

Heft 7

QUANTENMECHANIK - REVOLUTION DES PHYSIKALISCHEN WELTBILDES (-)

Gegen Ende des 19. Jahrhunderts schien die Physik zumindest in ihren Grundzügen wohl bekannt und gesichert zu sein. Die Mechanik, aufgebaut auf den Konzepten von Newton und Galilei, zusammen mit der Elektrodynamik Maxwells schien alle bereits durchgeführten Experimente korrekt zu beschreiben. Man erwartete daher auch für die Zukunft keine neuen Fakten mehr, die dieses (klassische) physikalische Weltbild ernsthaft erschüttern könnten. Wie wir heute wissen, war dies eine fundamentale Fehleinschätzung. Zum einen zeigten die bereits im Abschnitt 3.2.8 beschriebenen vergeblichen Versuche, die Geschwindigkeit der Erde relativ zum Äther zu messen (dem als absolut ruhend postulierten Trägermedium der elektromagnetischen Strahlung), dass die klassische Mechanik bei Annäherung der Objektgeschwindigkeit an die Lichtgeschwindigkeit modifiziert werden muss. Dies führte zur Entwicklung der sog. *speziellen Relativitätstheorie* (Abschnitt 3.2.9).

Zum anderen aber führte das Vordringen in die Welt des Mikrokosmos, also die ersten Experimente mit Atomen und deren Bausteinen, den Protonen, Neutronen und Elektronen, zu völlig neuartigen Interpretationsproblemen. Eine Reihe typischer Experimente zeigte klar, dass die klassische Mechanik in einem ganz anderen Sinne erweitert werden musste, um auch im Mikrokosmos zu korrekten Aussagen zu führen. Diese typischen Experimente und ihre Ergebnisse werde ich im Kapitel 7.2 erläutern. Daraus werde ich im daran anschließenden Kapitel 7.3 die logische Struktur der neuen Mechanik entwickeln, die wegen einer ihrer wichtigsten neuen Aussagen die Bezeichnung *Quantenmechanik* erhalten hat. Dabei werden wir uns jedoch auf den nicht-relativistischen Fall beschränken, d.h. nur Situationen behandeln, in denen alle relevanten Geschwindigkeiten klein sind gegenüber der Lichtgeschwindigkeit. Denn die Verknüpfung dieser beiden Erweiterungen zur *relativistischen Quantenmechanik* hat sich als in besonderem Maße kompliziert und schwer verständlich herausgestellt. Ihre Grundzüge werden wir im Kapitel 7.14 behandeln.

Eine der wichtigsten Aussagen der neuen Mechanik wird sein, dass die bisher gewohnten Beschreibungskonzepte des *Teilchens* einerseits und der *Wellenerscheinung* andererseits nicht mehr von einander separiert betrachtet und behandelt werden dürfen. Vielmehr wird es nötig sein, sie zu einer neuen umfassenderen Art der Beschreibung zusammen zu fassen. Diese Situation wird in den Lehrbüchern meist als

Welle-Teilchen-Dualismus bezeichnet. Als Vorbereitung auf diese Diskussion werde ich uns daher zunächst die klassischen Konzepte von *Wellen* und *Teilchen* - bei entsprechender Größe ist bei letzterem die Bezeichnung *Körper* gebräuchlicher - ins Gedächtnis rufen.

7.1 Teilchen und Wellen im Bild der klassischen Physik (*)

Ein *klassisches Teilchen* ist ein ruhemassebehaftetes Objekt endlicher Ausdehnung mit einem wohl definierten Volumen V . D.h. man kann zum einen die räumliche Masseverteilung des Teilchens angeben z.B. durch die Funktion

$$m = m(\vec{r}) \quad (7.1)$$

\vec{r} messen wir hierbei vorzugsweise in einem Koordinatensystem, dessen Ursprung mit einem ausgezeichneten Punkt des Teilchens, z.B. seinem Massenschwerpunkt, identisch ist. Zum anderen aber ist auch gesichert, dass das von dem Teilchen eingenommene Volumen, d.h. die Menge aller Punkte mit nicht verschwindender Mas sendichte,

$$V = \{\vec{r} : m(\vec{r}) \neq 0\} \quad (7.2)$$

endlich und topologisch nicht zu kompliziert ist. Insbesondere ist nicht nur das Volumen, sondern auch seine Oberfläche von endlicher Größe.

