenobjekt eine Größe (wie den Ort) zu messen, wenn diese Größe dem betrachteten Objekt gar nicht zukommt. Die Frage ist: Wie reagieren Meßgeräte (deren Anzeige das Ergebnis ja bestimmt), wenn sie mit einem solchen Quantenobjekt in Kontakt gebracht werden? Wie unter diesen Umständen das Ergebnis einer Messung überhaupt aussehen kann, muß letzten Endes empirisch geklärt werden.

In den vorangegangenen Kapiteln wurden schon häufig Messungen an Quantenobjekten diskutiert, ohne daß dieser Sachverhalt bisher zum Problem geworden wäre. In allen Experimenten wurde ein eindeutiger Wert der gemessenen Größe gefunden. Auch im obigen Gedankenexperiment leuchtete bei der Ortsmessung hinter dem Doppelspalt nur an einer *einzig*en Stelle ein Lichtblitz auf. Jedes Elektron wird also bei der Messung hinter einem der Spalte gefunden (obwohl es falsch wäre, zu sagen, daß es schon vorher die Eigenschaft „befindet sich hinter einem der Spalte“ besessen hat).

Von den möglichen Meßwerten (Spalt 1 oder Spalt 2) ist bei der Messung also genau *einer* ausgewählt worden. Führt man das gleiche Experiment mehrere Male hintereinander aus, wird man im allgemeinen verschiedene Ergebnisse erhalten. Im vorliegenden Beispiel wird man ein Elektron im Mittel genauso häufig hinter Spalt 1 wie hinter Spalt 2 finden.

**Bei jeder Messung an einem Quantenobjekt wird aus dem Spektrum der möglichen Messwerte (hier Spalt 1 oder Spalt 2) ein einzelner realisiert. Die Wahrscheinlichkeit, mit der ein bestimmter Messwert gefunden wird, lässt sich aus der Wellenfunktion mit der Bornschen Wahrscheinlichkeitsformel (5.12) ermitteln.**

Vor der Registrierung durch einen Detektor (z. B. die Lampe) kann man dem Elektron keine Ortseigenschaft zuschreiben. Es gibt keine „Bahn“ (also eine Abfolge von Orten), auf der sich das Elektron von der Quelle zum Schirm bewegt, sondern nur eine quantenmechanische Wellenfunktion, die sich nach Wellengesetzen ausbreitet. Erst im Messprozess wird eine der beiden Möglichkeiten realisiert (das Elektron wird entweder hinter Spalt 1 oder hinter Spalt 2 gefunden).

Dies illustriert noch einmal sehr deutlich, daß in der Quantenmechanik ein wesentlicher Unterschied darin besteht, ob ein Quantenobjekt eine Eigenschaft *besitzt* oder ob man an ihm eine Eigenschaft *mißt*. Wie wir gesehen haben, muß ein Quantenobjekt eine bestimmte Eigenschaft (wie den Ort) keineswegs besitzen. Führt man eine Messung durch findet man dagegen immer einen Meßwert. Aus der Tatsache, daß sich bei einer Messung des Ortes ein bestimmter Wert ergeben hat, darf man also keineswegs schließen, daß das Quantenobjekt diese Eigenschaft vorher aufgewiesen hat.

**In der Quantenmechanik besteht ein Unterschied zwischen „eine Eigenschaft haben“ und „eine Eigenschaft messen“.**  
**Zum Beispiel sind die beiden folgenden Aussagen *nicht* gleichbedeutend:**  
**a) Bei einer Messung findet man das Elektron am Ort  $x$ .**  
**b) Ein Elektron besitzt die Eigenschaft „Ort  $x$ “.**

Hier liegt der Grund, warum es in der Quantenmechanik vorteilhaft ist, mit Ensembles von Quantenobjekten zu arbeiten statt mit den Einzelobjekten selbst. Betrachten wir die folgende Situation: Man führt an einem einzelnen Elektron in der Spaltebene eine Ortsmessung durch und erhält das Ergebnis „Spalt 1“. Nach dem oben Gesagten kann man sich nicht sicher sein, ob das Elektron die Eigenschaft „Ort“ wirklich besessen hat oder ob dieser Wert sich nur als Ergebnis der Messung eingestellt hat. Für eine einzelne Messung an einem einzelnen Quantenobjekt gibt es in der Quantenmechanik keine Methode, zwischen diesen beiden Alternativen zu entscheiden.

Ein Ausweg bietet sich, wenn man Ortsmessungen an einem ganzen *Ensemble* von identisch präparierten Quantenobjekten durchführt. Hier gibt es zwei Möglichkeiten

1. Die gemessenen Werte streuen, d. h. bei manchen Messungen findet man das Elektron hinter Spalt 1, bei anderen hinter Spalt 2. Dann besitzt das Ensemble hinter den Spalten *nicht* die Eigenschaft „Ort“.
2. Alle Messungen liefern denselben Ort (innerhalb eines gewissen Intervalls), z. B. „Spalt 1“. Dann besitzt das Ensemble die Eigenschaft „Ort“. In diesem (und nur in diesem) Fall kann man auch von jedem einzelnen Mitglied des Ensembles sagen, dass es die betreffende Eigenschaft besitzt.

Dynamische Eigenschaften von Quantenobjekten beziehen sich also (ebenso wie der Begriff der Präparation) immer auf ein ganzes Ensemble. Der Grund dafür ist, dass es in der Quantenmechanik einen Unterschied zwischen „eine Eigenschaft haben“ und „eine Eigenschaft messen“ gibt.

## 6.4 Zustandsreduktion

Jede physikalische Messung ist ein Vorgang, bei dem physikalische Meßinstrumente mit dem zu beobachtenden Objekt in Wechselwirkung treten. Wenn es keinen Einfluss vom gemessenen Objekt auf das Messgerät gäbe, könnte man am Messgerät auch keine Information über das Objekt ablesen.

Umgekehrt beeinflusst im allgemeinen auch jede Messung die am Objekt zu messende Größe. Will man z. B. die Temperatur in einem Wassergefäß messen, taucht man ein Thermometer in das Wasser ein. Durch das Eintauchen des Thermometers wird die Temperatur des Wassers aber verändert, so daß eine exakte Temperaturmessung nicht ohne weiteres möglich ist. In der klassischen Physik wird diese Rückwirkung entweder als vernachlässigbar angesehen (z. B. der Strahlungsdruck beim Durchlaufen einer Lichtschranke) oder es existiert eine Korrekturtheorie, die es erlaubt, die Wirkung des Meßgerätes zu berücksichtigen (der Einfluß des Thermometers kann berechnet werden, wenn seine Wärmekapazität bekannt ist).

In der Quantenphysik hat eine Messung keinen solch passiven Charakter mehr. Messungen stellen einen nicht zu vernachlässigenden Eingriff in den ungestörten Ablauf des Geschehens dar; sie verändern den Zustand des gemessenen Objekts. Ein Beispiel dafür haben wir schon kennengelernt: das im vorletzten Abschnitt behandelte Doppelspalt-Experiment mit Lichtquelle. Mit ausgeschalteter Lampe ergab sich auf dem Schirm das Interferenzmuster. Führt man dagegen eine Ortsmessung an den Elektronen durch, indem man die Lampe einschaltete, ergab sich kein Interferenzmuster.

Die Elektronen befinden sich nach der Messung also in einem anderen Zustand, in dem sie kein Interferenzmuster auf dem Schirm ausbilden. Die Messung hat also ihren Zustand verändert. Dies ist ein allgemeiner Zug von Messungen in der Quantenmechanik:

**Anders als in der klassischen Physik verändert eine quantenmechanische Messung den Zustand des Systems, an dem die Messung vorgenommen wird.**

Handelt es sich einfach um eine *Störung* der Elektronen durch die Lampe? Werden die Elektronen von den Photonen der Lampe ein wenig „geschubst“, so dass sie anschließend an einer anderen Stelle auf dem Schirm landen? Dies ist nicht die eigentliche Ursache für die Veränderung des Elektronenzustands, die eine Messung mit sich bringt. Man hätte das Experiment nämlich ebensogut durchführen können, indem man nur einen der beiden Spalte beleuchtet hätte. Hinter dem unbeleuchteten Spalt hätten die Elektronen dann gar keine Möglichkeit gehabt, mit Photonen zu wechselwirken. Trotzdem hätte man das gleiche Ergebnis erhalten: kein Interferenzmuster.

Es ist ein grundlegendes Phänomen, das der Zustandsveränderung bei einer Messung zugrundeliegt. Mit Hilfe der Wellenfunktion lässt es sich auch quantitativ diskutieren. In unserem Beispiel ist die Wellenfunktion des ungestörten Systems (also ohne Lampe)  $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$  (vgl. Gleichung (5.14)). Es handelt sich um einen Überlagerungszustand aus den beiden Wellenfunktionen  $\psi_1(x)$  und  $\psi_2(x)$  (Abb. 6.3 (a)). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Elektronen auf dem Schirm, ergibt sich – wie schon oben diskutiert – aus  $|\psi(x)|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2$ . Man erhält das Interferenzmuster (Gleichung (5.15)). Die Wellenfunktion  $\psi(x)$ , die das durch den Doppelspalt präparierte Ensemble von Elektronen beschreibt, enthält die beiden möglichen Messwerte (Spalt 1 oder Spalt 2) gleichermaßen.

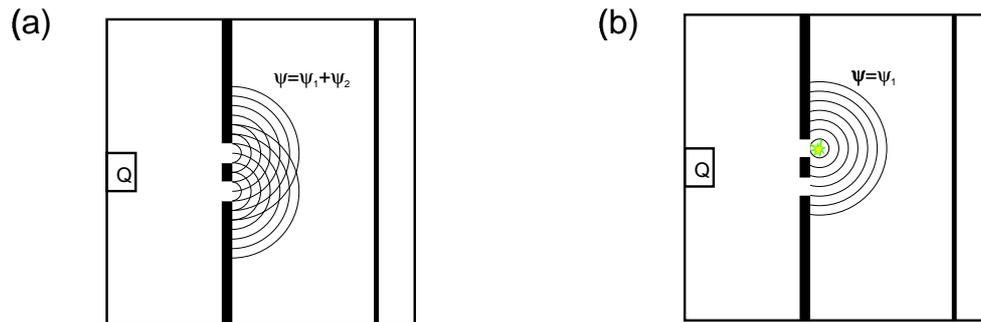


Abbildung 6.3: (a) Die Wellenfunktion der Elektronen bei ausgeschalteter Lampe ist ein Überlagerungszustand aus  $\psi_1(x)$  und  $\psi_2(x)$ . (b) Nach einer Ortsmessung (Lichtblitz), bei der das gemessene Atom hinter Spalt 1 gefunden wurde, wird es durch die Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  beschrieben (Zustandsreduktion).

Durch die Messung wird eine der beiden Möglichkeiten ausgewählt. Nach der Messung ist nur noch sie in der Wellenfunktion vertreten. Die Elektronen, die man hinter Spalt 1 findet, werden durch die Einzelspalt-Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  beschrieben (Abb. 6.3 (b)). Ihr Beitrag zur Elektronenverteilung auf dem Schirm entspricht daher gerade der Einzelspalt-Verteilung  $|\psi_1(x)|^2$ . Umgekehrt werden die hinter Spalt 2 gefundenen Elektronen durch  $\psi_2(x)$  beschrieben, mit der zugehörigen Verteilung  $|\psi_2(x)|^2$ . Das Muster, das sich schließlich auf dem Schirm herausbildet ist die Summe  $P(x) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$  der beiden Einzelspaltverteilungen; es ist durch die Abwesenheit der Interferenzstruktur gekennzeichnet.

Die Tatsache, man bei diesem Versuch kein Interferenzmuster erhält, wird also dadurch erklärt, daß die Elektronen nach der Messung durch eine *andere* Wellenfunktion beschrieben werden. Den Übergang von  $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$  zu einer der beiden Möglichkeiten  $\psi_1(x)$  oder  $\psi_2(x)$  nennt man **Zustandsreduktion** oder „**Kollaps**“ der Wellenfunktion. Sie stellt eine abrupte Änderung der Wellenfunktion dar, die charakteristisch für eine Messung ist. Mit Heisenberg könnte man die Zustandsreduktion den „Übergang vom Möglichen zum Faktischen“ nennen.

Nur am Rande sei bemerkt, dass das Doppelspalt-Experiment noch ein anderes Beispiel für eine quantenmechanische Messung enthält: die Registrierung der Quantenobjekte auf dem Schirm. Wie wir oben gesehen haben, produziert ein einzelnes Elektron nur einen kleinen, nahezu punktförmigen „Fleck“ auf dem Schirm, obwohl sich die Wellenfunktion über einen wesentlich größeren Ortsbereich erstreckt. Der Nachweis auf dem Schirm stellt eine Ortsmessung dar, bei der nur eine der Möglichkeiten realisiert wird; d. h. nur an einem der möglichen Orte findet man einen Fleck. Die Zustandsreduktion besteht darin, daß das Elektron nur an einer ganz bestimmten Stelle die physikalischen und chemischen Reaktionen auslöst, die zu seinem Nachweis führen.

## 6.5 Schrödingers Katze, Messprozess und Dekohärenz

Bei den Phänomenen der Alltagswelt nimmt man nichts von dem merkwürdigen Quantenverhalten wahr, wie es z. B. Elektronen im Doppelspaltexperiment zeigen. Es stellt sich die Frage, ob man mit der Quantenmechanik erklären kann, wie die Welt ihre „klassische“ Erscheinungsform annimmt, wenn man von mikroskopischen zu makroskopischen Systemen übergeht. Besitzt die Quantenmechanik einen **klassischen Grenzfall**, in dem sie die Aussagen der klassischen Mechanik reproduziert?

Elektronen in einer Elektronenstrahlröhre kann man z. B. durch ein sogenanntes „Wellenpaket“ beschreiben, d. h. durch eine Wellenfunktion mit begrenzter Ausdehnung, die sich wie ein Wellenpuls ausbreitet (Abb. 6.4). Schon früh wurde erkannt, dass der „Schwerpunkt“ eines Wellenpakets sich nach den Newtonschen Gesetzen bewegt, wenn das Wellenpaket nicht zu ausgedehnt ist, d. h. wenn die Ausdehnung des Wellenpakets klein ist gegenüber den Abständen, für die sich das Potential ändert. Ein solches Wellenpaket bewegt sich dann ähnlich wie ein Teilchen der Masse  $m$  in dem entsprechenden Potential.

Schrödinger erkannte jedoch, dass das eigentliche Problem beim klassischen Grenzfall in den **Überlagerungszuständen** liegt. Er legte das anhand eines besonders drastischen Beispiels dar, das unter dem Namen „Schrödingers Katze“ Berühmtheit erlangte: In einem Kasten, in dem sich eine Vorrichtung zur Freisetzung eines Giftgases befindet, ist eine Katze eingesperrt (Abb. 6.5). Ein Zufallsereignis (radioaktiver Zerfall eines Atoms) bestimmt, ob das Gas freigesetzt wird oder nicht. Die Apparatur soll gerade soviel radioaktive Substanz enthalten, um in einer Stunde mit 50% Wahrscheinlichkeit einen Zerfall herbeizuführen, der nach Auslösung des Mechanismus die Katze vergiftet.

Die Wellenfunktion des Gesamtsystems (Kasten + Katze) hat nach dieser Zeit die Form eines *Überlagerungszustands zweier makroskopisch verschiedener Zustände*. Sie enthält die beiden Möglichkeiten „Katze tot“ und „Katze lebt“ in gleichem Maße:

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x), \quad (6.2)$$

wobei  $\psi_1(x)$  den Zustand (Atom zerfallen + Katze tot) und  $\psi_2(x)$  den Zustand (Atom nicht zerfallen + Katze lebt) bezeichnet. Die Wellenfunktion 6.2 hat die gleiche Gestalt wie die eines Atoms beim Doppelspaltexperiment (Gleichung (5.14)). Dort zeigte sich, dass man dem Atom keinen Spalt zuordnen konnte, durch den es gegangen war. Es besaß die Eigenschaft „Ort“ nicht. Überträgt man diese Erkenntnis auf den Fall der Katze, kommt man zu dem Schluss, dass die Katze in dem Überlagerungszustand Schrödingers die Eigenschaften „tot“ oder „lebendig“ *nicht* besitzt.

Es ist wichtig zu betonen: Wie beim Atom hinter dem Doppelspalt handelt es sich bei 6.2 nicht um einen Zustand, in dem man nicht *weiß*, ob die Katze tot oder lebendig ist, sondern sie besitzt tatsächlich diese Eigenschaften nicht. Ähnlich wie beim Doppelspaltexperiment kann es beim Überlagerungszustand 6.2 zu Interferenzerscheinungen zwischen toter und lebendiger Katze kommen. Nun ist es eine evidenten Erfahrungstatsache, dass in der Wirklichkeit solche Phänomene nicht vorkommen. Schrödinger ist es also mit diesem Beispiel gelungen, nachdrücklich deutlich zu machen, dass der Übergang von der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik nicht ohne Schwierigkeiten zu bewältigen ist.

Schrödingers Katzenparadoxon weist eine enge Verbindung zur Frage auf, wie eine **quantenmechanische Messung** zu beschreiben sei: Anstelle der Katze kann man sich ein Messgerät denken, das den Zerfall eines Atoms in der radioaktiven Substanz durch das Aufleuchten einer Lampe anzeigen soll. Wie im Fall der Katze schließt man, dass sich das Messgerät nach Ablauf einer Stunde in einem Überlagerungszustand befindet, in dem die Lampe keine der Eigenschaften „leuchtet“ oder „leuchtet nicht“

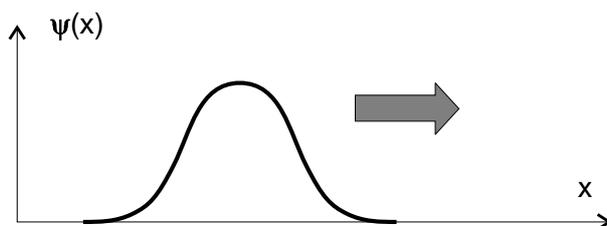


Abbildung 6.4: Wellenfunktion eines Wellenpakets

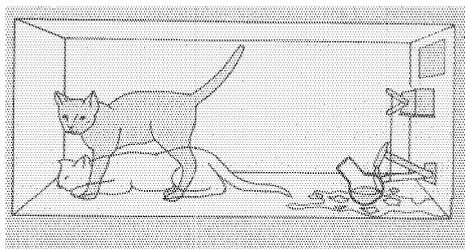


Abbildung 6.5: Schrödingers Katze

besitzt. Die Quantenmechanik sagt also voraus, dass sich nach einer Messung das Messgerät in einem Zustand befindet, in dem es keinen eindeutigen Wert anzeigt. Dies steht im Widerspruch zu allen Erfahrungen mit Messgeräten.

Dieses Problem, das **quantenmechanische Messproblem**, beschäftigt die Physiker seit mehreren Jahrzehnten. Eine endgültige Lösung hat es bislang noch nicht gefunden. Um Übereinstimmung mit dem beobachteten Verhalten von Messgeräten zu erhalten, wurde „von Hand“ der abrupte Prozess der Zustandsreduktion (s. o.) eingeführt: Bei einer Messung wird die Wellenfunktion nach Zufallsgesetzen aus dem Überlagerungszustand auf eine der Möglichkeiten („Lampe leuchtet“, „Lampe leuchtet nicht“) „reduziert“. Eine Erklärung der Zustandsreduktion, die es erlaubt, sie aus den Grundgesetzen der Quantenmechanik zu verstehen, steht jedoch noch aus.

In den letzten Jahren zeichnet sich ein wissenschaftlicher Konsens ab, wie man dem Verständnis des Schrödingerschen Katzenproblems (und damit auch dem des quantenmechanischen Messprozesses) näher kommen könnte: über die Theorie der **Dekohärenz**. Die zentrale Idee dabei ist, dass man makroskopische Körper (wie die Katze) nicht isoliert betrachten kann. Sie müssen als mit der Außenwelt wechselwirkende **offene Systeme** aufgefasst werden. Sie besitzen immer eine **natürliche Umgebung**, mit der sie auf vielfältige Weise wechselwirken. Die Katze z. B. streut Licht, gibt Wärmestrahlung ab und beeinflusst die Luftmoleküle in der Umgebung.

Schon beim Doppelspaltexperiment konnte man sehen, dass kein Interferenzmuster auftrat, wenn man jedes Atom hinter einem der beiden Spalte durch Lichtstreuung nachwies (vgl. Abschnitt 6.2). Dieser Verlust der Interferenzfähigkeit ist unabhängig davon, ob das gestreute Photon von einem Beobachter registriert wurde oder nicht.

Ebenso zerstört die Lichtstreuung (und auch jede andere Wechselwirkung mit der Umgebung) das Kennzeichen des Überlagerungszustands 6.2: die Interferenzfähigkeit zwischen  $\psi_1(x)$  und  $\psi_2(x)$  (also zwischen toter und lebendiger Katze). Durch die Wechselwirkung mit ihrer Umgebung wird die Katze „effektiv klassisch“. Sie ist tot oder lebendig; Überlagerungen oder Interferenzerscheinungen können nicht nachgewiesen werden.