Jedes klassische Teilchen ist lokalisiert, d.h. zu jedem Zeitpunkt kann sein Aufenthaltsort exakt angegeben werden, z.B. die in einem externen, nicht mit dem Teilchen verbundenen Koordinatensystem gemessene Koordinate seines Massenschwerpunktes. Zusätzlich zu der Charakterisierung über die Funktion $m = m(\vec{r})$ wird a priori angenommen, dass 2 Teilchen nicht gleichzeitig dasselbe Volumen ausfüllen können, auch nicht teilweise, zumindest nicht ohne dass es zu einer katastrophalen Veränderung (Zerstörung) von zumindest einem dieser beiden Körper kommt.

Klassische (kompakte) Körper können einander nicht zerstörungsfrei durchdringen.

Durch Angabe der Werte eines geeignet ausgewählten Satzes von Variablen zu einem bestimmten Zeitpunkt und unter Berücksichtigung sämtlicher Wechselwirkungen zwischen dem Teilchen und dem Rest der Welt ist das Verhalten dieses Teilchens bis in alle Zukunft vorgegeben. Die Regeln, nach denen sich diese Variablen mit der Zeit verändern, werden als *Bewegungsgleichungen* bezeichnet, s. Abschnitt 3.3.14. In der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik (Sir William Rowan Hamilton, * 1805 in Dublin; † 1865 in Dunsick b. Dublin) lauten diese

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial E(\vec{P}, \vec{r})}{\partial \vec{P}} ; \quad \frac{d\vec{P}}{dt} = -\frac{\partial E(\vec{P}, \vec{r})}{\partial \vec{r}} \quad (7.3)$$

E ist dabei die Energie des Teilchens, geschrieben in den als unabhängig aufgefassten Variablen \vec{P} und \vec{r} .

Auch bei einem klassischen Teilchen können manche Variablen beliebige Werte annehmen, andere dagegen nur gewisse, diskret verteilte Werte. Diskret verteilt ist insbesondere die Teilchenzahl, diese kann nur positive natürliche Zahlenwerte annehmen. Auch die Ladung ist quantisiert, diese kommt nur in ganzzahligen (positiven wie negativen) Vielfachen eines als Naturkonstante vorgegebenen Wertes vor, der sog. *Elementarladung*, (s. Abschnitt 4.3.1). Dieser Wert ist allerdings im Vergleich zu den in der makroskopischen Welt vorkommenden Ladungen sehr klein. Variablen, die nur diskrete Werte annehmen können, sind also nicht erst eine Erfindung der Quantenmechanik. Wir haben uns allerdings so daran gewöhnt, dass es uns in diesen Fällen als selbstverständlich erscheint. Andere Variablen, wie die Energie oder der Impuls, sind dagegen in der klassischen Mechanik niemals quantisiert. Sie können immer beliebige Werte annehmen.

Eine *klassische Wellenerscheinung* ist ein kooperatives Phänomen der Kontinuumsmechanik. Sie benötigt ein als Kontinuum angenommenes Medium, in dem oszillierende Veränderungen einer oder mehrerer (i.a. mindestens zweier) physikalischer Größen A_i möglich sind, z.B. Oszillationen der Massendichte und der lokalen Geschwindigkeit in Gasen oder Flüssigkeiten (*Schall*, s. Abschnitt 3.3.17), der mechanischen Spannungen und der lokalen Deformation in Festkörpern (*Körperschall* bzw. *Phononen*, s. Abschnitt 9.2) oder der elektrischen und der magnetischen Feldstärke in Dielektrika oder im Vakuum (*elektromagnetische Strahlung*, s. Kapitel 6.2.3). In allen diesen Fällen lässt sich in linearer Näherung, d.h. für kleine Amplituden der Oszillationen, jede real auftretende Oszillation $A(\vec{r}, t)$ als eine Fourierreihe (wenn die Funktion $A(\vec{r}, t)$ streng periodisch ist bzgl. \vec{r} und t) bzw. als Fourier-Integral (sonst) von ebenen Wellen darstellen (s. Abschnitt 4.2.3),

$$A(\vec{r}, t) = \iiint A(\vec{k}, \omega) \cdot e^{-i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \cdot d^3k \cdot d\omega \quad (7.4)$$

Das Basis-Element zum Verständnis sämtlicher Wellenerscheinungen $A(\vec{r}, t)$ ist also die ebene Welle

$$A(\vec{r}, t) = A(\vec{k}, \omega) \cdot e^{-i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad ; \quad A(\vec{k}, \omega) \in \hat{\mathbf{C}} \quad (7.5)$$

Sie kann als Baustein aufgefasst werden, aus dem alles übrige aufgebaut ist. Dieses Objekt *ebene Welle* ist nicht lokalisiert, sondern füllt den gesamten für die Oszillationen bereitgestellten Teil des Mediums gleichmäßig aus. Verschiedene ebene Wellen können sich *überlagern*, d.h. den gleichen Teil des Mediums ausfüllen, und zeigen dabei Interferenzeffekte (wenn sie denn ausreichend kohärent sind, s. Abschnitt 11.1.5). Entscheidende Voraussetzung für die Möglichkeit von Interferenz ist, dass die für die Wirkung auf andere Systeme entscheidende Größe der Welle nicht die Amplitude ist, sondern deren als *Intensität* bezeichnetes Quadrat. Für die über die Zeit gemittelte Intensität einer Welle kann nun aber an gewissen Stellen im Raum

$$\langle I(\vec{r}, t) \rangle_t = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \int_t^{t+\Delta t} [A_1(\vec{r}, t') + A_2(\vec{r}, t')]^2 \cdot dt' > \langle I_1(\vec{r}, t) \rangle_t + \langle I_2(\vec{r}, t) \rangle_t \quad (7.6)$$

gelten und dafür an anderen Stellen

$$\langle I(\vec{r}, t) \rangle_t < \langle I_1(\vec{r}, t) \rangle_t + \langle I_2(\vec{r}, t) \rangle_t \quad (7.7)$$

s. hierzu insbesondere Abschnitt 11.1.2. Diese *Interferenzeffekte* sind als entscheidendes Kriterium dafür anzusehen, dass es sich bei den beobachteten Objekten um Wellen handelt.

Gl. 7.5 kann man auch als Bewegungsgleichung der klassischen ebenen Welle deuten, denn sie legt fest, wie sich die Variable A mit der Zeit verändert.

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Teilchen und Wellen im Bild der klassischen Physik* ist noch nicht verfügbar.)

7.2 Die entscheidenden experimentellen Fakten (*)

Wir werden nun die entscheidenden experimentellen Fakten kennenlernen, die klar machen, dass die klassische Mechanik zu einer umfassenderen Mechanik erweitert werden muss. Diese Fakten geben auch bereits deutliche Hinweise, wie diese Erweiterung zu einer Quantenmechanik erfolgen muss. Bei der Auswahl dieser Fakten und der Reihenfolge ihrer Behandlung werde ich mich nicht streng an den historisch entscheidend gewesenen Experimenten orientieren, sondern ich werde versuchen, die logische Zwangsläufigkeit dieses Weges auf Basis der *heute bekannten experimentellen Fakten* aufzuzeigen. Wo immer mir das eindeutig bekannt ist, werde ich die jeweiligen Erstpublikationen zu diesen Fakten nennen, um den Leser zu motivieren, diese Originalarbeiten einmal zu lesen und die darin gegebene Darstellung mit der heutigen Sicht der Dinge zu vergleichen.