Schrödingers Frage, warum keine Überlagerungszustände bei makroskopischen Körpern auftreten, wird somit durch die Theorie der Dekohärenz beantwortet: Makroskopische Körper erscheinen klassisch, weil man sie nicht von ihrer Umgebung isolieren kann. Die Wechselwirkung mit der Umgebung zerstört die Interferenzfähigkeit. Es gibt jedoch auch besondere Fälle, wo die Isolierung von der Umgebung möglich ist. Dann findet keine Dekohärenz statt und es kommt zu makroskopischen Quantenphänomenen, wie Supraleitung, Suprafluidität und Bose-Einstein-Kondensation.

In jüngster Zeit wird auch der Übergangsbereich zwischen klassischer und Quantenphysik dem Experiment zugänglich. So gelang es 1996, ein Ion in einen Überlagerungszustand aus zwei räumlich um 80 nm getrennten Wellenpaketen zu bringen, deren Ausdehnung jeweils nur 7 nm betrug. Dies stellt eine Überlagerung zweier makroskopisch verschiedener Zustände dar. Die durch die Wechselwirkung

mit der Umgebung verursachte Dekohärenz (der Verlust der Interferenzfähigkeit zwischen den beiden Wellenpaketen) konnte in dem Experiment im Detail verfolgt werden.

## Kapitel 7

# Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation

### 7.1 Gleichzeitige Präparation verschiedener Eigenschaften

In der klassischen Mechanik wird die Bewegung von Teilchen durch die Angabe ihrer Bahnkurve beschrieben. Ein Beispiel ist der waagerechte Wurf, bei dem Kugeln einer parabelförmigen Bahn folgen, nachdem sie von einer Abschussvorrichtung abgeschossen wurden (Abb. 7.1). Die Kugeln bewegen sich immer auf der gleichen Bahn, sofern alle die gleichen Anfangsbedingungen besitzen, d. h. identische Werte des Abschussorts und der Abschussgeschwindigkeit. Man muss also eine Abschussvorrichtung bauen, mit der man Kugeln mit möglichst identischen Anfangswerten  $x_0, y_0, p_{x0}, p_{y0}$  von Ort und Impuls abschießen kann. Zum Herstellen dieser Anfangsbedingungen muss man also an einem Ensemble von Kugeln die Eigenschaften „Ort“ und „Impuls“ gleichzeitig präparieren.

„Präparieren“ ist gleichbedeutend damit, dass bei Messungen der präparierten Größe an einem Ensemble von Kugeln die **Streuung der Messwerte** verschwindet bzw. sehr klein wird. Streuen die beobachteten Bahnen, kann dies daran liegen, dass die Kugeln nicht reproduzierbar vom gleichen Ort mit der gleichen Anfangsgeschwindigkeit abgeschossen wurden. Man baut dann eine neue Abschussvorrichtung, bei der die Streuung in den Anfangswerten kleiner ist und führt das Experiment noch einmal durch. Die Erfahrung zeigt, dass es in der klassischen Physik keine prinzipielle untere Grenze für die gleichzeitige Verkleinerung der Streuungen in den Anfangsbedingungen gibt.

dass das Präparieren von Eigenschaften auch für Quantenobjekte möglich ist, wurde bereits gezeigt (z. B. Polarisations-eigenschaft bei Photonen). Beim waagerechten Wurf reicht die Präparation einer einzelnen Größe allerdings nicht aus. Zur Herstellung gleicher Anfangsbedingungen für alle Kugeln müssen Ort und Impuls *gleichzeitig* präpariert werden, und zwar sowohl in  $x$ - als auch in  $y$ -Richtung.

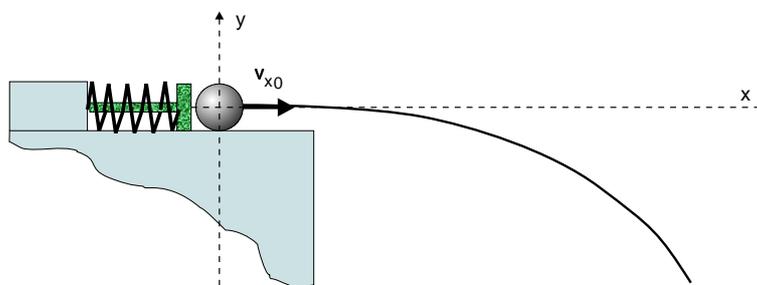


Abbildung 7.1: Präparation und Bahnkurve beim waagerechten Wurf

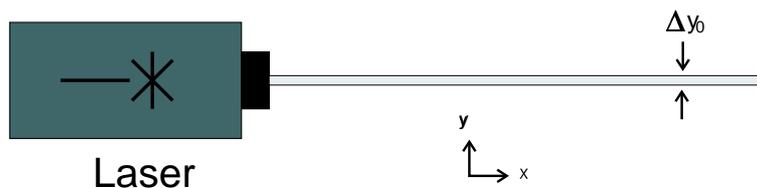


Abbildung 7.2: Strahl eines Lasers

Dieser Umstand erscheint nicht weiter bemerkenswert. Nach allen Alltagserfahrungen kommt es einem selbstverständlich vor, dass man zwei Eigenschaften gleichzeitig herstellen kann, wenn man jede von ihnen einzeln präparieren kann.

Um so überraschender ist es, dass in der Quantenmechanik genau das Gegenteil der Fall ist: Es gibt Paare von Eigenschaften (z. B. Ort und Impuls) *deren gleichzeitige Präparation prinzipiell nicht möglich ist*, obwohl die Präparation jeder einzelnen auf keine grundsätzlichen Grenzen stößt. Dies ist der Inhalt der **Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation**, die in diesem Kapitel näher erläutert werden soll.

## 7.2 Präparation von Ort und Impuls bei Photonen

Um die Unmöglichkeit der gleichzeitigen Präparation von Ort und Impuls zu zeigen, analysieren wir einen konkreten Versuch, beide Eigenschaften zugleich herzustellen. Als Quantenobjekte benutzen wir die Photonen eines monochromatischen Laserstrahls (Abb. 7.2). Da der Strahl sehr gut gebündelt ist, ist die Impulskomponente  $p_y$  *senkrecht* zur Strahlrichtung für alle Photonen praktisch gleich Null (zum Begriff des Photonenimpulses vgl. Abschnitt 1.4). Sie besitzen also die Eigenschaft „Impulskomponente  $p_y = 0$ “. Würde man Messungen der Impulskomponente  $p_y$  an sehr vielen Photonen des Laserstrahls durchführen, wäre die Streuung  $\Delta p_y$  der Messwerte um den Wert  $p_y = 0$  verschwindend gering.

Der Laserstrahl besitzt eine gewisse räumliche Breite in  $y$ -Richtung (Abb. 7.2). Misst man mit einem räumlich hochauflösenden Detektor, wird man Photonen innerhalb eines Bereichs der Breite  $\Delta y_0$  finden. Die Messwerte für die Ortskomponente  $y$  weisen also eine Streuung  $\Delta y_0$  auf. Das bedeutet, dass die Photonen *nicht* auf die Eigenschaft „Ortskomponente  $y$ “ präpariert sind.

Man kann nun versuchen, die Streuung der Ortskomponente  $y$  zu reduzieren, indem man den Strahl einen engen Spalt passieren lässt:

**Experiment 7.1:** Lassen Sie einen Laserstrahl durch einen engen Spalt (Breite  $d$ ) fallen. Der Strahl wird hinter dem Spalt aufgeweitet (Abb. 7.3). Je enger der Spalt, desto größer ist die Aufweitung.

Es handelt sich hier um die aus der Optik bekannte Beugung eines Lichtstrahls am Spalt. Die Struktur der Beugungsmaxima und -minima lässt sich deutlich erkennen.

Analysieren wir, was das Versuchsergebnis in quantenmechanischer Hinsicht für die Eigenschaften „Ortskomponente  $y$ “ und „Impulskomponente  $p_y$ “ bedeutet. Durch das Einführen des Spaltes ist der Laserstrahl unmittelbar hinter dem Spalt schmaler geworden. Das bedeutet, dass die Messwerte der Ortskomponente  $y$  in der Spaltebene weniger stark streuen. Die Streuung ist von  $\Delta y_0$  auf  $\Delta y \approx d$  vermindert worden.

Bedeutet diese Verbesserung der Ortspräparation, dass nun Ort und Impuls gleichzeitig gut präpariert sind? Nein, denn die allmähliche Aufweitung des Strahls hinter dem Spalt zeigt, dass die Photonen nicht

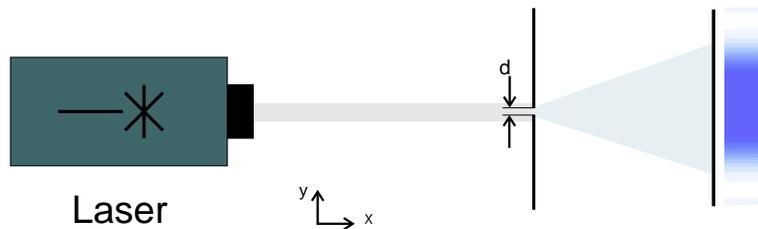


Abbildung 7.3: Aufweitung des Laserstrahls an einem engen Spalt

mehr gebündelt sind. Bei einer Messung streuen die Impulse der Photonen nun in Querrichtung. Die Photonen haben ihre Eigenschaft „Impulskomponente  $p_y = 0$ “ verloren.

Man kann sagen: Die Ortstreuung der Photonen unmittelbar hinter dem Spalt konnte mit dem Spalt zwar verringert werden. Man hat dies aber damit erkaufte, dass die Impulsstreuung vergrößert wurde. Ort und Impuls konnten nicht gleichzeitig präpariert werden. Dies gilt nicht nur für Photonen am Spalt, sondern es handelt sich um ein allgemeines Prinzip der Quantenmechanik:

**Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation: Es ist nicht möglich, ein Ensemble von Quantenobjekten gleichzeitig auf Ort und auf Impuls zu präparieren.**

### 7.3 Ein Maß für die „Güte“ einer Präparation

Man kann die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation noch quantitativer formulieren, nämlich als eine Beziehung, die angibt, wie „gut“ man Ort und Impuls an einem Ensemble von Quantenobjekten gleichzeitig präparieren kann. Vorher muss aber erst geklärt werden, was man mit dem Ausdruck der „Güte“ einer Präparation meint.

Erinnern wir uns: Ist ein Ensemble von Quantenobjekten auf eine bestimmte Eigenschaft präpariert und man führt eine Testmessung dieser Eigenschaft durch, wird bei *jeder* Messung derselbe Wert gefunden. Die Streuung der Messwerte ist dann Null. Allerdings wird es in einem realen Experiment kaum möglich sein, die Streuung der Messwerte exakt auf den Wert Null zu bringen. Die Präparation ist dann nicht perfekt, aber doch so gut, dass man die betreffende Eigenschaft „nahezu“ präpariert hat. Um dieses „nahezu“ quantitativ zu fassen, betrachten wir den Versuch, mit einem Spalt die Eigenschaft „Ort  $y$ “ (senkrecht zur Strahlrichtung) an einem Elektronenstrahl zu präparieren.

**Experiment 7.2 (Gedankenexperiment):** Ein Strahl von Elektronen fällt auf einen Spalt der Breite  $d$ . Unmittelbar hinter dem Spalt steht ein hochauflösender Detektor, der die Elektronen mit einer weit höheren Auflösung als der Spaltbreite nachweisen kann. Er registriert die Zahl der Elektronen die pro Sekunde an einer bestimmten Stelle ankommen (Abb. 7.4 (a)).

Der Detektor führt Ortsmessungen an den Elektronen durch, die vom Spalt durchgelassen werden. Natürlich wird man so dicht hinter dem Spalt alle Elektronen in dem kleinen Gebiet finden, das vom Spalt nicht abdeckt wird. Um die Verteilung der Messwerte innerhalb dieses Gebietes statistisch zu erfassen, ermittelt man ihren **Mittelwert**  $\bar{y}$  und ihre **Standardabweichung**  $\Delta y$ . Der Mittelwert gibt an, wo die Verteilung der Messwerte ihren „Schwerpunkt“ besitzt, die Standardabweichung ist ein Maß für ihre Streuung.

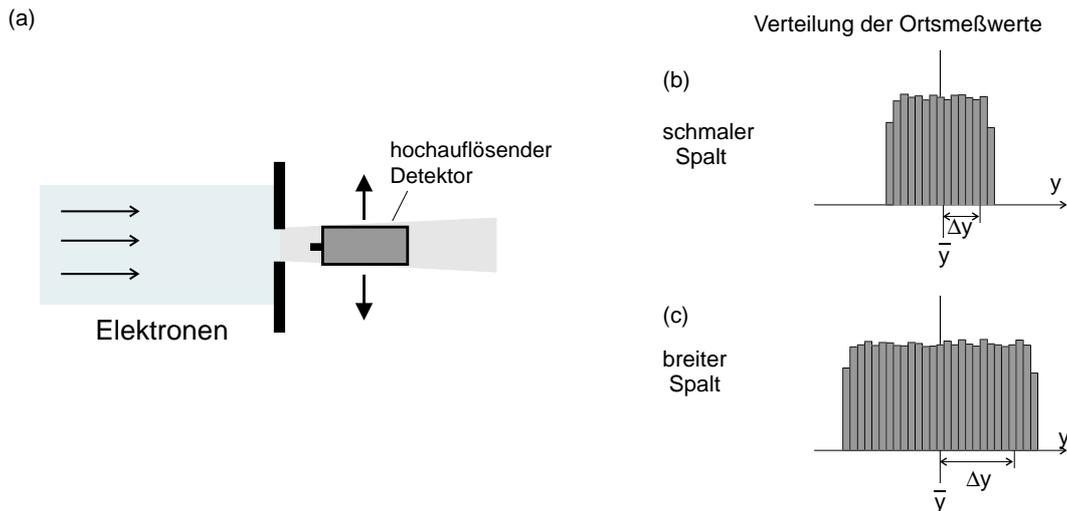


Abbildung 7.4: Präparation der Eigenschaft „Ort“ an einem Elektronenstrahl

Die Verteilung der Ortsmesswerte sieht wie in Abb. 7.4 (b)) aus. Die Elektronen sind gleichmäßig hinter dem Spalt verteilt. Die Standardabweichung der Ortsmesswerte ist von der Größenordnung der Spaltbreite. Wenn der Spalt relativ schmal ist, ist auch die Streuung recht klein. Bei einem breiteren Spalt weisen die Ortsmesswerte eine größere Streuung auf (Abb. 7.4 (c)).

Mit der Standardabweichung  $\Delta y$  hat man ein Maß gefunden, mit dem man die **Güte einer Präparation** festlegen kann. Wenn die Streuung der Messwerte Null ist, ist die Präparation perfekt (im Fall der Ortspräparation mit einem Spalt ist dies nicht zu erreichen, weil man dazu den Spalt immer enger machen müsste, bis er schließlich ganz verschlossen ist). Wenn die Standardabweichung nicht Null ist, bedeutet das, dass die Messwerte streuen. In diesem Fall ist die Präparation nicht perfekt und die Standardabweichung gibt darüber Auskunft, wie sehr die Präparation der betreffenden Eigenschaft von einer idealen Präparation abweicht. Eine kleine Standardabweichung bedeutet, dass die Eigenschaft relativ gut präpariert ist, während bei einer großen Standardabweichung keine gute Präparation vorliegt.

**Die „Güte“ der Präparation einer Eigenschaft (z. B. Ortskomponente  $y$ ) kann man anhand der Streuung der Messwerte bei einer Testmessung beurteilen. Je kleiner die Standardabweichung  $\Delta y$  der Messwerte ist, um so besser ist die Eigenschaft präpariert.**

## 7.4 Messverfahren und Eigenschaften

Den Zusammenhang zwischen der Streuung von Messwerten und einer Eigenschaft, die ein Objekt besitzt, kann man sich anhand einer Analogie aus der klassischen Physik noch einmal plausibel machen. Wir stellen uns zwei verschiedene Sorten von Metallplatten vor, nämlich runde und quadratische (Abb. 7.5). Die runden Platten besitzen die Eigenschaft „Durchmesser“. Den quadratischen Platten kann man eine solche Eigenschaft nicht zuschreiben, die Frage nach ihrem Durchmesser ist sinnlos.

Was passiert, wenn man trotzdem versucht, an den quadratischen Platten einen Durchmesser zu messen. Anders formuliert: Was ist das Ergebnis, wenn man versucht, eine Eigenschaft zu messen, die dem betreffenden Objekt gar nicht zukommt? Um die Frage zu beantworten, muss man sich ein Messverfah-

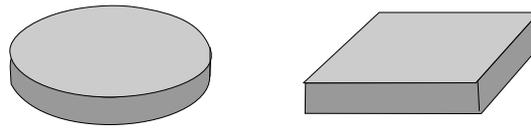


Abbildung 7.5: runde und quadratische Platten

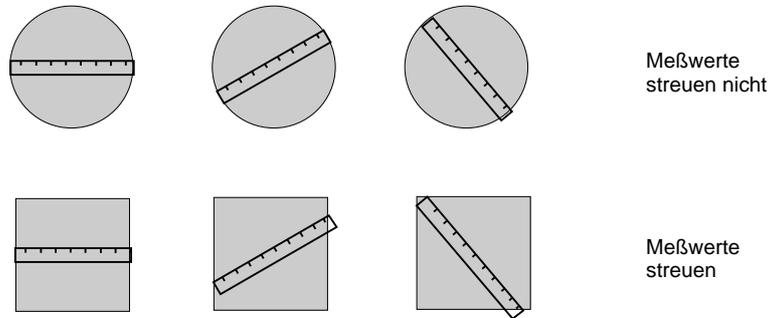


Abbildung 7.6: Messverfahren für die Eigenschaft „Durchmesser“

ren für die Eigenschaft „Durchmesser“ ausdenken. Man könnte z. B. ein Maßband nehmen und unter verschiedenen Winkeln den Abstand von Kante zu Kante messen (Abb. 7.6). Für die runden Platten erhält man immer denselben Messwert. Sie besitzen die Eigenschaft „Durchmesser“. Für die quadratischen Platten streuen die Messwerte. Dies zeigt an, dass diese Platten die gemessene Eigenschaft nicht besitzen.

Umgekehrt kann man nach der Eigenschaft „Seitenlänge“ fragen, die den quadratischen Platten zukommt. Diese Frage ist für die runden Platten sinnlos, weil man ihnen keine Seitenlänge zuschreiben kann. Wiederum schlägt sich dies in den Ergebnissen von Messungen nieder, die man mit einem geeigneten Messverfahren durchführen kann. Die Eigenschaft „Seitenlänge“ könnte man z. B. dadurch messen, dass man das Maßband immer in vertikaler Richtung anlegt, aber im Unterschied zu vorher die Messung an mehreren Stellen durchführt (Abb. 7.7). Bei diesem Messverfahren streuen die Messwerte für die runden Platten, während man bei den quadratischen Platten immer denselben Messwert erhält, der die Seitenlänge der Platten angibt.

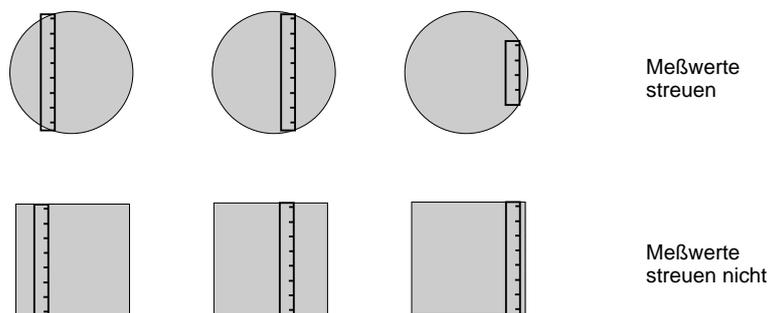


Abbildung 7.7: Messverfahren für die Eigenschaft „Seitenlänge“

## 7.5 Elektronen am Einzelspalt und die quantitative Formulierung der Unbestimmtheitsrelation

Nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation kann man an einem Ensemble von Quantenobjekten Ort und Impuls nicht gleichzeitig perfekt präparieren. Nachdem wir im vorletzten Abschnitt ein Maß für die Güte einer Präparation gefunden haben, können wir fragen, *in welchem Ausmaß* Orts- und Impulspräparation unvereinbar sind. Das bedeutet: Wenn man eine experimentelle Anordnung betrachtet, bei der Ort und Impuls nur näherungsweise präpariert werden – gibt es dann eine Grenze, wie nahe man dem Ideal einer perfekten Präparation kommen kann?