7.2.1 Quantisierung ruhemasseloser Strahlung (*)

Bereits in den Jahren 1899 bis 1902 zeigte *Philipp Lenard* (* 1862 in Preßburg, heute Bratislava/Slowakei; † 1947 in Messelhausen/heute Stadtteil v. Lauda-Königshofen (Hessen)), dass bei der Bestrahlung einer geeigneten Festkörperoberfläche mit Licht freie Elektronen aus der Oberfläche *heraus geschlagen* werden. Er erkannte insbesondere, dass nicht etwa die Intensität des Bestrahlungslichtes darüber entscheidet, ob dieser Prozess überhaupt möglich ist, sondern dessen Frequenz,

$$f < f_0 \Rightarrow \frac{dN_{\text{Elektronen}}}{dt} = 0 \quad (7.8)$$

([1]). In der Literatur der Atomphysik und der Quantenmechanik wird die Frequenz meist mit dem Buchstaben ν gekennzeichnet. Ich habe mich entschlossen, auch in diesen Teilen des Buches (wie ganz selbstverständlich z.B. in der Mechanik und der Elektrotechnik) bei dem Buchstaben f zu bleiben.

Dieser Effekt wird heute als photo-elektrischer Quanteneffekt bezeichnet. Mit Hilfe einer Gegenspannungsanordnung konnte Lenard die Energieverteilung dieser

Elektronen sehr genau messen. Es zeigte sich, dass die kinetische Energie der erzeugten freien Elektronen ausschließlich von der Frequenz des Bestrahlungslichtes abhängt,

$$E_{kin} = E_{kin}(f) \quad (7.9)$$

während die *Intensität* des Lichtes die *Anzahl* der pro Zeiteinheit erzeugten freien Elektronen bestimmt. Dieses experimentelle Ergebnis lässt sich im Rahmen der klassischen Mechanik und Elektrodynamik nur durch komplex strukturierte Zusatzannahmen erklären. So vermutete Lenard, dass die kinetische Energie der erzeugten Elektronen nicht aus der Bestrahlungsenergie selbst stammt, sondern von einer anderen noch unbekanntem Quelle geliefert wird. Eine logisch einfach strukturierte, aber das damalige Bild der Physik revolutionierende Deutung besteht in der Annahme, dass dem elektromagnetischen Strahlungsfeld Energie nicht in beliebig feiner Abstufung entnommen werden kann, sondern ausschließlich in Einheiten (*Quanten*) der Größe

$$\varepsilon = h \cdot f \quad (7.10)$$

Außerdem muss angenommen werden, dass alle Prozesse, bei denen dem Strahlungsfeld ein Vielfaches dieser Quantelungseinheit $h \cdot f$ auf einmal entnommen wird, also alle *Mehrquanten-Prozesse* wesentlich seltener sind als der sog. *Ein-Quanten-Prozess*. Diese Deutung wurde als erstes von *Albert Einstein* (* 1879 in Ulm; † 1955 in Princeton/USA) im Jahr 1905 vorgeschlagen ([3]). Die kinetische Energie der bei dem Lenardschen Experiment erzeugten freien Elektronen beträgt dann

$$E_{kin} = h \cdot f - E_0 \quad (7.11)$$

h : eine neue universelle Konstante

f : Frequenz des Bestrahlungslichtes

E_0 : eine materialabhängige Konstante

Üblicherweise formuliert man das Quantelungspostulat derart, dass das Strahlungsfeld aus einer Anzahl N dieser als *Photonen* bezeichneten Quantelungseinheiten *besteht*. Prozesse mit anderen physikalischen Objekten bestehen dann in der Absorption oder Emission eines derartigen Photons. Es liegt nahe, sich diese Photonen als Teilchen vorzustellen, insbesondere da sie zusammen mit der Energie auch immer eine bestimmte Menge an Impuls austauschen (s. Abschnitt 7.9.4).