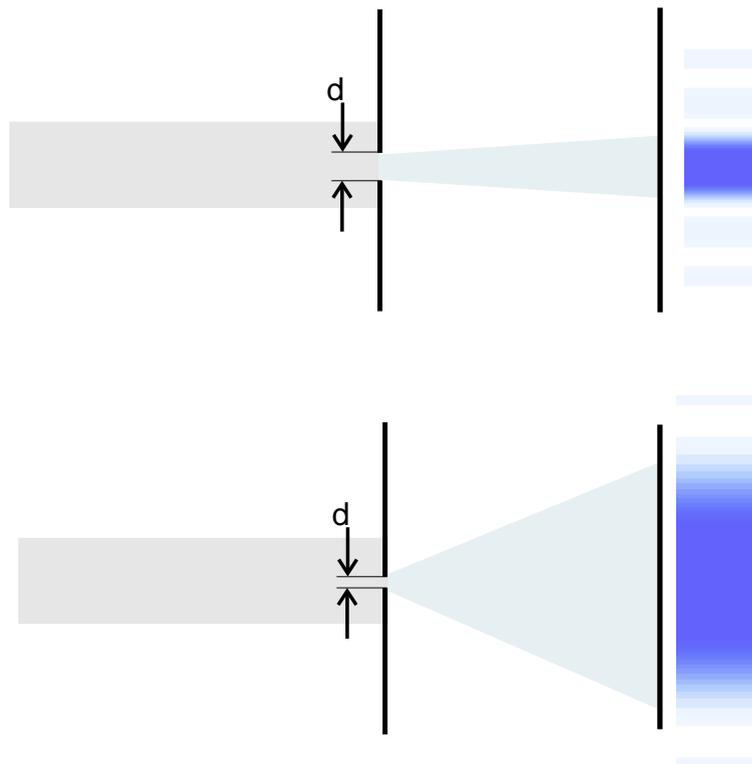


Abbildung 7.8: Elektronen am Einzelspalt

Es ist tatsächlich möglich, eine solche Aussage zu treffen. Man kann die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation quantitativ als eine Beziehung zwischen  $\Delta y$  und  $\Delta p_y$  formulieren, also zwischen den Maßzahlen für die Güte der Präparation von Ort und Impuls. Dazu betrachten wir den Versuch, mit Hilfe eines Spalts an Elektronen gleichzeitig Ort  $y$  und Impuls  $p_y$  senkrecht zur Strahlrichtung zu präparieren.

**Experiment 7.3 (Computersimulation):** Starten Sie das Doppelspalt-Simulationsprogramm und wählen Sie Elektronen der Energie  $E = 50$  keV. Aktivieren Sie am Schirm die Einstellung „theoretische Verteilung“. Klicken Sie nun auf die Blende und schließen einen der beiden Spalte. Sie können nun die Elektronenbeugung am Einzelspalt untersuchen.

Variieren Sie die Spaltbreite zwischen 700 nm und 200 nm. Wie beim analogen Experiment mit Photonen (Abschnitt 7.2) wird der Strahl hinter dem Spalt aufgeweitet. Je schmaler man den Spalt macht, desto breiter wird das Beugungsmuster (Abb. 7.8).

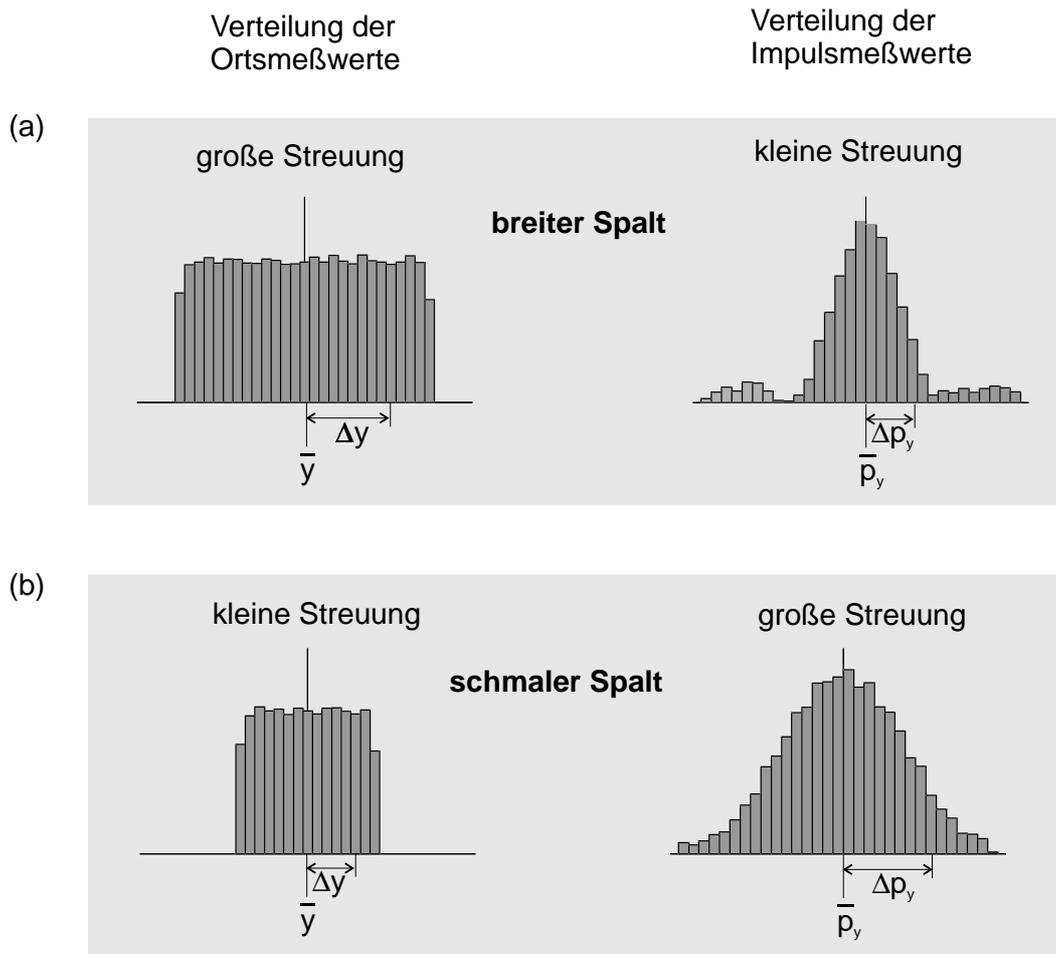


Abbildung 7.9: Verteilung der Orts- und Impulsmesswerte für einen breiten und einen schmalen Einzelspalt

Die Güte der Orts- bzw. Impulspräparation wird durch die Streuung der Messwerte einer entsprechenden Testmessung beschrieben. An dem Ensemble von Elektronen, das durch den Spalt präpariert wird, nimmt man also – genau wie im vorigen Abschnitt – die Verteilung der Ortsmesswerte unmittelbar hinter dem Spalt auf. Dann ersetzt man den hochauflösenden Ortsdetektor durch ein Impulsmessgerät und ermittelt damit die Verteilung der Impulsmesswerte. Beide Verteilungen werden in ein Diagramm übertragen und ihre Standardabweichungen werden ermittelt. So erhält man die Ortsstreuung  $\Delta y$  und die Impulsstreuung  $\Delta p_y$ .

Die Ergebnisse sind in Abb. 7.9 gezeigt: Für einen breiten Spalt ergibt sich eine relativ große Ortsstreuung, aber eine kleine Impulsstreuung (Abb. 7.9 (a)). Dagegen ist bei einem schmalen Spalt die Ortsstreuung klein, aber die Impulsstreuung groß (Abb. 7.9 (b)). Die beiden Streuungen scheinen im vorliegenden Beispiel reziprok miteinander verknüpft zu sein: Die Streuung der Impulsmesswerte nimmt zu, wenn die Streuung der Ortsmesswerte abnimmt und umgekehrt.

Man kann sich diesen reziproken Zusammenhang zwischen Orts- und Impulsstreuung auch theoretisch plausibel machen. Die Quelle präpariert Elektronen mit der Eigenschaft „Impuls“. Alle Elektronen besitzen in  $x$ -Richtung den Impuls  $p_x = \sqrt{2mE}$  und keine Impulskomponente in  $y$ -Richtung:  $p_y = 0$ .

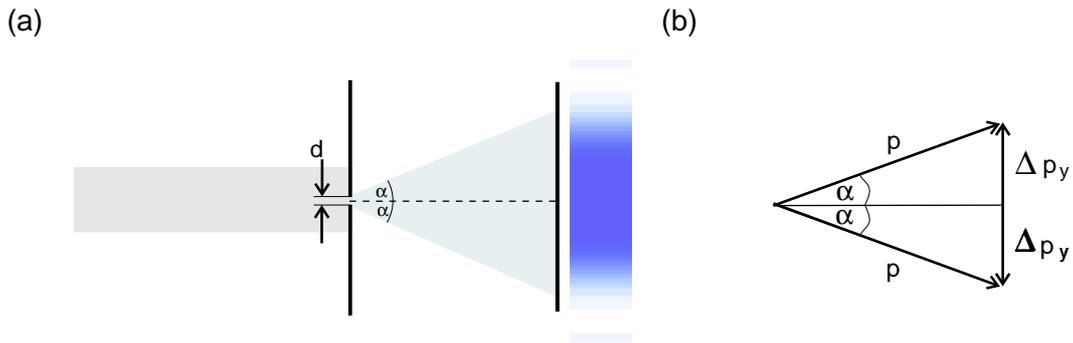


Abbildung 7.10: Abschätzung der Impulsstreuung  $\Delta p$ .

Durch die Beugung am Spalt verliert der Elektronenstrahl seine ursprüngliche Impulseigenschaft. Hinter dem Spalt misst man die in Abb. 7.9 gezeigte statistische Streuung der Querimpulse  $p_y$ . Auf dem Weg vom Spalt zum Schirm weitet sich der Strahl daher auf und bildet das beobachtete Beugungsmuster aus. Je größer die Streuung der Querimpulse ist, desto breiter wird das Beugungsbild auf dem Schirm ausfallen. Daher kann man mit der Breite des Beugungsmusters auf dem Schirm die Streuung der Impulsmesswerte am Spalt abschätzen.

Der Großteil der Elektronen wird auf dem Schirm innerhalb des Hauptmaximums der Beugungsfigur registriert, also innerhalb des Winkelbereichs zwischen  $+\alpha$  und  $-\alpha$  (Abb. 7.10 (a)). Zur Abschätzung der Streuung der Querimpulse  $\Delta p_y$  kann man sich daher auf diesen Bereich beschränken. Aus Abb. 7.10 (b) liest man den folgenden Zusammenhang ab.

$$\Delta p_y \approx p \sin \alpha. \quad (7.1)$$

Der Bereich des Hauptmaximums ist durch die ersten Beugungsminima begrenzt, dessen Lage aus der klassischen Optik bekannt ist:

$$\sin \alpha = \frac{\lambda}{d}. \quad (7.2)$$

Im Fall der Elektronen ist  $\lambda$  die de-Broglie-Wellenlänge des auf Impuls  $p$  präparierten einfallenden Strahls  $\lambda = h/p$  (vgl. (5.3)). Also gilt:

$$\sin \alpha = \frac{h}{p \cdot d}. \quad (7.3)$$

Eliminiert man  $\sin \alpha$  aus den Gleichungen (7.1) und (7.3), ergibt sich:

$$\frac{h}{p \cdot d} \approx \frac{\Delta p_y}{p}. \quad (7.4)$$

Kürzt man die beiden Faktoren  $p$  und schätzt die Streuung der Ortsmesswerte  $\Delta y$  durch die Spaltbreite  $d$  ab, wird diese Gleichung zu:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \approx h \quad (7.5)$$

Dies ist die gesuchte Gleichung, die für unser Spaltbeispiel die Streuungen der Orts- und der Impulsmesswerte in gesetzmäßiger Weise miteinander verknüpft. Das Produkt der beiden Streuungen ist in diesem Beispiel immer von der Größenordnung der Planckschen Konstanten  $h$ . Daher muss bei jedem Versuch, die Ortsstreuung  $\Delta y$  durch Verengen des Spalts zu verringern, die Streuung der Querimpulse  $\Delta p_y$  größer werden und umgekehrt.

Gleichung (7.5) stellt die quantitative Formulierung der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation für das spezielle Beispiel des Spalts dar. Sie besitzt jedoch einen viel größeren Gültigkeitsbereich. In ihrer allgemeinen Form regelt sie generell, wie gut Orts- und Impulspräparation gleichzeitig möglich sind:

Hat man ein Ensemble von Quantenobjekten so präpariert, dass die Streuung der Ortsmesswerte  $\Delta y$  klein ist, wird die Streuung der Impulsmesswerte  $\Delta p_y$  groß sein (und umgekehrt). Es gilt die *Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation*:

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{h}{4\pi}. \quad (7.6)$$

Die Überlegungen am Einzelspalt suggerieren, dass ein Ensemble mit großer Ortsstreuung automatisch eine kleine Impulsstreuung aufweisen wird. Das wird im allgemeinen nicht der Fall sein. An einem Ensemble von Quantenobjekten kann sowohl der Ort als auch der Impuls schlecht präpariert sein. Die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation stellt nur eine *untere Schranke* für die gleichzeitige Präparation von Ort und Impuls dar. Dies wird durch das Größer-Zeichen in (7.6) zum Ausdruck gebracht. Der gegenüber Gleichung (7.5) geänderte Vorfaktor ist durch die bei der Ableitung dieser Gleichung gemachten Abschätzungen bedingt.

Die bisherigen Überlegungen zur Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation galten nur für Komponenten von Ort und Impuls in der gleichen Richtung (hier  $y$ -Richtung). Es stellt sich heraus, dass die Unmöglichkeit der gleichzeitigen Präparation nur für diese Komponenten gilt. Das bedeutet: Es ist zwar unmöglich, gleichzeitig  $x$  und  $p_x$  oder  $y$  und  $p_y$  zu präparieren. Orts- und Impulskomponenten in verschiedene Richtungen, wie z. B.  $y$  und  $p_x$  oder  $x$  und  $p_y$  lassen sich aber durchaus gleichzeitig präparieren.

## 7.6 Unbestimmtheitsrelation und Bahnbegriff

Die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation bedeutet den **Abschied vom Begriff der Bahn eines Teilchens**, wie er in der klassischen Physik verwendet wird. Der Bahnbegriff ist mit der Notwendigkeit verbunden, Ort und Impuls zum gleichen Zeitpunkt exakt anzugeben. In der klassischen Mechanik ist dies im Prinzip immer möglich; man stößt dabei höchstens an praktische Grenzen. Die Unbestimmtheitsrelation (7.6) zeigt jedoch, daß dies für Quantenobjekte wie Elektronen niemals möglich ist: Quantenobjekte können niemals die Eigenschaften „Ort“ und „Impuls“ zugleich besitzen. Das Produkt der Streuungen  $\Delta y$  und  $\Delta p_y$  muß immer in der Größenordnung der Planckschen Konstante  $h$  oder größer sein.

Wie ist diese Feststellung aber mit der Beobachtung zu vereinbaren, dass Elektronen in einer Elektronenstrahlröhre scheinbar auf einer wohldefinierten Bahn laufen? Um diesen scheinbaren Widerspruch aufzuklären, betrachten wir das folgende Beispiel:

In einer Elektronenstrahlröhre wird der Elektronenstrahl an der Anode auf eine Breite  $\Delta y \approx d = 0,1$  mm abgeblendet (Abb. 7.11). Die Streuung der Impulse in  $y$ -Richtung (also in Querrichtung) ist daher mindestens

$$\Delta p_y = \frac{h}{4\pi \Delta x} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34} \text{ kg m s}}{4\pi \cdot 10^{-4} \text{ m}} = 5,3 \cdot 10^{-31} \text{ kg m/s}.$$

Die Geschwindigkeitsstreuung in  $y$ -Richtung erhält man, indem man  $\Delta p_y$  durch die Elektronenmasse teilt:

$$\Delta v_y = \frac{\Delta p_y}{m} = 0,58 \text{ m/s}.$$

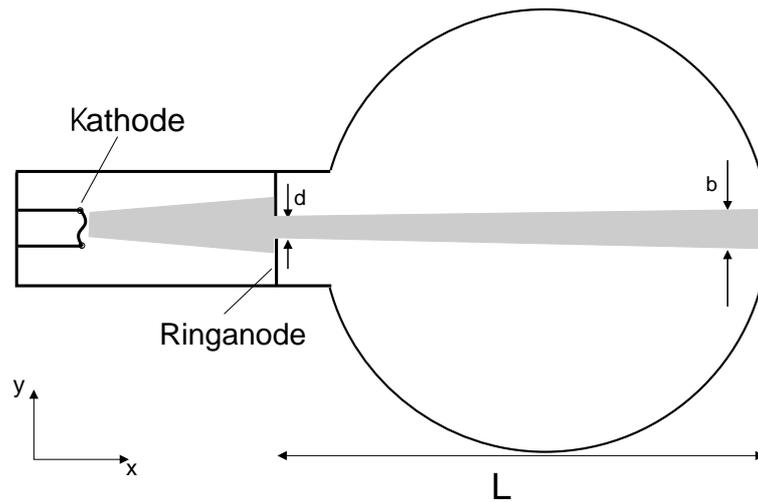


Abbildung 7.11: „Bahn“ der Elektronen in einer Elektronenstrahlröhre

Zum Vergleich berechnet man die Geschwindigkeit in  $x$ -Richtung (also in Strahlrichtung), die ein Elektron bei einer Beschleunigungsspannung von 1 kV besitzt:

$$v_x = \sqrt{\frac{2eU}{m}} = 1,9 \cdot 10^7 \text{ m/s.}$$

Um eine Strecke  $L = 20 \text{ cm}$  zu durchqueren benötigen die Elektronen eine Zeit  $t = L/v = 1,1 \cdot 10^{-8} \text{ s}$ . In dieser Zeit weitet sich der Strahl in Querrichtung um  $\Delta y = \Delta v_y t = 6 \cdot 10^{-9} \text{ m}$  auf, was jenseits aller Nachweisbarkeit liegt. Die Erkennbarkeit einer „Bahn“ in der Elektronenstrahlröhre widerspricht der Unbestimmtheitsrelation also nicht.

Teil 2:  
Quantitativer Aufbaukurs

# Kapitel 8

## Der Weg zur Schrödinger-Gleichung

### 8.1 Mathematische Beschreibung von Quantenobjekten

Die allgemeinen Ziele der Physik lassen sich in zwei Kategorien einteilen: Zum einen möchte man Einsicht in die grundlegenden Wirkungszusammenhänge der Naturphänomene gewinnen. Dies ermöglicht ein **qualitatives Verständnis** der betrachteten physikalischen Phänomene. Ein Beispiel dafür ist eine der grundlegenden Erkenntnisse der klassischen Mechanik: die Tatsache, dass die gleiche Grundkraft, die Gravitation, für das Herabfallen eines losgelassenen Steins wie auch für die Bewegung des Mondes um die Erde verantwortlich ist. Bei der zweiten Kategorie handelt es sich um die **quantitative Beschreibung** der physikalischen Phänomene. Die Newtonsche Gleichung erlaubt es, die Bahnkurve für den geworfenen Stein und die Mondbewegung abzuleiten und aus den Anfangsbedingungen detaillierte Voraussagen über das zukünftige Verhalten der Objekte zu treffen.

In den vorangegangenen Kapiteln wurden zahlreiche Einblicke in die Grundstrukturen der Quantenphysik gewonnen. Es wurden Beispiele betrachtet, in denen Quantenobjekte in einen bestimmten **Zustand** gebracht wurden. Dies geschah, indem man mit Hilfe einer geeigneten Apparatur eine **Präparation** durchführte. Die Präparation diente dazu, bestimmte dynamische Eigenschaften wie Ort, Impuls oder Polarisation herzustellen. Es zeigte sich aber auch, dass es nicht immer möglich ist, Quantenobjekten eine bestimmte, klassisch wohldefinierte Eigenschaft zuzuschreiben. Die Besonderheiten des quantenmechanischen Messprozesses wurden untersucht, und es wurde die Notwendigkeit einer statistischen Beschreibung von Quantenobjekten gezeigt.

All dies fällt in den Bereich der oben angesprochenen ersten Kategorie: ein qualitatives Verständnis der physikalischen Grundzusammenhänge zu gewinnen. Dies ist im Bereich der Quantenphysik besonders wichtig, da das Verhalten von Quantenobjekten drastisch von dem abweicht, was man im Licht der Vorerfahrungen aus der klassischen Physik für selbstverständlich ansieht.

Im folgenden geht es nun darum, einen Einblick in die quantitative Beschreibung von Quantenobjekten zu gewinnen. Es soll eine erste Einführung in den formalen Apparat der Quantenmechanik gegeben werden, an der man sieht, wie es „funktioniert“, das befremdliche Verhalten von Quantenobjekten mathematisch zu erfassen. Selbst wenn die Ergebnisse von Experimenten mit Elektronen oder Atomen schwer mit unserer Vorstellung zu vereinbaren sind oder gar widersprüchlich erscheinen: Die Quantenmechanik ist in der Lage, sie mathematisch abzuleiten. Alle bisher zu ihrer Prüfung durchgeführten experimentellen Tests hat sie bestanden.