Elektromagnetische Strahlung verhält sich demnach in einer gewissen Klasse von Experimenten, insbesondere bei Interferenz-Experimenten, wie eine klassische Wellenerscheinung. In anderen Experimenten dagegen zeigt sie ein Verhalten, das wir üblicherweise bei einem Ensemble aus klassischen Teilchen erwarten. Wie sich zeigen wird, ist es jedoch nicht möglich, einzelne dieser Teilchen der elektromagnetischen Strahlung zu lokalisieren, d.h. ihren einem bestimmten Zeitpunkt t zugeordneten Ort \vec{r} anzugeben.

7.2.2 Interferenz ruhemasse-behafteter Teilchen (*)

Eine zweite Klasse von Experimenten führte zu ähnlich spektakulären Ergebnissen, so dass sie ebenfalls das bis dahin akzeptierte physikalische Weltbild in seinen Fundamenten erschütterten. Ich meine damit die Streuexperimente mit kleinen Teilchen, deren Messergebnisse zeigten, dass derartige Teilchen unter geeigneten Bedingungen miteinander *interferieren* können! Derartige Experimente gelangen als erstes mit Elektronen (1927 durch Clinton Joseph Davisson (* 1881 in Bloomington/USA. † 1958 in Charlotteville/USA) und Lester Halbert Germer (* 1896 in Chicago/USA; † 1971 in Gardiner/USA) ([4]), später auch mit Neutronen (1936 durch *Dana P. Mitchell* (XXX Biographie) und *Philip N. Powers* (XXX Biographie) ([5]) sowie durch *Hans. v. Halban* (* 1908 in Leipzig; † 1964 in Paris) und *Peter. Preiswerk* (* 1907 in Basel; † 1972 in Meyrin b. Genf) ([6]), mit Protonen (XXX: präzisieren) sowie mit ganzen Atomen (z.B. mit Wasserstoff und mit Helium 1930 durch *Otto Stern* (* 1888 in Sohrau/Oberschlesien (heute Polen); † 1969 in Berkeley/Cal.(USA)) ([7]). Die bisher (2012) massereichsten Objekte, mit denen es gelang, Interferenzexperimente durchzuführen, sind sog. *Fullerene*, kugel- oder besser fußballförmige Moleküle aus im nachfolgend zitierten Fall 60 Kohlenstoffatomen ([8]).

Die Abb. 1 zeigt das Prinzip des experimentellen Aufbaus von Davisson und Germer ([4]) und eines der von ihnen publizierten Ergebnisse: Elektronen mit einer

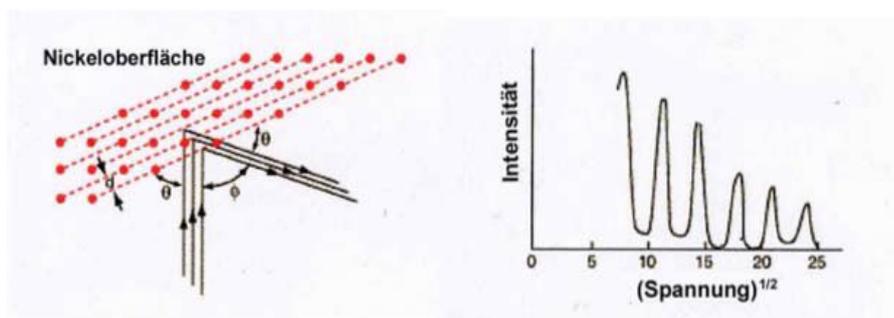


Abb. 1 Beugung von Elektronen an einem Nickel-Einkristall
(Prinzipskizze von Aufbau und Ergebnis der Experimente von Davisson und Germer)