Die Möglichkeit, Quantenobjekte mathematisch zu erfassen, obwohl ihr Verhalten anschaulich nicht verständlich erscheint, haben wir uns schon einmal zunutze gemacht: Beim Doppelspalt-Experiment (Abschnitt 5.5) wurden die Elektronen durch die **Wellenfunktion**  $\psi(x, t)$  beschrieben. Sie ist eine Funktion

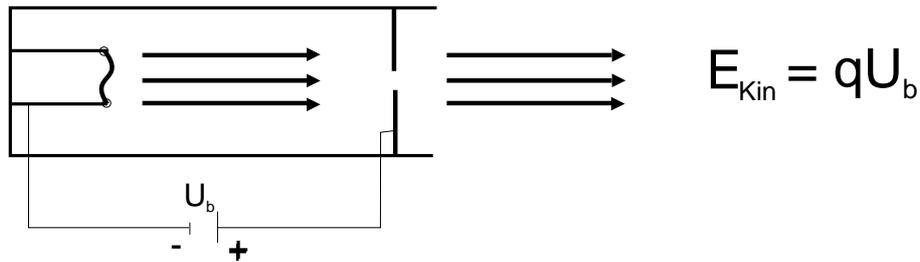


Abbildung 8.1: Präparation der Eigenschaft „kinetische Energie“ durch eine Beschleunigungsspannung

des Ortes und der Zeit, die sich wellenmäßig ausbreitet. Beim Doppelspaltexperiment konnte das Auftreten von Interferenzerscheinungen dadurch verstanden werden, dass sich die von den beiden Spalten ausgehenden Wellen überlagern, ganz ähnlich wie es bei Wasserwellen der Fall ist. Auf der anderen Seite wurde der teilchenhafte Nachweis der Elektronen auf dem Schirm durch die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion erklärt: Ihr Betragsquadrat  $P(x) = |\psi(x, t)|^2$  beschreibt die **Wahrscheinlichkeit**, ein Elektron zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  auf dem Schirm nachzuweisen. Der scheinbare Widerspruch von Wellen- und Teilchencharakter der Elektronen konnte durch die theoretische Beschreibung vollkommen aufgeklärt werden.

Mit der Wellenfunktion haben wir eines der zentralen Elemente zur mathematischen Erfassung von Quantenobjekten kennengelernt. Die Wellenfunktion beinhaltet die vollständige Information, die nach der Quantenmechanik über ein Quantenobjekt zu erlangen ist. Wie man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Quantenobjekt aus der Wellenfunktion berechnet, ist schon bekannt. In den folgenden Abschnitten wird sich zeigen, wie man aus ihr Aufschluss über andere physikalische Größen gewinnt.

Zunächst soll jedoch an einem Beispiel gezeigt werden, wie die mathematische Beschreibung von Quantenobjekten durch eine Wellenfunktion konkret aussieht. Dazu wird das einfachste Beispiel ausgewählt, nämlich ein Ensemble von Elektronen, die durch ein Präparationsverfahren in einen Zustand mit bestimmter kinetischer Energie gebracht wurden.

## 8.2 Präparation von Elektronen auf eine bestimmte kinetische Energie

Eine Möglichkeit, Elektronen in einen Zustand mit bestimmter kinetischer Energie zu bringen, bietet das folgende Verfahren:

**Experiment 8.1:** Eine Kathodenstrahlröhre wird ohne angelegte Anodenspannung betrieben. Um die Kathode erscheint ein bläuliches Glimmen. Durch Kathode und Anode fließt kein Strom. Nach Anlegen der Beschleunigungsspannung  $U_b$  zwischen Kathode und Anode sieht man einen geradlinigen Elektronenstrahl. Es fließt ein elektrischer Strom.

Die Elektronen werden durch die anliegende Spannung  $U_b$  beschleunigt (Abb. 8.1). Der erste Teil des Versuchs zeigt, dass die Elektronen ohne die anliegende Beschleunigungsspannung keine nennenswerte kinetische Energie besitzen. Nach dem Durchlaufen der Beschleunigungsstrecke besitzen die Elektronen die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = qU_b$ . Innerhalb geringer Fehlergrenzen haben alle Elektronen, die diese Präparationsvorrichtung durchlaufen, dieselbe kinetische Energie. Sie bilden daher ein Ensemble von Elektronen, das auf kinetische Energie präpariert ist. Jedes einzelne Elektron, das zu diesem Ensemble gehört, besitzt die **Eigenschaft** „kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = qU$ “.

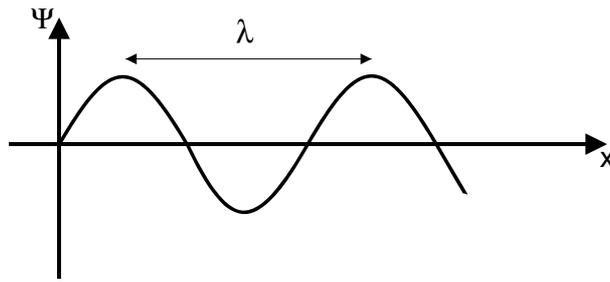


Abbildung 8.2: Momentaufnahme einer Welle zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$ .

### 8.3 Wellenfunktion eines freien Elektrons

Mit dem obigen Präparationsverfahren können wir ein Ensemble von Elektronen mit bestimmter kinetischer Energie präparieren. Wie kann man diese Elektronen mathematisch beschreiben? Wie sieht die Wellenfunktion aus, die ihnen zugeordnet ist? Die aus anderen Bereichen der Physik bekannten Wellen (z. B. Seilwellen oder Lichtwellen) sind harmonische Wellen (räumlich fortlaufende Sinus- und Cosinusfunktionen). Es ist naheliegend, die Wellenfunktion der Elektronen versuchsweise ebenso anzusetzen:

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}\right) + B \cos\left(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}\right). \quad (8.1)$$

Dabei sind  $A$  und  $B$  konstante Faktoren. Der von  $t$  abhängige Term gibt die Zeitabhängigkeit der Welle an einem bestimmten Ort wieder. Abb. 8.2 zeigt die Momentaufnahme der Welle zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$ .

In Gleichung (8.1) taucht das typische Kennzeichen einer Welle, die Wellenlänge  $\lambda$  auf. Bereits in Abschnitt 5.3 haben wir das Wellenverhalten von Elektronen quantitativ erfasst und ihnen eine Welle, die **de-Broglie-Wellenlänge**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}} \quad (8.2)$$

zugeordnet. Wir greifen nun auf dieses Ergebnis zurück und setzen diesen Ausdruck in die Formel (8.1) ein. Die Bedeutung von  $\lambda$  wird nun klar: Es ist die Wellenlänge der den Elektronen zugeordneten *Wellenfunktion*.

Mit der Abkürzung  $\hbar = h/2\pi$  erhalten wir:

**Die Wellenfunktion, die einem auf kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  präparierten Ensemble von Quantenobjekten zugeordnet ist, lautet:**

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right) + B \cos\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right). \quad (8.3)$$

### 8.4 Operatoren für physikalische Größen

Im vorausgegangenen Abschnitt wurde untersucht, wie Quantenobjekte mathematisch zu beschreiben sind. Die Vorgehensweise orientierte sich dabei an dem in Experimenten üblichen Verfahren: Um ein

Experiment an Quantenobjekten durchführen zu können, muss man sie erst in den gewünschten Zustand bringen, d. h. eine *Präparation* durchführen. In unserem Fall wurden Elektronen mit einer Beschleunigungsspannung so präpariert, dass sie die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzen.

Diesem experimentellen „Herstellen“ eines bestimmten Zustands durch Präparation entspricht auf der theoretischen Seite die Angabe einer **Wellenfunktion**. Dies ist in Abb. 8.3 symbolisiert. Mit der Wellenfunktion kann man ein durch Präparation hergestelltes Ensemble von Quantenobjekten **charakterisieren**. Den Elektronen, die mit einer Beschleunigungsspannung in einen Zustand mit der Eigenschaft „kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$ “ gebracht wurden, ist zur Beschreibung die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  (Gleichung (8.3)) zugeordnet.

Umgekehrt kann man die folgende experimentelle Situation betrachten: Man hat ein auf kinetische Energie präpariertes Ensemble von Elektronen vorliegen und möchte den Wert der kinetischen Energie erschließen. Im Experiment geschieht dies durch eine **Messung**. Die Elektronen treffen auf ein Messgerät, dieses zeigt nach der Messung den Wert der kinetischen Energie an (Abb. 8.4 (a)).

Gleichermaßen sollte man auch aus der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ermitteln können, welchen Wert der kinetischen Energie das zugehörige Ensemble besitzt. Es sollte also möglich sein, wie in Abb. 8.4 (b) dargestellt, mit Hilfe einer mathematischen Operation aus der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  den Wert von  $E_{\text{kin}}$  zu erhalten. Dies leisten in der Quantenmechanik die **Operatoren**.

### Mathematischer Einschub: Operatoren

Ein Operator ist die Anweisung, eine bestimmte mathematische Operation an der Wellenfunktion  $\psi$  durchzuführen. Dabei kann es sich um so einfache Operationen wie die Multiplikation mit einer Konstanten oder einer Funktion handeln oder um eine eher komplizierte Operation wie die Differentiation.

Man symbolisiert die Anwendung eines Operators  $\hat{A}$  auf die Wellenfunktion  $\psi$  durch die Schreibweise  $\hat{A}\psi$ . Das „Dach“ über dem  $A$  soll dabei deutlich machen, dass es sich um einen Operator handelt. Ist  $\hat{A}$  der Operator „Multiplikation mit der Konstanten  $c$ “, so bedeutet  $\hat{A}\psi$  die Anweisung „multipliziere  $\psi$  mit der Konstanten  $c$ “:

$$\hat{A}\psi \quad \text{steht für} \quad c \cdot \psi. \quad (8.4)$$

Wenn  $\hat{B}$  der Operator „Differentiation nach  $x$ “ ist, heißt  $\hat{B}\psi$  „differenziere die Wellenfunktion  $\psi$ “:

$$\hat{B}\psi(x) \quad \text{steht für} \quad \psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.5)$$

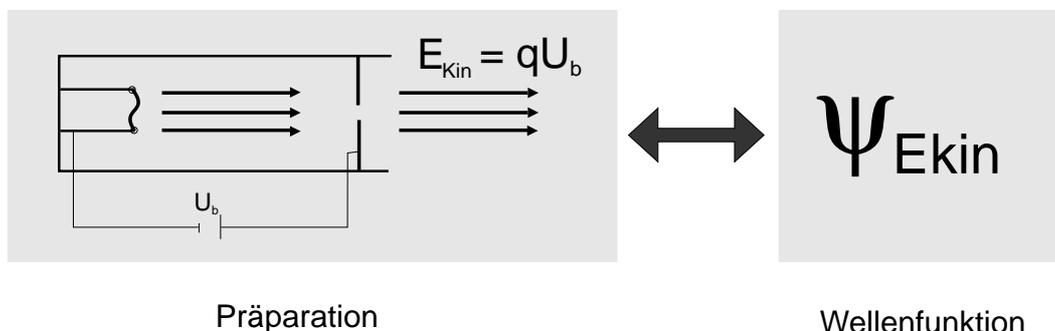


Abbildung 8.3: Präparation und Wellenfunktion

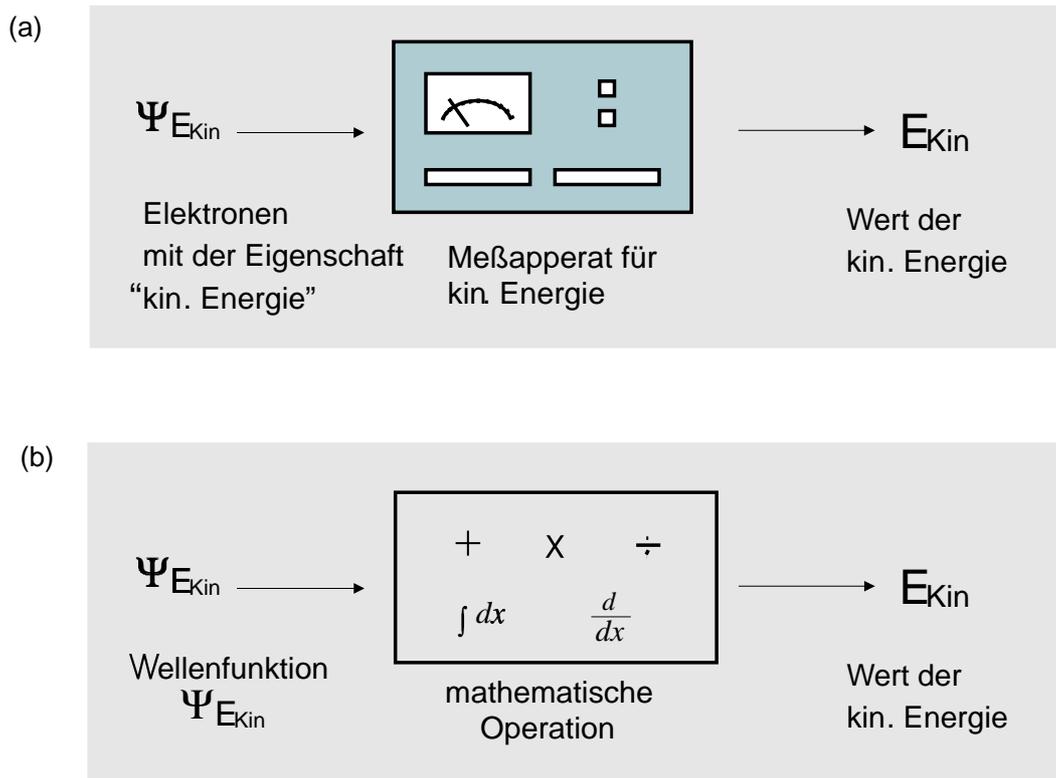


Abbildung 8.4: Analogie zwischen Messung und Anwendung eines Operators

Man kann auch kurz schreiben

$$\hat{B} = \frac{d}{dx} \quad (8.6)$$

und meint damit, dass  $\hat{B}$ , angewandt auf eine beliebigen Wellenfunktion, die Anweisung zur Differentiation nach  $x$  bedeutet.

## 8.5 Der Operator der kinetischen Energie

Mit dem Konzept des Operators ist es möglich, die eingangs gestellte Frage zu bearbeiten: Wie kann man aus der Wellenfunktion für auf kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  präparierte Elektronen

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) + B \cos \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right). \quad (8.7)$$

den Wert der kinetischen Energie gewinnen? Gesucht ist ein Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$ , der nach Anwendung auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  den Wert  $E_{\text{kin}}$  liefert. Wie könnte dies konkret aussehen?

Direktes Auflösen von (8.7) nach  $E_{\text{kin}}$  funktioniert nicht, denn  $E_{\text{kin}}$  steht im Argument der Sinus- bzw. Kosinusfunktion. Selbst wenn eine der Konstanten  $A$  oder  $B$  Null wäre und man die inversen Winkelfunktionen anwenden könnte, würde dies zu einer mathematisch höchst verwickelten Rechenvorschrift führen. Dies widerspräche dem physikalischen *Einfachheitsprinzip*: Grundlegende physikalische Größen wie die kinetische Energie sollten durch *einfache* mathematische Operationen dargestellt werden.

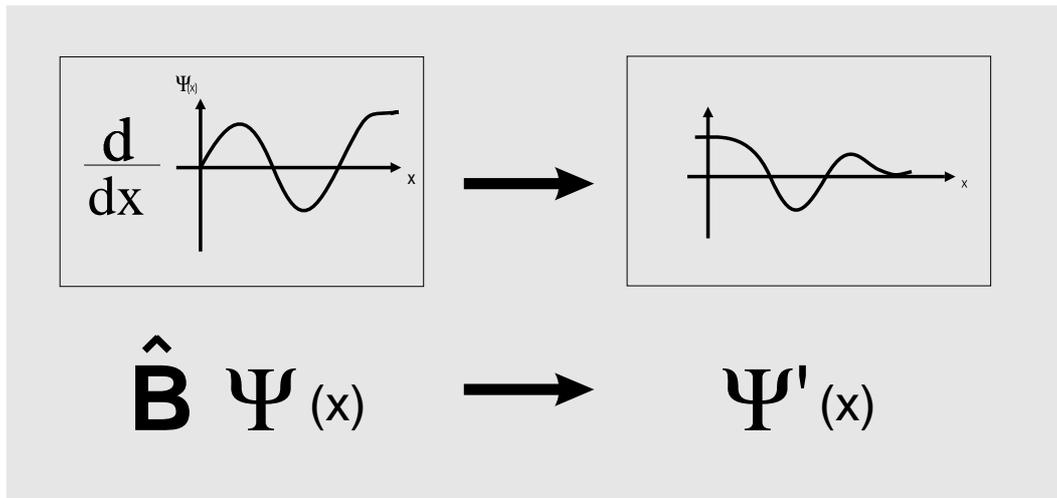


Abbildung 8.5: Veranschaulichung der Wirkung eines Operators am Beispiel der Differentiation

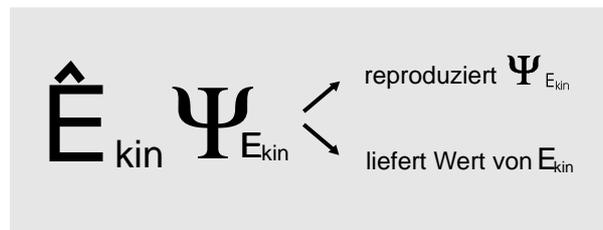


Abbildung 8.6: Wirkung des Operators  $\hat{E}_{kin}$  auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{kin}}$ .

Das direkte Auflösen nach  $E_{kin}$  führt also nicht zum Ziel. Anscheinend muss der Operator  $\hat{E}_{kin}$  den Wert der kinetischen Energie auf andere Weise liefern. Die folgende Überlegung kann uns weiterhelfen: Zunächst halten wir fest, dass die Anwendung eines Operators auf eine Wellenfunktion wieder eine Wellenfunktion ergibt. Zum Beispiel ergibt die Anwendung des Operators  $\hat{B} = \frac{d}{dx}$  auf die Funktion  $\psi(x) = A \sin(x)$  eine neue Funktion  $A \cos(x)$ . Dies ist in Abb. 8.5 symbolisiert.

Was könnte die Wellenfunktion sein, die sich durch Anwenden des Operators  $\hat{E}_{kin}$  auf  $\psi_{E_{kin}}$  ergibt? Die Wellenfunktion  $\psi_{E_{kin}}$  repräsentiert ein Ensemble von Elektronen, das die Eigenschaft „kinetische Energie“ *besitzt*. Die plausibelste Annahme ist, dass der Operator  $\hat{E}_{kin}$  diese Wellenfunktion weitgehend unverändert lässt. (Als Analogie denke man an den Newtonschen Prismenversuch in Kapitel 2 zurück (Abb. 2.3): Das mit Prisma und Blende auf die Eigenschaft „Wellenlänge“ präparierte Licht wurde in einem zweiten Prisma nicht weiter aufgefächert: Es blieb unverändert.) Da die Wellenfunktion (8.7) nur bis auf konstante Faktoren festgelegt ist, ist dies dann der Fall, wenn  $\hat{E}_{kin}\psi_{E_{kin}}$  sich von  $\psi_{E_{kin}}$  höchstens um einen konstanten Vorfaktor unterscheidet, also *proportional* zu  $\psi_{E_{kin}}$  ist:

$$\hat{E}_{kin}\psi_{E_{kin}} \sim \psi_{E_{kin}}. \quad (8.8)$$

Wir stellen also an den Operator der kinetischen Energie zwei Forderungen (Abb. 8.6):

- Die Anwendung des Operators  $\hat{E}_{kin}$  auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{kin}}$  soll diese bis auf konstante Faktoren reproduzieren.
- Es soll dabei die Information über den Wert der kinetischen Energie geliefert werden.

Eine mathematische Operation, welche die Sinus- und Kosinusfunktionen in der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  reproduziert, ist die *Ableitung*. Differentiation von  $\sin(x)$  führt zum Kosinus, nochmalige Ableitung wieder zurück zu  $-\sin(x)$ . So ergibt sich z. B. für den ersten Term aus (8.7) nach einmaliger Ableitung:

$$\frac{d}{dx} \left[ \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right] = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \left[ \cos \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right]. \quad (8.9)$$

Nochmalige Ableitung liefert:

$$\frac{d^2}{dx^2} \left[ \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right] = -\frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} \left[ \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right]. \quad (8.10)$$

Für den Kosinus-Term in (8.7) gilt eine entsprechende Gleichung, so dass die Wellenfunktion nach zweimaliger Differentiation in der Tat bis auf einen Faktor reproduziert wird:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{E_{\text{kin}}}(x) = -\frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}}(x). \quad (8.11)$$

Damit ist die erste der beiden Forderungen erfüllt. Multiplizieren wir beide Seiten der Gleichung (8.11) mit  $-\hbar^2/(2m)$ , ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{E_{\text{kin}}}(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}}(x). \quad (8.12)$$

Der Operator, der auf der linken Seite dieser Gleichung auf die Wellenfunktion wirkt, erfüllt beide Forderungen, die wir an den Operator der kinetischen Energie gestellt haben. Er reproduziert nicht nur die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$ , sondern gibt auch den Wert der kinetischen Energie an:  $E_{\text{kin}}$  ist gerade der Proportionalitätsfaktor auf der rechten Seite. Wir schließen also:

**Der Operator der kinetischen Energie ist**

$$\hat{E}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (8.13)$$

**Wendet man ihn auf eine Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  an, die eine Ensemble von Quantenobjekten mit bestimmter kinetischer Energie beschreibt, wird die Wellenfunktion reproduziert; der Proportionalitätsfaktor gibt den Wert der kinetischen Energie wieder:**

$$\hat{E}_{\text{kin}} \psi_{E_{\text{kin}}} = E_{\text{kin}} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}} \quad (8.14)$$

In der letzten Gleichung ist zu beachten, dass  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf der linken Seite ein *Operator* ist (d. h. eine Anweisung, eine mathematische Operation an einer Wellenfunktion durchzuführen),  $E_{\text{kin}}$  auf der rechten Seite dagegen eine *Zahl*, die den Wert der kinetischen Energie angibt.

## 8.6 Eigenwertgleichung

Mit dem Operator der kinetischen Energie haben wir ein systematisches Verfahren gefunden, den Wert der kinetischen Energie aus einer Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  zu ermitteln. Wenn das die einzige Aufgabe

wäre, zu der man den Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  benutzen könnte, wäre der Aufwand im Verhältnis zum Nutzen recht hoch. Aber Operatoren für physikalische Größen haben in der Quantenmechanik noch andere Aufgaben. Sie erlauben es, auf die Frage zurückzukommen, *ob und wann man Quantenobjekten eine bestimmte dynamische Eigenschaft zuschreiben kann*. Diese Frage hatte sich bei den Experimenten mit einzelnen Photonen in Kapitel 2 und den Doppelspaltexperimenten in Kapitel 5 als eines der zentralen Elemente erwiesen, das die Quantenmechanik von der klassischen Physik unterscheidet. Mit der Benutzung von Operatoren, die auf Wellenfunktionen angewendet werden können, lässt sich dieses Problem nun auch auf der theoretischen Ebene angehen.

Im letzten Abschnitt wurde der Operator der kinetischen Energie nur auf Wellenfunktionen von Quantenobjekten angewendet, die die Eigenschaft „kinetische Energie“ wirklich *besitzen* (also auf kinetische Energie präpariert wurden). Es gibt auch Quantenobjekte, die diese Eigenschaft *nicht besitzen*. Was passiert, wenn man  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  anwendet, die solche Quantenobjekte beschreibt?

**Beispiel (Gaußsche Wellenfunktion):** Betrachten wir die Wellenfunktion

$$\psi_{\text{Gauß}}(x) \sim e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (8.15)$$

die ein Ensemble von Quantenobjekten beschreibt, das die Eigenschaft kinetische Energie nicht besitzt. Sie besitzt die Form einer Gaußschen Glockenkurve. Nach Gleichung (5.12) gibt  $|\psi(x)|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Quantenobjekt am Ort  $x$  nachzuweisen.  $\psi_{\text{Gauß}}(x)$  beschreibt also eine um den Ort  $x_0$  zentrierte Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der Breite  $\sigma$ .

Wendet man  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf diese Wellenfunktion an, ergibt sich

$$\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{\text{Gauß}}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{(x-x_0)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} \right) e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (8.16)$$

Dies kann *nicht* in der Form  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{\text{Gauß}}(x) = \text{Konstante} \cdot \psi_{\text{Gauß}}(x)$  geschrieben werden.

In den beiden bisher betrachteten Beispielen hat sich gezeigt: Eine Wellenfunktion, die Quantenobjekten mit der Eigenschaft „kinetische Energie“ entspricht, wird bei Anwendung des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  reproduziert. Für eine Wellenfunktion, die Quantenobjekte ohne diese Eigenschaft beschreibt, ist das nicht der Fall. Dies gilt nicht nur für diese beiden speziellen Beispiele, sondern ist eine allgemeine Tatsache:

Wenn  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  angewandt wird und das Ergebnis *nicht* proportional zu  $\psi(x)$  selbst ist, besitzen die durch  $\psi(x)$  beschriebenen Quantenobjekte die Eigenschaft „kinetische Energie“ *nicht*. Misst man an einem Ensemble solcher Quantenobjekte die kinetische Energie, erhält man keinen einheitlichen Messwert, sondern die Messwerte streuen (vgl. Abschnitt 7.3).

Wenn dagegen  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi(x)$  proportional zu  $\psi(x)$  ist, *besitzen* die Quantenobjekte die Eigenschaft „kinetische Energie“. Man sagt in diesem Fall, dass die **Eigenwertgleichung**  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi(x)$  erfüllt ist. Die Zahl  $E_{\text{kin}}$ , die den Wert der kinetischen Energie angibt, nennt man den **Eigenwert** der kinetischen Energie. Bei einer Messung der kinetischen Energie wird dieser Wert in jedem Fall gefunden. Die Messwerte streuen innerhalb des durch  $\psi(x)$  beschriebenen Ensembles nicht.

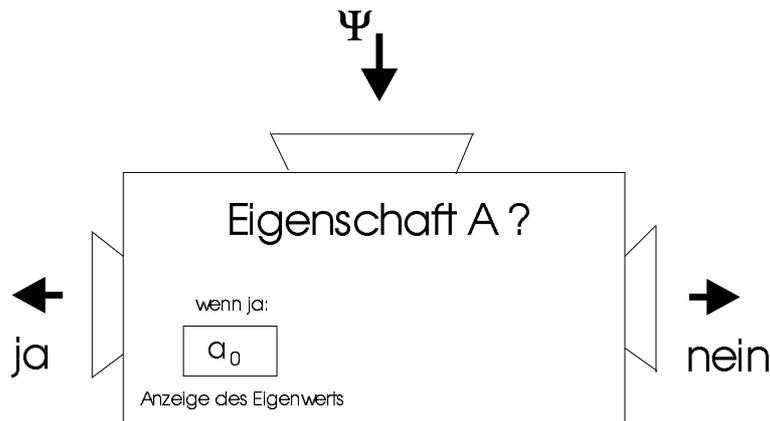


Abbildung 8.7: Eigenwertgleichung als Maschine

Mit dem Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  kann man die Frage beantworten: *Besitzen die Quantenobjekte, die von einer bestimmten Wellenfunktion  $\psi(x)$  beschrieben werden, die Eigenschaft „kinetische Energie“ oder nicht?*

- ▷ Wenn die Wellenfunktion die Eigenwertgleichung

$$\hat{E}_{\text{kin}} \psi(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi(x) \quad (8.17)$$

erfüllt, besitzen die Quantenobjekte tatsächlich die Eigenschaft „kinetische Energie“. Der Wert der kinetischen Energie, den man den Quantenobjekten in diesem Fall zuschreiben kann, wird durch den Proportionalitätsfaktor  $E_{\text{kin}}$  (den Eigenwert der kinetischen Energie) angegeben.

- ▷ Ist die Eigenwertgleichung *nicht* erfüllt, besitzen die durch  $\psi(x)$  beschriebenen Quantenobjekte die Eigenschaft „kinetische Energie“ *nicht*.

Natürlich gilt dies nicht nur für die Eigenschaft „kinetische Energie“, sondern auch für alle anderen dynamischen Eigenschaften (z. B. Impuls). Zu jeder dynamischen Eigenschaft  $A$  gehört ein Operator  $\hat{A}$ . Man kann entscheiden, ob Quantenobjekte, die durch eine Wellenfunktion  $\psi$  beschrieben werden, die Eigenschaft  $A$  besitzen, indem man die zugehörige Eigenwertgleichung  $\hat{A}\psi = a_0\psi$  betrachtet.

Man kann die Eigenwertgleichung anschaulich als eine Art „Maschine“ auffassen (Abb. 8.7). Wenn man eine Wellenfunktion  $\psi$  in die Maschine „füttert“, zeigt sie an, ob Quantenobjekte im Zustand  $\psi$  die Eigenschaft  $A$  besitzen oder nicht. Dazu wird getestet, ob  $\hat{A}\psi$  proportional zu  $\psi$  ist. Lautet die Antwort „ja“, zeigt die Maschine zusätzlich den Wert von  $A$  an (die Proportionalitätskonstante  $a_0$ ).

## 8.7 Operator der Gesamtenergie

Mit der Eigenwertgleichung haben wir eine systematische Methode gefunden, um herauszufinden, ob Quantenobjekte eine bestimmte dynamische Eigenschaft besitzen oder nicht. Bisher konnten wir sie nur für einen Operator – den der kinetischen Energie – anwenden.

Eine dynamische Eigenschaft, die in der Quantenmechanik eine besonders große Rolle spielt, ist die **Gesamtenergie**. In der klassischen Physik ist die Gesamtenergie  $E_{\text{ges}}$  die Summe aus kinetischer Energie  $E_{\text{kin}}$  und potentieller Energie  $V$ . Die Frage ist: Wie sieht der quantenmechanische Operator für die Gesamtenergie aus? Im Fall der kinetischen Energie enthielt der Operator die Anweisung zur zweimaligen Differentiation. Gilt für die potentielle Energie etwas Ähnliches? Welche Form besitzt der entsprechende Operator?

Um auf die Gesamtenergie zu kommen, reicht es nicht mehr aus, wie bisher freie Elektronen zu betrachten. Wir müssen Elektronen in einem **Potential** untersuchen. Dazu betrachten wir einen möglichst einfachen Fall: Elektronen bewegen sich in einem konstanten Potential und werden auf einer kurzen Strecke beschleunigt. Anschließend ist das Potential wieder konstant (Abb. 8.8).

**Experiment 9.1 (Gedankenexperiment):** Wir betrachten Elektronen, die auf feste kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^0$  präpariert worden sind (indem sie z. B. eine Beschleunigungsspannung durchlaufen haben, vgl. Abschnitt 8.2). In der Region I in Abb. 8.8 besitzen sie diese Eigenschaft. Der Elektronenstrahl durchläuft nun eine *weitere* Beschleunigungsspannung  $U$  (Region II in Abb. 8.8), so dass die Elektronen anschließend in region III eine andere kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^{(\text{III})}$  besitzen.

Der Potentialverlauf ist in Abb. 8.9 dargestellt. In den Regionen I und III hat das Potential einen konstanten Wert, denn es wirkt keine Beschleunigungsspannung. Insgesamt gilt:

- **Region I:** Das Potential hat den konstanten Wert  $V(x) = 0$ . Die Elektronen besitzen die Eigenschaft „kinetische Energie“. Ihr Wert ist  $E_{\text{kin}}^{(I)}$ .
- **Region II:** Die Elektronen werden durch die angelegte Spannung beschleunigt. Über ihre Eigenschaften lässt sich keine Aussage machen.
- **Region III:** Das Potential hat den konstanten Wert  $V(x) = V_0$  mit  $V_0 < 0$ . Da die Beschleunigung durch eine Spannung ein Verfahren zur Präparation der Eigenschaft „kinetische Energie“ darstellt, besitzen die auslaufenden Elektronen in Region III diese Eigenschaft. Ihr Wert ist  $E_{\text{kin}}^{(\text{III})}$ .

Mit Hilfe dieser Beziehungen können wir uns die Wellenfunktion von Quantenobjekten in einem konstanten Potential (also in der Region III) erschließen. Wir nutzen dazu aus, dass die Elektronen sowohl in der Region I als auch in der Region III die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzen. Die Wellen-

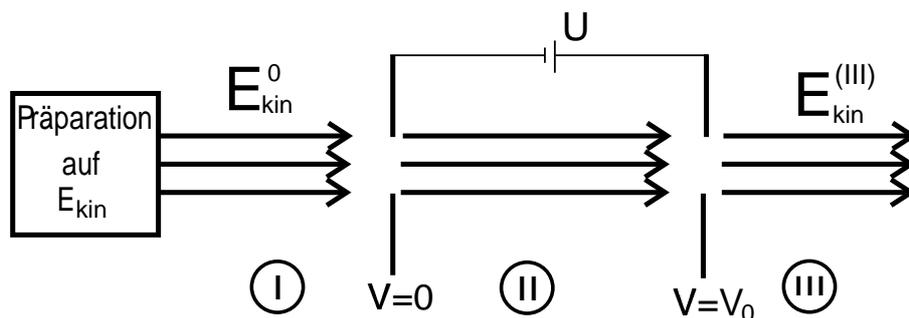


Abbildung 8.8: Auf kinetische Energie präparierte Elektronen durchlaufen nochmals eine Beschleunigungsspannung

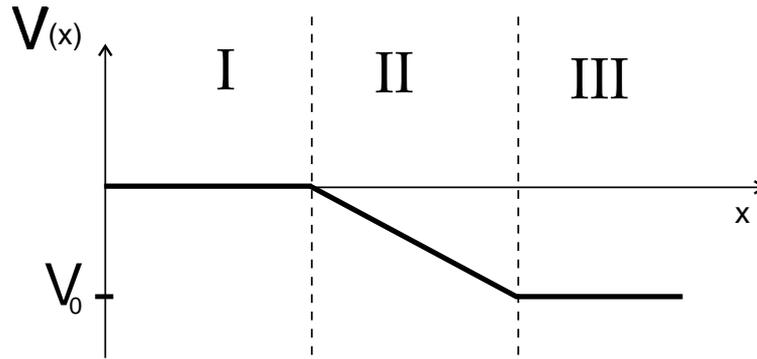


Abbildung 8.9: Potentialverlauf in den Regionen I – III.

funktion für Elektronen mit dieser Eigenschaft ist aber nach Gleichung (8.7) bekannt. In Region III gilt demnach:

$$\psi^{(\text{III})}(x, t) = A \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}^{(\text{III})}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(\text{III})}} \right) + \dots \quad (8.18)$$

(der Einfachheit halber betrachten wir nur den ersten Term von Gleichung (8.7); für den zweiten Term verläuft die Rechnung analog).

Nun können wir die *kinetische Energie*  $E_{\text{kin}}^{(\text{III})}$  in dieser Gleichung durch die *Gesamtenergie* ausdrücken. Denn wie in der klassischen Physik gilt nach dem Energieerhaltungssatz:

$$E_{\text{ges}} = \underbrace{E_{\text{kin}}^{(\text{I})} + 0}_{\text{Gesamtenergie in der Region I; } V(x)=0} = \underbrace{E_{\text{kin}}^{(\text{III})} + V_0}_{\text{Gesamtenergie in der Region III}} \quad (8.19)$$

Für die kinetische Energie in Region III gilt also:

$$E_{\text{kin}}^{(\text{III})} = E_{\text{ges}} - V_0 \quad (8.20)$$

Wir können dies in die Wellenfunktion  $\psi^{(\text{III})}$  einsetzen und erhalten als Ergebnis für die **Wellenfunktion für ein Ensemble von Elektronen im konstanten Potential  $V_0$** :

$$\psi^{(\text{III})}(x, t) = A \sin \left( \frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(\text{III})}} \right) + \dots \quad (8.21)$$

Mit diesem Resultat können wir zur nächsten Frage kommen: Was ist der **Operator der Gesamtenergie**? Gesucht ist ein Operator, der bei Anwendung auf die Wellenfunktion (8.21) den Wert der Gesamtenergie liefert. Er soll die Gleichung

$$\hat{E}_{\text{ges}} \psi^{(\text{III})} = E_{\text{ges}} \cdot \psi^{(\text{III})} \quad (8.22)$$

erfüllen. Um den Operator der kinetischen Energie zu finden, haben wir die Wellenfunktion zweimal differenziert. Versuchen wir mit  $\psi^{(\text{III})}$  das gleiche, ergibt sich:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi^{(\text{III})} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi^{(\text{III})}. \quad (8.23)$$

Multiplikation mit  $-\hbar^2/(2m)$  liefert:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi^{(\text{III})} = (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi^{(\text{III})}. \quad (8.24)$$

Bringt man nun noch den Term  $V_0 \cdot \psi^{(\text{III})}$  auf die linke Seite, hat die Gleichung die gewünschte Form:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi^{(\text{III})} = E_{\text{ges}} \cdot \psi^{(\text{III})}. \quad (8.25)$$

Wir können an dieser Gleichung durch Vergleich mit (8.22) den Operator der Gesamtenergie ablesen. Es ist der in eckigen Klammern stehende Ausdruck. In unserem Beispiel handelte es sich um ein räumlich konstantes Potential:  $V(x) = V_0 = \text{const.}$  Das Ergebnis gilt aber auch für allgemeinere Potentiale, wenn man  $V_0$  durch  $V(x)$  ersetzt.

**Der Operator der Gesamtenergie ist**

$$\hat{E}_{\text{ges}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (8.26)$$

**Er setzt sich aus dem Operator der kinetischen Energie und dem Operator der potentiellen Energie zusammen:  $\hat{E}_{\text{ges}} = \hat{E}_{\text{kin}} + \hat{E}_{\text{pot}}$ . Dabei entspricht der Operator  $\hat{E}_{\text{pot}}$  einfach der Multiplikation der Wellenfunktion mit  $V(x)$ .**

## 8.8 Die Grundgleichung der Quantenmechanik

Zustände, in denen die Antreffwahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$  sich zeitlich nicht verändert, spielen eine besonders große Rolle in der Quantenmechanik. Beispiele dafür sind der gleichmäßige Fluss von Elektronen in einem Kathodenstrahl und die Zustände, die Elektronen in Atomen einnehmen. Man nennt solche Zustände mit einer zeitunabhängigen Antreffwahrscheinlichkeit **stationäre Zustände**.

Quantenobjekte in stationären Zuständen tauschen wegen ihrer Zeitunabhängigkeit keine Energie mit ihrer Umgebung aus. Sie besitzen also einen zeitlich konstanten Wert der Energie (d. h. sie besitzen die **Eigenschaft „Gesamtenergie“**). Der Grund, warum dieser Eigenschaft eine so große Bedeutung in der Quantenmechanik zukommt, ist: Um die stationären Zustände von Quantenobjekten zu finden, muss man Zustände mit der Eigenschaft „Gesamtenergie“ suchen.

Wie findet man Zustände mit einer bestimmten Gesamtenergie? In Abschnitt 8.6 wurde schon ein Verfahren gefunden, mit dem man entscheiden kann, ob eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  Quantenobjekte mit einer bestimmten Eigenschaft beschreibt: Man betrachtet die Eigenwertgleichung für diese Eigenschaft. Deshalb muss man, um stationäre Zustände zu finden, die **Eigenwertgleichung der Gesamtenergie** betrachten:

$$\hat{E}_{\text{ges}} \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (8.27)$$

oder, wenn man  $\hat{E}_{\text{ges}}$  ausschreibt:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x) \quad (8.28)$$

Die Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie ist eine der wichtigsten Gleichungen in der Quantenmechanik. Sie heißt **Schrödinger-Gleichung**.

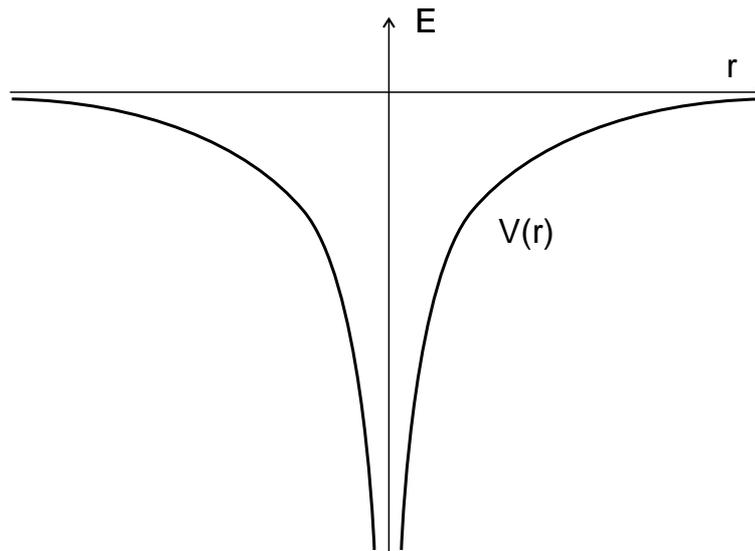


Abbildung 8.10: Coulomb-Potential

Ein Zustand mit zeitunabhängiger Antreffwahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$  heißt *stationärer Zustand*. Quantenobjekte in stationären Zuständen besitzen die Eigenschaft „Gesamtenergie“. Ihre Wellenfunktion  $\psi(x)$  erfüllt die *Schrödinger-Gleichung*, d. h. die Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x). \quad (8.29)$$

Um die physikalischen Zustände z. B. von Elektronen in Atomen zu ermitteln, muss man Wellenfunktionen auffinden, die die Schrödinger-Gleichung erfüllen, wenn das jeweilige Potential  $V(x)$ , das die physikalische Situation beschreibt, vorgegeben ist. Daher ist die Schrödinger-Gleichung die Grundgleichung der Quantenmechanik, vergleichbar mit der Newtonschen Gleichung in der Mechanik.

## 8.9 Das Auffinden stationärer Zustände mit der Schrödinger-Gleichung

Bisher haben wir Eigenwertgleichungen als eine „Maschine“ benutzt, um nachzuprüfen, ob eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  die entsprechende Eigenschaft besitzt (vgl. Abb. 8.7). Statt sich nun verschiedene Wellenfunktionen auszudenken und eine nach der anderen durchzuprobieren, kann man versuchen, die Schrödinger-Gleichung *direkt* zu lösen, um diejenigen Wellenfunktionen zu finden, die Ensembles mit der Eigenschaft „Gesamtenergie“ beschreiben. Dabei geht man folgendermaßen vor:

1. *Analyse der physikalischen Situation*. Der erste Schritt besteht darin, das Potential  $V(x)$  zu finden, das auf die betrachteten Quantenobjekte einwirkt. Als Beispiel betrachten wir das **Wasserstoffa-**

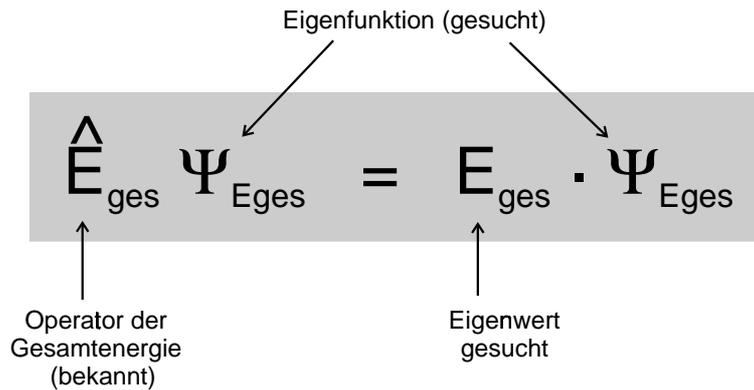


Abbildung 8.11: Vorgehensweise beim Lösen der Schrödinger-Gleichung

**tom:** Hier bindet ein lokalisierter Kern genau ein Elektron durch die Coulomb-Kraft an sich. Das Potential, in dem sich das Elektron befindet, ist also das Coulomb-Potential (Abb. 8.10).

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (8.30)$$

2. *Einsetzen des Potentials in die Schrödinger-Gleichung.* Das Potential wird nun in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Man erhält eine Gleichung, die  $\psi(x)$  erfüllen, muss, damit es die Eigenschaft „Gesamtenergie“ besitzt.
3. *Lösen der Schrödinger-Gleichung* In der Schrödinger-Gleichung  $\hat{E}_{ges} \psi(x) = E_{kin} \cdot \psi(x)$  ist nur der Operator  $\hat{E}_{ges}$  vorgegeben. Die Wellenfunktion  $\psi(x)$  und auch der Eigenwert  $E_{ges}$  sind zunächst noch unbekannt. Sie müssen durch *Lösung der Eigenwertgleichung* aufgefunden werden (vgl. Abb. 8.11). Da der Operator der Gesamtenergie die Anweisung zur Differentiation nach  $x$  enthält, handelt es sich bei der Schrödingergleichung um eine **Differentialgleichung**, d. h. um eine Gleichung, in dem neben  $\psi(x)$  noch die Ableitungen  $\psi''(x)$  (und ggf.  $\psi'(x)$ ) vorkommen. Das Lösen einer solchen Gleichung ist oft nicht einfach. Daher muss man sich oft auf vereinfachte Modelle beschränken oder zu Näherungsverfahren greifen.

Das Lösen der Schrödingergleichung für den hier betrachteten Fall des Wasserstoffatoms (d. h. ein Elektron im Coulomb-Potential) ist mit unseren mathematischen Methoden nicht zu bewältigen. Wir müssen uns daher auf einfachere Systeme beschränken, zu Näherungsverfahren greifen oder numerische Methoden benutzen. Im folgenden Abschnitt wird mit dem unendlich hohen Potentialtopf ein System betrachtet, für das wir die Schrödinger-Gleichung lösen können. Das Wasserstoff-Atom wird in Abschnitt 9.7 behandelt, wo wir ein Näherungsverfahren benutzen.

## 8.10 Elektronen im Potentialtopf

Mit dem Aufstellen der Schrödinger-Gleichung ist man der realistischen Beschreibung von Quantenobjekten ein großes Stück nähergekommen. Unser Interesse richtet sich hauptsächlich auf das Verständnis der Elektronen in Atomen. Diese Elektronen werden durch elektrische Anziehungskräfte (beschrieben durch das Potential des Kerns) in der Umgebung des Atomkerns festgehalten. Quantenobjekte, die durch ein Potential auf einen bestimmten Raumbereich eingeschränkt sind, nennt man **gebunden**.

Quantenobjekte zeigen eine Reihe von neuen, verblüffenden Effekten, wenn sie in einen beschränkten Raumbereich „eingesperrt“ werden. Dazu gehören die **Quantisierung der Energie** und der **Tunneleffekt**. Diese Phänomene sollen in den folgenden Abschnitten untersucht werden. Um zunächst ein Gespür für die neuen Effekte zu entwickeln und die Umstände zu verstehen, unter denen sie auftreten, soll zuerst ein einfaches Modell für gebundene Elektronen betrachtet werden. In der Folge können wir dann zu komplizierteren und realistischeren Systemen übergehen.

Als Prototyp für gebundene Systeme, an dem alle wesentlichen Züge schon klar hervortreten, betrachten wir Elektronen, die in einem **Potentialtopf** gebunden sind. Damit bezeichnet man den in Abb. 8.12 gezeigten Potentialverlauf. Ein Elektron ist in einen Raumbereich der Breite  $a$  eingesperrt, aus dem es nicht entkommen kann: Die „Wände“ des Potentialtopfs bilden eine undurchdringliche Barriere; das Potential geht dort gegen Unendlich. Im Innern des Potentialtopfs (d. h. für  $0 \leq x \leq a$ ) sollen dagegen auf die Elektronen keine Kräfte einwirken. Das Potential besitzt hier einen konstanten Wert  $V_0$ .

Dieses Modellpotential ist nicht nur besonders einfach; es beschreibt auch durchaus physikalisch realistische Systeme. Zum Beispiel kann man Elektronen in einem Halbleitermaterial mit „Potentialwänden“ aus Isolatormaterial einsperren. Die modernen Techniken der Halbleiterherstellung erlauben es, Strukturen im Nanometerbereich zu erzeugen. So kann man Elektronen in allen drei Raumdimensionen einsperren („Quantenpunkte“) oder sie auf eine Raumdimension beschränken („Quantendrähte“). Das Modell des Potentialtopfs (das wir hier zunächst in einer einzigen Raumdimension betrachten) beschreibt das „Einsperren“ der Elektronen quantitativ.

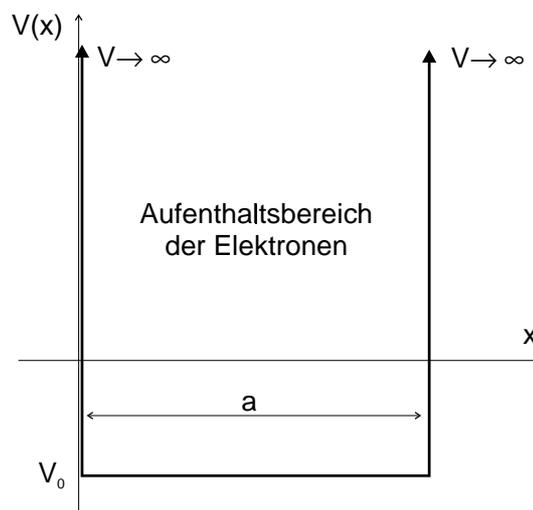


Abbildung 8.12: Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Nachdem wir den Potentialverlauf in der betrachteten physikalischen Situation festgelegt haben, können wir unsere ersten Erfahrungen beim Lösen der Schrödinger-Gleichung sammeln. Im Innern des Potentialtopfs lautet die Gleichung (8.28):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (8.31)$$

oder nach Umformung:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \psi(x). \quad (8.32)$$

Bei  $E_{\text{ges}}$  und  $V_0$  handelt es sich um Konstanten. Gesucht ist also eine Funktion  $\psi(x)$ , die nach zweimaligem Ableiten bis auf Proportionalitätsfaktoren wieder in sich selbst übergeht. Mit Sinus und Kosinus kennen wir zwei solcher Funktionen. Wir versuchen es also mit dem *Ansatz*

$$\psi(x) = A \cdot \sin(Bx) \quad (8.33)$$

mit zwei noch offenen Konstanten  $A$  und  $B$ . Zweimaliges Ableiten dieser Funktion ergibt

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -B^2 \psi(x). \quad (8.34)$$

Das Einsetzen in (8.32) führt auf die folgende Bestimmungsgleichung für  $B$ :

$$-B^2 \cdot \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi(x) \quad (8.35)$$

In dieser Gleichung steht  $\psi(x)$  als gemeinsamer Faktor auf beiden Seiten und lässt sich herauskürzen:

$$-B^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_0) \quad (8.36)$$

oder

$$B = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_{\text{ges}} - V_0)}. \quad (8.37)$$

Das Ergebnis dieser Rechnung ist also: Die Funktion

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar}x\right) \quad (8.38)$$

erfüllt die die Differentialgleichung (8.31). Eine analoge Rechnung zeigt, dass die Kosinusfunktion

$$\psi(x) = A \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar}x\right) \quad (8.39)$$

ebenfalls eine Lösung ist.

Die Differentialgleichung (8.31) bezieht sich nur auf das Innere des Potentialtopfs. Damit  $\psi(x)$  wirklich eine Lösung der Schrödingergleichung darstellt, müssen die Potentialwände bei  $x = 0$  und  $x = a$  berücksichtigt werden. Sie garantieren, dass ein Elektron nicht in den Aussenraum eindringen kann. Die Wahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$ , ein Elektron dort zu finden, ist Null. Als zusätzliche Bedingung an die Wellenfunktion ist also zu stellen, dass sie im Aussenraum des Potentialtopfs und an seinen Wänden zu Null wird. Insbesondere gilt als **Randbedingung**:

$$\psi(x = 0) = 0 \quad \text{sowie} \quad \psi(x = a) = 0. \quad (8.40)$$

Diese Randbedingungen sind die gleichen wie bei einer bei  $x = 0$  und  $x = a$  eingespannten Saite. Im Fall der Saite bildeten sich **stehende Wellen** aus. Nur bestimmte Wellenlängen sind zulässig, denn nur sie „passen“ in das Intervall der Länge  $a$ . Etwas Analoges gilt für die Wellenfunktion  $\psi(x)$ . Die Randbedingungen (8.40) stellen eine zusätzliche Forderung an die Wellenfunktionen (8.38) und (8.39) dar, die nur *bestimmte Energiewerte* der Elektronen im Potentialtopf zulassen.

Prüfen wir nach, wie die Randbedingungen zu erfüllen sind. Die Bedingung  $\psi(x = 0) = 0$  wird von der Sinusfunktion automatisch erfüllt, während sie für die Kosinusfunktion unerfüllbar ist. Letztere scheidet also als Lösung der Schrödinger-Gleichung aus.

Damit die zweite Bedingung,  $\psi(x = a) = 0$ , erfüllt ist, muss das Argument der Sinusfunktion ein ganzzahliges Vielfaches von  $\pi$  sein. Es muss gelten:

$$\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar}a = n \cdot \pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (8.41)$$

oder aufgelöst nach  $E$ :

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0. \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (8.42)$$

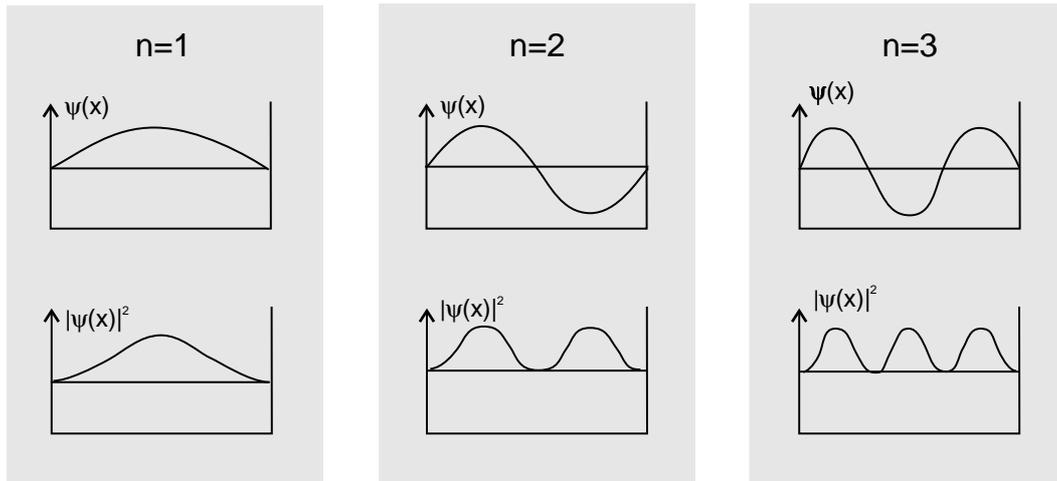


Abbildung 8.13: Wellenfunktionen (oben) und Wahrscheinlichkeitsdichten (unten) für die ersten drei Zustände im Potentialtopf

Die Energie der Elektronen im Potentialtopf kann nur die durch diese Gleichung zugelassenen Werte annehmen. Dies ist ein ganz zentrales Ergebnis der Quantenmechanik. Es besitzt allgemeine Gültigkeit: **Gebundene Elektronen können nur bestimmte Werte der Energie annehmen.** Im Fall des Potentialtopfs werden die möglichen Energiewerte durch die ganze Zahl  $n$  beschrieben, die man als **Quantenzahl** bezeichnet. Zu jedem Wert von  $n$  gehört ein bestimmter Wert von  $E$ .

**Die Energie von Elektronen in einem Potentialtopf der Breite  $a$  ist *quantisiert*. Sie kann nur die Werte**

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0. \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (8.43)$$

**annehmen, die durch die Quantenzahl  $n$  gekennzeichnet werden.**

Die Wellenfunktionen für die Zustände mit  $n = 1, 2, 3$  sind in Abb. 8.13 oben dargestellt. Die Analogie mit den stehenden Wellen bei der eingespannten Saite ist offensichtlich. Unten in der Abbildung sind die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten  $|\psi(x)|^2$  aufgetragen.

Als letztes muss die bisher noch unbestimmte Konstante  $A$  in der Wellenfunktion (8.38) festgelegt werden. Berücksichtigt man die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $|\psi(x)|^2$ , muss man die Forderung stellen, dass man bei einer Messung das Elektron mit Sicherheit *irgendwo* im Potentialtopf finden muss. Integriert man die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(x)|^2$  über die gesamte Breite des Potentialtopfs, muss sich daher die Wahrscheinlichkeit 1 ergeben:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (8.44)$$

**Auswertung des Integrals:** Um das Integral zu berechnen, vereinfachen wir zuerst das Argument der Wellenfunktion (8.38) mit Hilfe von Gleichung (8.41). Die Wellenfunktion wird damit

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (8.45)$$

Wir haben also zu berechnen

$$\int_0^a A^2 \cdot \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right) \cdot dx \quad (8.46)$$

Das Integral kann man selbst berechnen (durch partielle Integration und Ausnutzen der Identität  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$ ) oder in einer Integraltabelle nachschlagen. Es ergibt sich:

$$A^2 \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{4\pi n} \sin \frac{2\pi n x}{a} \right]_{x=0}^a \quad (8.47)$$

Nach Einsetzen der Integralgrenzen werden alle Terme bis auf einen zu Null und man erhält als Ergebnis

$$A^2 \cdot \frac{1}{2} a. \quad (8.48)$$

die Konstante  $A$  soll so gewählt werden, dass dies zu 1 wird. Das ist der Fall, wenn

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (8.49)$$

Mit diesem Wert für  $A$  können wir die vollständige Wellenfunktion noch einmal zusammenfassend hinschreiben:

**Die stationären Zustände von Elektronen in einem unendlich hohen Potentialtopf der Breite  $a$  werden durch folgende Wellenfunktionen beschrieben:**

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{n\pi}{a} x \right). \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (8.50)$$

# Kapitel 9

## Atome

### 9.1 Was sind Atome?

Schon die Philosophen im klassischen Griechenland stellten sich die Frage, was passiert, wenn man in Gedanken in immer kleinere Dimensionen der Materie vorstößt. Sind alle Stoffe im kleinen genauso aufgebaut wie im großen oder stößt man irgendwann auf fundamentale Bausteine der Materie? Über Jahrtausende hinweg beschäftigte diese Frage die Gelehrten. Den kleinsten Materiebausteinen wurde auch ein Name gegeben (wenn man auch sonst keine nähere Vorstellung von ihnen hatten): Man nannte sie **Atome**.

Erst im Verlauf des 19. Jahrhunderts kam man den Atomen näher: Die Gesetze der chemischen Bindung konnten verstanden werden, wenn man annahm, dass jedes chemische Element aus gleichartigen Atomen besteht. Unterschiedliche Atomsorten können sich zu chemischen Verbindungen zusammenschließen. Weil jedes Atom eine charakteristische Masse besitzt, konnte man mit dem diesem Modell die Gewichtsverhältnisse verschiedener chemischer Verbindungen vorhersagen.

Ein weiterer Hinweis auf die Existenz von Atomen kam aus der kinetischen Gastheorie, wo man die Gasgesetze aus einem Modell herleiten konnte, in dem Atome durch elastische Stöße miteinander wechselwirken. Die moderne Physik hat die Hypothese vom atomaren Aufbau der Materie auf vielfältige Weise bestätigt. Heutzutage kann man sogar einzelne Atome in „Fallen“ einsperren und das von ihnen ausgesendete Licht beobachten. Mit Hilfe des Tunneleffekts (Abschnitt 10.x) kann man einzelne Atome auf Festkörperoberflächen „sichtbar“ machen.

Die moderne Physik hat auch gezeigt, dass die Atome keine elementaren Bausteine sind. Sie besitzen eine Struktur. Sie bestehen aus einem sehr kleinen, positiv geladenen Atomkern, an den durch elektrische Anziehung Elektronen gebunden sind. Der Atomkern kann gerade so viele Elektronen binden wie er positive Kernbausteine (Protonen) besitzt. Dadurch wird die Atomsorte (Wasserstoff, Sauerstoff, Eisen. . .) festgelegt, denn die Zahl der Elektronen bestimmt, wie sich das Atom chemisch verhält.

### 9.2 Linienspektren

Wenn leuchtende Gase Licht aussenden, emittieren sie nicht alle Farben in gleicher Weise. Die Gasatome emittieren nur ganz bestimmte Lichtwellenlängen. Man sieht dies, wenn man das von einem Leuchtgas ausgesandte Licht spektral zerlegt und es mit dem Spektrum von „gewöhnlichem“ Licht vergleicht.

**Experiment 10.1:** Untersuchen Sie mit einem Taschenspektroskop zuerst das auf einer weißen Wand reflektierte Tageslicht. Sie sehen eine kontinuierliche Verteilung aller Spektralfarben.

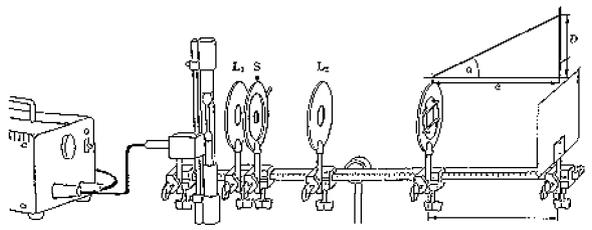


Abbildung 9.1: Aufbau zur Vermessung des Wasserstoffspektrums

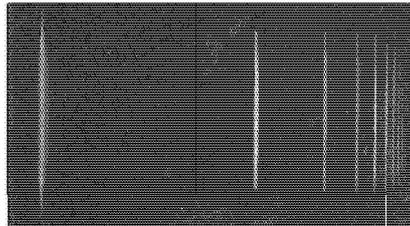


Abbildung 9.2: Linienspektrum des Wasserstoffs

Beobachten Sie anschließend das Licht verschiedener Leuchtstoffröhren und einer Quecksilberdampfampe. Hier werden sie einzelne Linien bestimmter Farben finden. Man nennt ein solches Spektrum ein **diskretes** oder **Linienspektrum**.

Mit dem folgenden Versuchsaufbau lässt sich das Linienspektrum von Wasserstoff genauer vermessen:

**Experiment 10.2:** Eine Balmer-Lampe sendet das Licht von atomarem Wasserstoff aus. Die Lichtquelle wird nach Abb. 9.1 mit Linse 1 scharf auf einen Spalt abgebildet. Dann wird durch Verschieben der Linse 2 ein scharfes Spaltbild auf dem Schirm erzeugt. Zwischen Linse 2 und dem Schirm wird ein Rowland-Gitter mit der Gitterkonstanten  $g$  eingefügt. Die Spektrallinien des Wasserstoffs werden auf dem Schirm sichtbar (Abb. 9.2).

Die Wellenlängen, die zu den einzelnen Spektrallinien gehören, lassen sich aus den Gesetzen für die Beugung am Gitter berechnen. Es gilt  $\lambda = g \cdot D/L$ , wobei  $D$  der Abstand zwischen dem Maximum nullter und erster Ordnung und  $L$  der Abstand zwischen Gitter und Schirm ist. Mit  $f = c/\lambda$  kann man die Wellenlängen der Wasserstofflinien in Frequenzen umrechnen.

Nicht alle Spektrallinien liegen im sichtbaren Bereich. Mit speziellen Detektoren lassen sich auch im ultravioletten und infraroten Bereich Linien nachweisen. Man stellt fest, dass man viele Spektrallinien in Gruppen zusammenfassen kann, die man **Serien** nennt. Die Linien einer Serie rücken zum kurzwelligen Ende des Spektrums immer dichter zusammen (in Abb. 9.2 auf der rechten Seite).

Die Linienspektren wurden bereits in der Mitte des 19. Jahrhunderts entdeckt. Ihre Bedeutung blieb den damaligen Physikern völlig dunkel. Man konnte sie an einer großen Anzahl von Substanzen vermessen und katalogisieren. Erklären konnte man sie aber nicht. Immerhin gelang es Johann Jakob Balmer 1885, eine mathematische Gesetzmäßigkeit in der empirisch gefundenen Lage der Linien von atomarem Wasserstoff zu finden. Durch geschicktes Kombinieren der Frequenzen fand er eine Formel, die nicht nur die bis dahin bekannten Linien beschrieb, sondern auch neue vorhersagte:

Die Spektrallinien von atomarem Wasserstoff werden durch die folgende Formel (Balmer-Formel) beschrieben:

$$f = f_{Ry} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (9.1)$$

Dabei ist  $f_{Ry} = 3,2898 \cdot 10^{15}$  Hz eine Konstante, die sogenannte Rydberg-Frequenz. Die Zahl  $m$  klassifiziert die verschiedenen Serien des Wasserstoffs:

$m = 1$ : Lyman-Serie im Ultravioletten,

$m = 2$ : die in Abb. 9.2 abgebildete Balmer-Serie, teilweise im Sichtbaren,

$m = 3$ : Paschen-Serie im Infraroten,

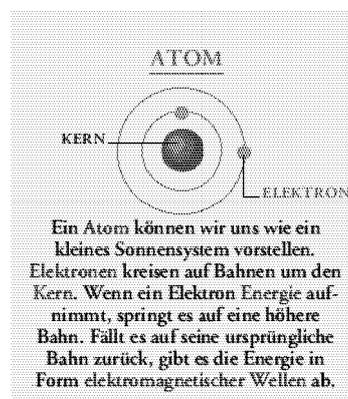
$m = 1$ : Brackett-Serie im Infraroten.

$n$  ist eine natürliche Zahl, (mit  $n \geq m + 1$ ), die die Linien innerhalb einer Serie kennzeichnet.

Die Erklärung des physikalischen Inhalts dieser Formel und der Bedeutung der Linienspektren überhaupt ist eine der großen Aufgaben der Atomphysik. Mit der Physik des 19. Jahrhunderts konnte sie nicht bewältigt werden. Das Bemühen, die Linienspektren der Atome zu verstehen, stellte einen entscheidenden Antrieb bei der Entwicklung der Quantenmechanik dar.

### 9.3 Das Bohrsche Atommodell

Lesen Sie sich das folgende Zitat durch, das einem elektronischen Nachschlagewerk entnommen wurde:



Stellvertretend für viele populärwissenschaftliche Texte steht es für eine weit verbreitete Modellvorstellung von Atomen: Kleine Teilchen, die Elektronen kreisen auf bestimmten Bahnen um den Atomkern. Diese Vorstellung hat so sehr Eingang in das allgemeine Denken gefunden, dass man sie in unzähligen Darstellungen wiederfindet. Sie ist fast schon zu einem allgemeinen Symbol für das Atom geworden.

Der Ursprung dieser Vorstellung lässt sich genau angeben: Niels Bohr stellte 1913 ein Atommodell auf, das einen wichtigen Zwischenschritt auf dem Weg zum heutigen Verständnis der Atome darstellte. In seinem Modell laufen die als punktförmige geladene Teilchen angenommenen Elektronen auf Kreisbahnen um den Kern.

Die den Kern umkreisenden Elektronen erinnern an die Planeten, die um die Sonne laufen. Statt der Gravitationskraft übernimmt die Coulomb-Kraft die Rolle der Zentripetalkraft. Doch abgesehen von

dieser relativ konventionellen Vorstellung enthält das Bohrsche Atommodell auch schon revolutionäre Züge, die mit der klassischen Mechanik auf keinen Fall vereinbar erscheinen.

Bohr wollte mit seinem Modell die Linienspektren der von den Atomen emittierten Strahlung erklären. Dazu machte er folgende Annahme (die auch heute noch Gültigkeit besitzt):

**Die Energie in Atomen ist *quantisiert*. Die Elektronen im Atom können nur in Zuständen mit ganz bestimmten Werten ihrer Energie existieren (den sogenannten *stationären Zuständen*).**

Einer der stationären Zustände in Bohrs Modell hat die niedrigste Energie. Er wird der **Grundzustand** genannt. Im Fall des Wasserstoffs beträgt die Energie des Grundzustands  $-13,6 \text{ eV}$  (bezogen auf den Nullpunkt der Energieskala: dem ionisiert vorliegenden Atom, also den nicht gebundenen einzelnen Elektronen und Protonen).

Um das Auftreten diskreter Linien im Spektrum erklären zu können, musste Bohr noch eine zweite Annahme machen: Die Elektronen senden keine Strahlung aus, solange sie sich in einem der stationären Zustände befinden. Licht wird erst bei einem *Übergang* zwischen zwei verschiedenen stationären Zuständen emittiert oder absorbiert. Einen solchen Übergang nannte er **Quantensprung**, um auszudrücken, dass es sich um einen diskontinuierlichen Prozess handelte. Man kann diese zweite Annahme folgendermaßen formulieren:

**Ein Atom strahlt nur dann ein Photon ab, wenn ein Elektron von einem stationären Zustand mit der Energie  $E_n$  in einen anderen Zustand mit einer niedrigeren Energie  $E_m$  übergeht. Für die Frequenz des abgestrahlten Photons gilt:**

$$h \cdot f = E_n - E_m. \quad (9.2)$$

Die Linienspektren kommen also in Bohrs Modell dadurch zustande, dass das Atom nur ganz bestimmte Energiewerte annehmen kann. Das Licht, das bei den Übergängen zwischen den verschiedenen stationären Zuständen emittiert wird, spiegelt die quantisierte Struktur der Energieniveaus im Atom wider. Mit den Annahmend, die er über die Lage der Energieniveaus beim Wasserstoff machte, konnte Bohr die Balmer-Formel reproduzieren. Dies war die große Leistung des Bohrschen Modells: Erstmals konnte man ein Linienspektrum mit einem physikalischen Modell quantitativ beschreiben (wir werden das Wasserstoff-Spektrum in Kapitel 9.7 aus einem echt quantenmechanischen Modell herleiten).

Die Bohrschen Modellannahmen waren vom Standpunkt der klassischen Mechanik aus völlig unakzeptabel. Was sollte z. B. ein Elektron mit einer bestimmten Energie daran hindern, ein klein wenig davon abzugeben oder etwas mehr davon aufzunehmen? Auch im Sonnensystem laufen die Planeten zwar auf ganz bestimmten Bahnen. Aber kein Prinzip der Mechanik würde ihnen verbieten, auf einer Bahn mit einer geringfügig anderen Energie zu laufen, wenn sie z. B. bei einer Kollision Energie verlören.

Bohr selbst war sich über diese Schwierigkeit durchaus im klaren. Er schrieb, dass er „keinen Versuch einer mechanischen Begründung“ für die Quantisierung der Energie gibt, weil dies „aussichtslos erscheint“. Im Modell Bohrs bleibt die Quantisierung der Energie ein Postulat, das nur durch den Erfolg des Modells gerechtfertigt ist.

Bohrs Modell konnte von den zeitgenössischen Physikern nur wegen seiner Erklärungsleistung im Fall des Wasserstoffspektrums akzeptiert werden. Allen Physikern war jedoch klar, dass Bohrs Modell nur ein Übergangsstadium zu einer voll ausgereiften Quantentheorie darstellen konnte. Zu unverbunden standen klassische und quantenhafte Züge nebeneinander.

Hinzu kam, dass der Erklärungserfolg, der für das Wasserstoffatom geglückt, sich für nahezu keine andere Atomsorte wiederholen ließ. Das Spektrum der anderen Atome blieb nach wie vor unerklärt. Die Physiker machten sich also auf die Suche nach einer vollständigeren Beschreibung der Quantenphänomene. Das Ergebnis der Suche ist uns bereits bekannt: die Beschreibung von Quantenobjekten durch Wellenfunktion, die Schrödingergleichung und die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation.

## 9.4 Abschied vom Bohrschen Atommodell

Während der mühevollen Suche nach der korrekten Quantentheorie mussten einige Züge des Bohrschen Atommodells aufgegeben werden, während andere (wie die Quantisierung der Energie) beibehalten werden konnten. Der vielleicht radikalste Umbruch im Bild über den Aufbau der Atome stellte die Erkenntnis dar, dass man den Elektronen im Atomen im allgemeinen die Eigenschaft „Ort“ nicht zuschreiben kann. Beim Doppelspaltversuch konnten wir zeigen, dass man dem Elektron nicht eine bestimmte Bahn von der Quelle zum Schirm zuschreiben kann – man kann noch nicht einmal sagen, dass es durch einen bestimmten Spalt geht. Ähnlich muss man die Vorstellung von Bahnen im Atom aufgeben. Ein Elektron im Atom besitzt die Eigenschaft „Ort“ nicht.

Die Aussage, dass die Elektronen im Atom *nicht* auf wohldefinierten Bahnen umlaufen widerspricht unseren an der Alltagsphysik entwickelten Vorstellungen stark. Sie soll deshalb mit der in Abschnitt 7.5 diskutierten **Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation** quantitativ untermauert werden.

Nach der Unbestimmtheitsrelation ist es nicht möglich, Quantenobjekte in einen Zustand zu bringen, in dem das Produkt aus  $\Delta x$  (der Streuung der Ortsmesswerte) und  $\Delta p$  (der Streuung der Impulsmesswerte) kleiner ist als  $h/4\pi$ . Betrachten wir ein Ensemble von Wasserstoffatomen. Nehmen wir an (wie sich gleich zeigen wird: fälschlich), dass das Elektron in jedem der Atome auf irgendeine Weise so präpariert worden ist, dass es entlang einer Bahn läuft. Dann muss der Ort relativ genau präpariert sein, sagen wir bis auf ein Zehntel des Atomdurchmessers. Die Impulsstreuung, die dann nicht unterschritten werden kann, ist:

$$\Delta p \geq \frac{h}{4\pi \Delta x}. \quad (9.3)$$

Mit einer Streuung der Impulse ist aber auch eine Streuung der kinetischen Energie verbunden:

$$\Delta E_{\text{kin}} \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m}. \quad (9.4)$$

Da die kinetische Energie immer positiv sein muss, muss die mittlere kinetische Energie mindestens so groß wie ihre Streuung der  $E_{\text{kin}}$ -Messwerte sein. Es muss also gelten:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{h^2}{32\pi^2 m (\Delta x)^2}. \quad (9.5)$$

Für das Wasserstoffatom liegt der experimentell bestimmte Atomdurchmesser bei etwa  $10^{-10}$  m. Wenn wir also in unserer Abschätzung  $\Delta x = 10^{-11}$  m einsetzen, erhalten wir:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle \geq \frac{(6,6 \cdot 10^{-34})^2 (\text{Js})^2}{32\pi^2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg} \cdot 10^{-22} \text{m}^2} = 95 \text{ eV}. \quad (9.6)$$

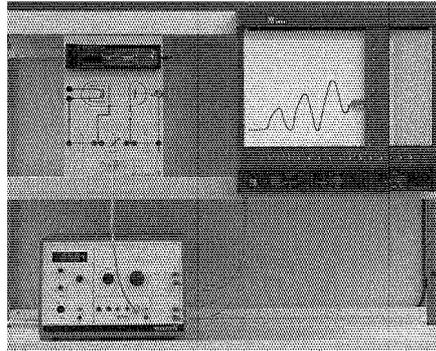


Abbildung 9.3: Franck-Hertz-Versuch

Unter den angenommenen Präparationsbedingungen (Ortsmesswerte streuen weniger als ein Zehntel des Atomdurchmessers) läge die mittlere kinetische Energie der Elektronen also höher als 95 eV. Das übersteigt die zur Ionisierung nötige Energie von 13,6 eV (Grundzustandsenergie, s. o.) aber um ein Vielfaches. Das Atom würde sofort ionisiert und damit zerstört. Präparierte man die Elektronen im Atom also so, dass man von einem einigermaßen gut definierten Ort reden kann, hätte der so hergestellte Zustand eine so hohe Energie, dass die Elektronen gar nicht mehr an den Atomkern gebunden wären. Die Vorstellung von definierten Bahnen im Atom muss also aufgegeben werden.

## 9.5 Quantisierung der Energie im Franck-Hertz-Versuch

Eines der charakteristischsten Merkmale von Atomen ist die **Quantisierung der Energie**. Wie bereits erwähnt, ist die Tatsache, dass Elektronen in einem Atom nicht jeden beliebigen Wert der Energie haben können mit der klassischen Mechanik nicht zu erklären. Und doch zeigt ein klassisches Experiment der Atomphysik: Man kann Atomen durch Elektronenstoß verschiedene Energiebeträge „anbieten“. Sie können diese aber nur aufnehmen, wenn der angebotene Energiebetrag genau „passt“.

**Experiment 10.1 (Franck-Hertz-Versuch):** Eine evakuierte Dreielektrodenröhre (Abb. 9.3) enthält einen Tropfen Quecksilber. Zur Erzeugung eines bestimmten Quecksilberdampfdrucks (etwa 0,02 bar) wird die Röhre in einem elektrischen Ofen erhitzt. Die von der Glühkathode ausgehenden Elektronen werden zwischen der Kathode und dem Gitter durch eine Spannung  $U_B$  beschleunigt (Abb. 9.4 (a)). Die kinetische Energie, die sie unmittelbar vor dem Gitter erreichen, ist

$$\frac{1}{2}mv^2 = e \cdot U_B. \quad (9.7)$$

Diese Energie befähigt die Elektronen, gegen eine zwischen Gitter und Anode anliegende Bremsspannung  $U_G$  (etwa 1,5 V) anzulaufen. Die Elektronen, die an der Anode ankommen, werden mit Hilfe eines Messverstärkers als Anodenstrom  $I_A$  nachgewiesen. Die Stromstärke wird mit einem  $x$ - $y$ -Schreiber gegen die Beschleunigungsspannung  $U_B$  aufgetragen. Man erhält die in 9.4 (b) aufgetragene Kurve. Die Maxima der Kurve liegen um jeweils  $\Delta U_B = 4,9$  V voneinander entfernt.

Steigert man die Beschleunigungsspannung, so wächst nach (9.7) die kinetische Energie der Elektronen. Es wäre daher zu erwarten, dass bei wachsender Beschleunigungsspannung der Anodenstrom immer weiter ansteigt. Zunächst passiert das auch. Die Quecksilbergas-Atome werden zwar von Elektronen „bombardiert“, können aber keine Energie von ihnen aufnehmen. Ist die Beschleunigungsspannung jedoch so groß, dass die Elektronen kurz vor dem Gitter eine kinetische Energie von 4,9 eV erreichen,

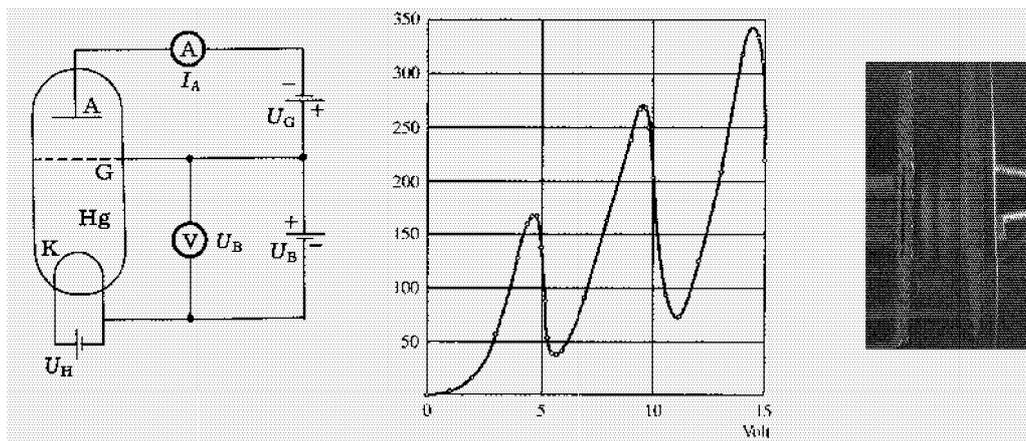


Abbildung 9.4: (a) Verschaltung der Franck-Hertz-Röhre, (b) Versuchsergebnis, (c) Leuchtschichten bei einer Neon-Röhre

passiert etwas anderes: Nun sind die Atome bei einem Zusammenstoß mit einem Elektron in der Lage, Energie von diesem aufzunehmen. Die Atome werden *angeregt*. Die Elektronen, die ihre Energie bei dem Stoß abgegeben haben, haben nun nicht mehr genügend Energie, um die Gegenspannung zwischen Gitter und Anode durchlaufen zu können. Der Anodenstrom sinkt auf ein Minimum ab (Abb. 9.4 (b)).

Steigert man die Beschleunigungsspannung weiter, steigt der Anodenstrom zunächst wieder an, um bei  $\Delta U_B = 9,8 \text{ V}$  auf ein zweites Minimum abzusinken. Die Elektronen haben nun schon nach der Hälfte des Weges ein Quecksilberatom angeregt. Nach der Kollision werden sie erneut beschleunigt und können kurz vor dem Gitter ein *zweites* Quecksilberatom anregen. Abb. 9.4 (c) gibt ein visuelles Bild der aufeinanderfolgenden Beschleunigungs- und Anregungsprozesse: Nach jeder Anregung strahlen die Atome die Anregungsenergie in Form von Licht wieder ab, so dass man Leuchtschichten in Bereichen der Röhre sieht, wo die Atome angeregt werden. In den Bereichen dazwischen werden die Atome nicht angeregt.

Das Entscheidende bei diesem Versuch ist, dass die Quecksilberatome bei einer Kollision mit einem Elektron nur einen *ganz bestimmten* Energiebetrag aufnehmen können. Durch Variation der Beschleunigungsspannung kann man die Elektronen dem Atom verschiedene Energiebeträge „anbieten“ lassen. Aber nur, wenn die Energie des Elektrons genau  $4,9 \text{ eV}$  beträgt, kann das Atom sie auch aufnehmen. Das ist ein starkes Indiz für die von Bohr postulierte Quantisierung der Energie im Atom.

## 9.6 Dreidimensionaler Potentialtopf und Orbitale

In Bohrs Atommodell musste die Quantisierung der Energie in Atomen postuliert werden. Man kann daher nicht sagen, dass seine Theorie die Energiequantisierung erklärt. Sie wird als unerklärtes Faktum in das Modell hineingesteckt und führt zu den bekannten Konflikten mit der klassischen Mechanik.

In unserer kurzen Einführung in die theoretische Beschreibung von Quantenobjekten, die im letzten Kapitel gegeben wurde, ergaben sich jedoch quantisierte Energien auf ganz natürliche Weise: Bei der Lösung der Schrödingergleichung für den unendlich hohen Potentialtopf erhielten wir ohne weitere Annahmen das Ergebnis, dass Elektronen in einem Potentialtopf nur ganz bestimmte Werte der Energie annehmen können (Gleichung (8.43)). In der Quantenmechanik muss die Energiequantisierung also nicht postuliert werden; sie ergibt sich aus der Theorie.

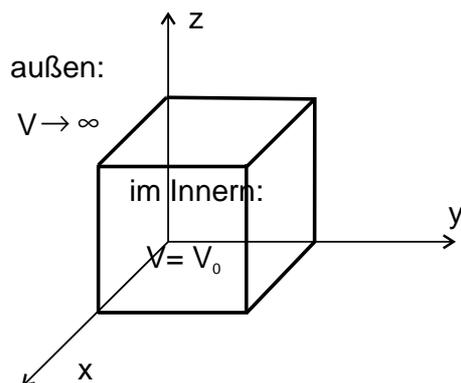


Abbildung 9.5: Dreidimensionaler Potentialwürfel

Bei genauerem Hinsehen lassen sich auch Analogien zwischen einem Elektron in einem Potentialtopf und einem Elektron in einem Wasserstoffatom entdecken. Beide Elektronen sind „eingesperrt“, d. h. sie sind durch Kräfte an einen bestimmten Raumbereich gebunden.

Die beiden Systeme weisen demnach strukturelle Ähnlichkeiten auf. In einer ersten Näherung können wir den unendlich hohen Potentialtopf daher als „Modell-Atom“ betrachten und an ihm diskutieren, wie sich eingesperrte Elektronen verhalten (eine genauere Behandlung des Wasserstoff-Atoms wird im folgenden Abschnitt gegeben). In Kapitel 9 wurde der Potentialtopf nur in einer Dimension behandelt. Um Atome im dreidimensionalen Raum zu modellieren, betrachten wir einen dreidimensionalen Potentialwürfel, bei dem das Potential im Inneren eines Würfels der Kantenlänge  $a$  den Wert  $V_0$  hat, während es ausserhalb unendlich groß wird (Abb. 9.5).<sup>1</sup>

Um die Wellenfunktionen und Energieeigenwerte für dieses Modell zu bestimmen, benötigen wir die Schrödingergleichung in drei Raumdimensionen. Wir erinnern uns, dass die eindimensionale Schrödingergleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x). \quad (9.8)$$

lautet (vgl. (8.29)). Statt die Argumente, die zu dieser Gleichung führten, für drei Raumdimensionen zu wiederholen, versuchen wir, mit einer einfachen Überlegung die richtige Gleichung zu erraten. Elektronen in drei Raumdimensionen werden durch eine Wellenfunktion  $\psi(x, y, z)$  beschrieben, die von den drei Koordinaten  $x$ ,  $y$  und  $z$  abhängt. Alle drei Koordinaten sollten gleichberechtigt in die Schrödingergleichung eingehen, denn physikalisch ist keine von ihnen vor den anderen ausgezeichnet. Die einfachste Möglichkeit, die Gleichung (9.8) in dieser Weise zu verallgemeinern, ist

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x, y, z). \quad (9.9)$$

In der Tat ist dies auch nach Aussage der Quantenmechanik die richtige Gleichung.

Bei der Lösung der Gleichung können wir von unseren Erfahrungen im eindimensionalen Fall profitieren. Wir wissen bereits, dass die Funktionen

$$\sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \quad (n_x = 1, 2, 3, \dots) \quad (9.10)$$

<sup>1</sup>In diesem Abschnitt werden Funktionen mehrerer Variablen benutzt. Stehen diese mathematischen Kenntnisse nicht zur Verfügung, kann man zum nächsten Abschnitt (Wasserstoffatom) übergehen.

die Randbedingungen für  $x = 0$  und  $x = a$  erfüllen. Ähnlich erfüllen die Funktionen

$$\begin{aligned} \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) & \quad (n_y = 1, 2, 3, \dots) \\ \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) & \quad (n_z = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

die Randbedingungen bei  $y = 0$  und  $y = a$  bzw.  $z = 0$  und  $z = a$ .

Das Produkt aller drei Funktionen erfüllt also alle Randbedingungen, die durch die unendlich hohen Wände am Rand des Potentialwürfels gestellt werden. Die Frage ist: Erfüllt es auch die Schrödingergleichung (9.9)? Um dies zu überprüfen, setzen wir den Ansatz

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \quad (9.11)$$

in die Schrödingergleichung (9.9) ein. Nach Ausführen der Ableitungen erhalten wir:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{n_x^2 \pi^2}{a^2} - \frac{n_y^2 \pi^2}{a^2} - \frac{n_z^2 \pi^2}{a^2} \right) + V_0 \right] \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = E_{\text{ges}} \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z). \quad (9.12)$$

Damit die Gleichung erfüllt ist, muss gelten:

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + V_0 \quad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots). \quad (9.13)$$

Damit haben wir die Wellenfunktion und die möglichen Energien für den dreidimensionalen Potentialtopf bestimmt. Diskutieren wir nun die Bedeutung der Ergebnisse.

Der hervorstechendste Unterschied zum eindimensionalen Fall ist, dass die Wellenfunktionen und die Energieeigenwerte von drei Quantenzahlen  $n_x, n_y, n_z$  gekennzeichnet werden statt von einer einzigen. Die drei Quantenzahlen können unabhängig voneinander alle Werte der natürlichen Zahlen annehmen. Es gibt dadurch eine große Anzahl von möglichen Kombinationen. Wie beim eindimensionalen Potentialtopf ist die Energie quantisiert.

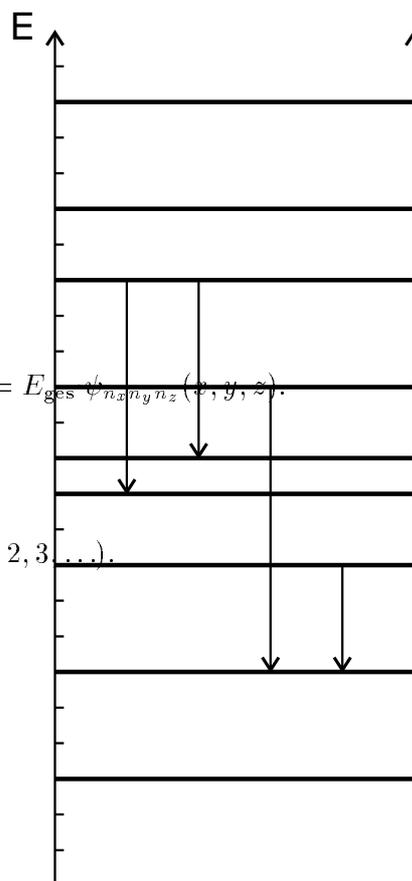


Abbildung 9.6: Termschema des dreidimensionalen Potentialtopfs

In Abb. 9.6 sind die möglichen Energiewerte, die den verschiedenen Quantenzahlen  $n_x, n_y, n_z$  entsprechen, aufgetragen. Man nennt ein solches Diagramm ein Termschema. Man sieht, dass ein einfaches Modell wie der dreidimensionale Potentialtopf schon ein relativ komplexes Schema von Energieniveaus liefert. Jedem Übergang zwischen zwei Energieniveaus entspricht gemäß der Gleichung  $hf = E_n - E_m$  eine Linie im Linienspektrum. Einige mögliche Übergänge sind in Abb. 9.6 eingetragen.

Der stationäre Zustand mit der niedrigsten Energie (also der Grundzustand) ist durch die Quantenzahlkombination  $n_x = n_y = n_z = 1$  gegeben. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi_{111}(x, y, z)|^2$  ist in Abb. 9.7 (a) dargestellt. Sie hat im Zentrum des Potentialtopfs einen Bauch, der einer maximalen Aufenthaltswahrscheinlichkeit entspricht. Für die Quantenzahlkombinationen

$$n_x = 2, \quad n_y = n_z = 1$$

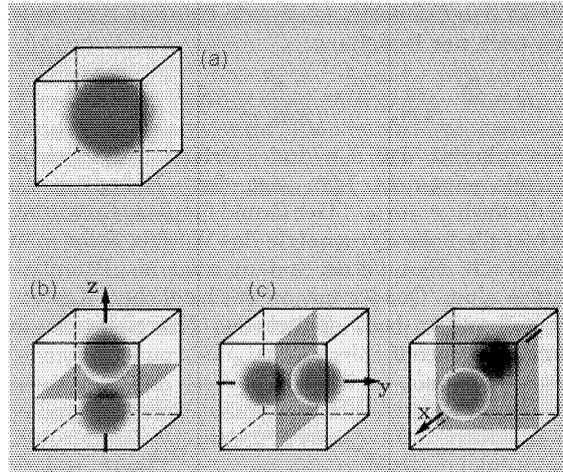


Abbildung 9.7: Wahrscheinlichkeitsdichten beim dreidimensionalen Potentialtopf

$$\begin{aligned} n_y = 2, & \quad n_x = n_z = 1 \\ n_z = 2, & \quad n_x = n_y = 1 \end{aligned}$$

ergeben sich die in Abb. 9.7 (b) – (d) dargestellten Wahrscheinlichkeitsdichten. Alle drei Zustände besitzen die gleiche Energie. Auffällig sind die Ebenen mit  $|\psi|^2 = 0$ , für die die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron zu finden, Null wird. Man bezeichnet sie als Knotenflächen.

Die Abbildungen geben einen Eindruck von den Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die sich für verschiedene Werte der Quantenzahlen einstellen. Sie entsprechen den aus der Chemie bekannten **Orbitalen**. Damit meint man die Raumbereiche, in denen die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron zu finden, besonders hoch ist (z. B. die Regionen, in denen man das Elektron mit neunzigprozentiger Wahrscheinlichkeit findet).

## 9.7 Das Wasserstoff-Atom

Das grobe Atommodell des im Potentialtopf „eingesperrten“ Atoms vermag in qualitativer Weise das Auftreten von Linienspektren zu erklären. Mit diesem einfachen Modell kann die exakte Form des Spektrums (die genaue Lage der Linien) noch nicht erklärt werden. Wir wollen daher im folgenden Abschnitt ein weniger grobes Modell diskutieren, das ein quantitatives Verständnis des Wasserstoff-Spektrums ermöglicht.

Das Wasserstoff-Atom ist das einfachste aller Atome. Es enthält nur ein Elektron und ein Proton, die sich wegen ihrer unterschiedlichen Ladung anziehen (Coulomb-Wechselwirkung). Das Proton ist fast zweitausendmal schwerer als das Elektron, und es zeigt sich im Experiment, dass es auf einen sehr kleinen Raumbereich konzentriert ist. Für unser Modell des Wasserstoff-Atoms können wir also annehmen, dass sich das Elektron im Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (9.14)$$

des Kerns aufhält (Abb. 9.8). Man kann die Energieniveaus des Elektrons durch Lösung der Schrödingergleichung in diesem Potential ermitteln.

Es stellt sich heraus, dass die Lösung dieses Problems unsere mathematischen Mittel bei weitem überschreitet. Ein Ausweg besteht darin, das Coulomb-Potential durch ein ähnliches Potential anzunähern,

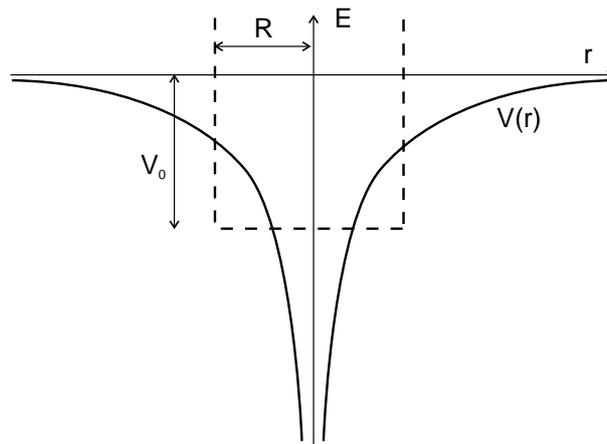


Abbildung 9.9: Coulomb-Potential und Modellpotential

das sich einfacher behandeln lässt. Auf diese Weise sind wir schon im letzten Abschnitt bei unserer ersten Näherung des im Potentialtopf eingesperrten Elektrons vorgegangen. Nur hatte sich da gezeigt, dass die Näherung offensichtlich zu grob war, um die beobachteten Spektren zu erklären.

In diesem Abschnitt werden wir ein besseres Modell des Wasserstoff-Atoms kennenlernen. Die Vorgehensweise dabei ist die folgende: Wir betrachten ein Modell-Potential, das dem Coulomb-Potential möglichst ähnlich ist, für das wir aber die Schrödinger-Gleichung exakt lösen können. Es wird sich zeigen, dass mit dem gewählten Modell-Potential das Linienspektrum des Wasserstoff-Atoms qualitativ richtig wiedergegeben wird. Alle Näherungen, die während der Rechnung gemacht werden müssen, betreffen nur die Form des Potentials und können deshalb noch auf der Ebene der klassischen Physik diskutiert werden. Die anschließende quantenmechanische Rechnung kommt dann ohne Näherungen aus.

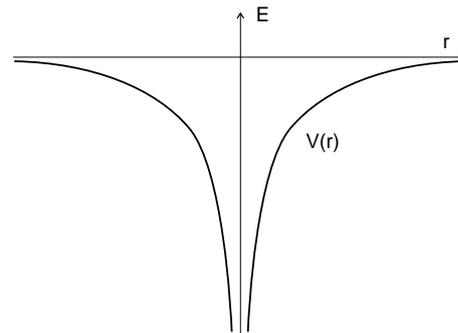


Abbildung 9.8: Coulomb-Potential

Wie bei unserem groben Modell des eingesperrten Elektrons wählen wir einen dreidimensionalen kastenförmigen Potentialtopf mit unendlich hohen Potentialwänden. Anders als vorher passen wir den Potentialtopf dem Coulomb-Potential aber nun besser an: Wir variieren die Breite  $2R$  und die Energiedifferenz  $V_0$  zwischen dem „Boden“ des Potentialtopfs und dem Energienullpunkt (Abb. 9.9). Diese Parameter werden so gewählt, dass der Potentialtopf möglichst gut auf das Coulomb-Potential „passt“.

Unsere Aufgabe besteht nun darin, möglichst „gute“ Werte für die Parameter  $R$  und  $V_0$  zu finden. Wie bereits erwähnt, ist dazu keine Quantenphysik nötig. Wir können die Näherung am Beispiel einer klassischen Ladung ermitteln.

#### (a) Ermitteln der Potentialtopf-Breite $R$

In der klassischen Physik kann sich eine in einem Coulomb-Potential gebundene Ladung (Energie  $E_{\text{ges}} < 0$ ) nicht beliebig weit nach aussen bewegen. Wie im Gravitationsfeld (z. B. beim senkrechten Wurf) gibt es in einem gewissen Abstand  $R$  einen Umkehrpunkt. Er ist dadurch gekennzeichnet,

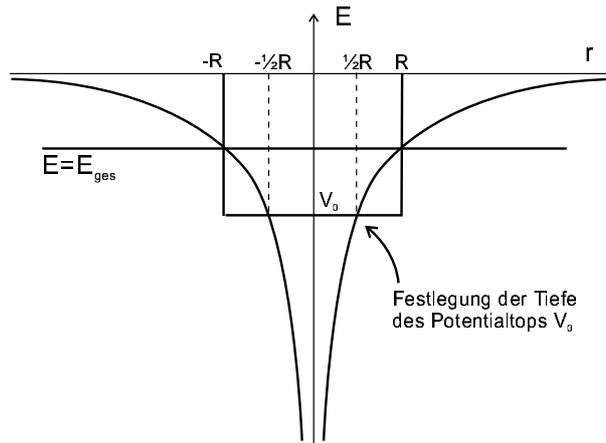


Abbildung 9.11: Festlegen von  $V_0$

dass die kinetische Energie Null ist; die Gesamtenergie  $E_{\text{ges}}$  ist dann gleich der potentiellen Energie (Abb. 9.10):

$$E_{\text{ges}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}, \quad (9.15)$$

oder, nach  $R$  aufgelöst:

$$R = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}. \quad (9.16)$$

Die Lage des Umkehrpunkts hängt also von der Energie  $E_{\text{ges}}$  ab.

Damit hat man eine klassische Abschätzung für den Bereich gewonnen, innerhalb dessen sich das Elektron aufhält. In unserem Modell wird das Coulomb-Potential durch einen Potentialtopf der Breite  $2R$  ersetzt. Das bedeutet: Innerhalb dieses Bereichs wird das Potential als konstant angenommen, der Aussenbereich ist für das Elektron unzugänglich (unendlich hohe Potentialwände).

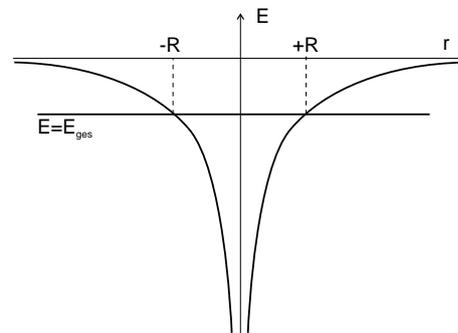


Abbildung 9.10: Lage der Umkehrpunkte

### (b) Ermitteln der Potentialtopf-Tiefe $V_0$

Innerhalb des Potentialtopfs hat das Potential einen konstanten Wert  $V_0$ . Wir müssen nun eine geeignete Abschätzung für  $V_0$  finden. Es liegt nahe,  $V_0$  so zu wählen, dass es die „mittlere Tiefe“ des Coulomb-Potentials darstellt. Hier ergibt sich zunächst eine Schwierigkeit, weil das Coulomb-Potential am Nullpunkt divergiert. Wie soll man in diesem Fall eine „mittlere Tiefe“ bestimmen? Es handelt sich jedoch nicht um eine echte Divergenz, denn durch die endliche Ausdehnung des Kerns wird das Potential am Rand des Kerns „abgeschnitten“ und nimmt einen endlichen Wert an.<sup>2</sup>

Aus der Abbildung 9.10 kann man ersehen, dass der Wert von  $V_0$  etwas kleiner als  $E_{\text{ges}}$  sein muss. Wir erhalten eine Abschätzung, indem wir festlegen, dass  $V_0$  den Wert des Coulomb-Potentials an der Stelle  $\frac{1}{2}R$  hat (Abb. 9.11). Es gilt demnach (Einsetzen der Formel für  $R$ ):

$$V_0 = V\left(r = \frac{1}{2}R\right) = V\left(r = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}\right). \quad (9.17)$$

<sup>2</sup>Hier täuscht auch die zweidimensionale Darstellung. In Wirklichkeit handelt es sich um ein dreidimensionales Problem. Man berechnet den Mittelwert des Potentials innerhalb einer Kugel mit Radius  $R$ :  $\bar{V} = \frac{1}{V_K} \int_0^R V(r) \cdot 4\pi r^2 dr$  ( $V_K$  = Kugelvolumen). Das ergibt den endlichen Wert  $V_0 = 3/2 E_{\text{ges}}$ .

Benutzen wir den Ausdruck (9.14) für das Coulomb-Potential, ergibt sich

$$V_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot 2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}{e^2} \quad (9.18)$$

und das Endergebnis für  $V_0$  lautet:

$$V_0 = 2E_{\text{ges}}. \quad (9.19)$$

Damit ist die Tiefe des Potentialtopfs gegenüber dem Nullpunkt der Energie festgelegt und alle Parameter unseres Modell-Potentials bestimmt. Wir können nun zur quantenmechanischen Berechnung der Energiewerte übergehen.

### (c) Bestimmen der Energiewerte

Wir fassen unser Modell noch einmal zusammen: Zur Modellierung des Coulomb-Potentials für eine Ladung der Energie  $E_{\text{ges}}$  verwenden wir einen dreidimensionalen kastenförmigen Potentialtopf mit unendlich hohen Potentialwänden, dessen Boden sich bei  $V_0 = 2E_{\text{ges}}$  befindet und dessen Kantenlänge

$$2R = -2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}. \quad (9.20)$$

ist. Die Energieniveaus eines Elektrons im dreidimensionalen Potentialtopf haben wir bereits vorher berechnet (Gleichung (9.13) mit  $a = 2R$ )

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2R)^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + V_0. \quad (9.21)$$

Zur Vereinfachung beschränken wir uns auf Zustände, für die  $n_x = n_y = n_z \equiv n$ , d. h. die keine Richtung bevorzugen. Die Energieniveaus werden dann:

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(2R)^2} \cdot 3n^2 + V_0.$$

Nun setzen wir die Parameter  $R$  und  $V_0$  ein:

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \cdot 3n^2 \cdot \frac{(4\pi\epsilon_0)^2 E_{\text{ges}}^2}{e^4} + 2E_{\text{ges}}.$$

Bringt man den letzten Term auf der rechten Seite nach links, ergibt sich

$$-3E_{\text{ges}} = 3 \frac{\pi^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2}{2 m e^4} \cdot n^2 E_{\text{ges}}^2,$$

und nach Kürzen von  $E_{\text{ges}}$  erhalten wir das Ergebnis für die Energieniveaus im Wasserstoffatom:

$$E_{\text{ges}} = -\frac{4}{\pi^2} \frac{m e^4}{2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (9.22)$$

Wie unser erstes grobes Modell sagt dieses verfeinerte Modell die Quantisierung der Energie im Wasserstoffatom voraus. Die Quantenzahl  $n$  durchläuft alle positiven ganzen Zahlen ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Zu jedem Wert von  $n$  gehört ein Wert der Energie und damit ein Zustand, den das Elektron einnehmen kann.

Die Abhängigkeit der Energiewerte von der Quantenzahl  $n$  ist:

$$E_{\text{ges}} \sim -\frac{1}{n^2}. \quad (9.23)$$

Für alle Zustände gilt  $E_{\text{ges}} < 0$ , d. h. sie sind gebunden. Je größer  $n$  wird, um so höher ist die Energie. Für große  $n$  rücken die Energiewerte immer dichter zusammen und nähern sich dem Wert  $E_{\text{ges}} = 0$  (Abb. ??). Diese Eigenschaften unseres Modells werden von der exakten quantenmechanischen Rechnung bestätigt.

Die Energiewerte, die sich mit der exakten Form des Potentials ergeben, unterscheiden sich vom Ergebnis unserer Modellrechnung um einen konstanten Faktor  $4/\pi^2 \approx 0,4$ . Das korrekte Ergebnis für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms ist:

**Im Wasserstoff-Atom kann das Elektron die folgenden Werte der Gesamtenergie annehmen:**

$$E_{\text{ges}} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (9.24)$$

Der Zustand mit  $n = 1$ , also der niedrigsten Energie, ist der **Grundzustand** des Wasserstoff-Atoms. Er liegt bei  $E_{\text{ges}} = -13,6 \text{ eV}$ .

Schließlich können wir die berechneten Energiewerte noch mit dem beobachteten Spektrum des Wasserstoffatoms verknüpfen (Balmer-Spektrum, Abb. 9.2). Licht wird emittiert, wenn das Atom einen Übergang zwischen zwei Zuständen (z. B. von  $n = n_1$  nach  $n = n_2$ ) macht. Nach Gleichung (9.2) ist die Photonenenergie  $h \cdot f$  dabei gleich der Differenz der beiden Energiewerte. Daraus erhalten wir:

$$h \cdot f = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (9.25)$$

Das entspricht genau der Balmer-Formel (9.1). Den Wert der Rydberg-Frequenz können wir durch Vergleich der beiden Formeln bestimmen:

$$f_{\text{Ry}} = \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3\epsilon_0^2} = 3,2898 \cdot 10^{15}, \quad (9.26)$$

in Übereinstimmung mit dem Experiment. Dieses Zurückführen des empirisch ermittelten Wertes  $f_{\text{Ry}}$  auf eine Kombination von Naturkonstanten ist eine der großen Leistungen des quantenmechanischen Atommodells.