engen Geschwindigkeitsverteilung und einem im Bereich einiger eV bis zu einigen $100 \cdot eV$ vorgebbaren Mittelwert wurden auf einen Nickel-Einkristall gelenkt und die gestreuten Elektronen detektiert. Für bestimmte Kombinationen von Streuwinkel und Elektronen-Geschwindigkeit ergaben sich gut ausgeprägte Intensitäts-Maxima. Ein derartiges Verhalten ist im Rahmen der klassischen Physik ausschließlich auf Wellenphänomene beschränkt. Die Möglichkeit der Interferenz von Strahlung aus ruhemasse-behafteten Teilchen wurde durch *Louis Victor de Broglie* (* 1892 in Dieppe; † 1987 in Louveciennes/Paris) bereits 1924 im Rahmen seiner Dissertation ([9]) als Hypothese theoretisch begründet. Er gab hierin auch bereits den Zusammenhang

zwischen dem Impuls eines Teilchens und seiner Wellenlänge explizit an:

$$\lambda = \frac{h}{P} \quad (7.12)$$

In den Experimenten von Davisson und Germer zeigte sich nun, dass die Kennwerte der Intensitäts-Maxima verträglich waren mit dem Konzept der Laue-Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen (s. Abschnitt 13.2.2), sobald man als Wellenlänge der hier benutzten "Strahlung" den Wert verwendet, den man unter Verwendung der jeweiligen Beschleunigungsspannung über die Gl. 7.12 ausrechnet.

Diese neuen, in den Abschnitten 7.2.1 und 7.2.2 skizzierten experimentellen Fakten werden zusammengenommen als *Welle-Teilchen-Dualismus* bezeichnet. Spätestens ab 1927 stand also fest, dass die klassische Mechanik zu einer neuen Theorie der Mechanik erweitert werden musste, die dann die klassischen massebehafteten Teilchen und die kontinuumsmechanischen Wellenerscheinungen als Grenzfälle enthält. Weshalb es sinnvoll ist, ausgerechnet die Ruhemasse $m(\vec{v} = 0)$ (s. Abschnitt 3.3.3) der involvierten Teilchen zur Unterscheidung dieser beiden Grenzfälle zu verwenden, werden wir erst später verstehen.

7.2.3 Die Stabilität der Atome (*)

Bereits seit etwa 1910 war durch eine Vielzahl von Experimenten insbesondere aus dem Bereich der Elektrolyse, der Gasentladungen und Kathodenstrahlen sowie der Streuung von Elektronen und α -Strahlen an Metallfolien gesichert, dass die Grundbausteine der makroskopischen Materie, die *Atome*, aus (zumindest) 3 verschiedenen Arten von *Elementarteilchen* aufgebaut sind, den elektrisch positiv geladenen *Protonen*, den elektrisch neutralen *Neutronen* sowie den elektrisch negativ geladenen *Elektronen*. Die Aussage, hieraus *aufgebaut* zu sein, bedeutet, dass man einerseits durch Zusammenfügen dieser Elementarteilchen die entsprechenden Atome erzeugen kann, und dass andererseits bei der Zerstörung oder Umwandlung von Atomen diese Elementarteilchen wieder als isolierte Teilchen entstehen. Die Masse eines einzelnen Protons und die eines Neutrons sind etwa gleich, die Masse des Elektrons ist etwa um den Faktor 1800 geringer. Die elektrische Ladung des Protons und des Elektrons sind bis auf das Vorzeichen identisch. Das Neutron trägt keine elektrische Ladung. Zur Gewährleistung der elektrischen Neutralität eines jeden Atoms ist die Anzahl der Elektronen immer gleich der der Protonen. Zusätzlich enthält jedes einzelne Atom noch eine gewisse Anzahl von Neutronen. Dieser Zahlenwert ist in etwa gleich dem der Protonen, er kann aber von diesem Wert um gewisse Beträge nach oben und nach unten abweichen. Ist die Abweichung zu groß, so ist das derart aufgebaute Atom nicht mehr stabil, es zerfällt mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit von selbst in gewisse Bruchstücke. Atome mit gleicher Anzahl von Protonen, aber ungleicher Anzahl von Neutronen bezeichnet man als *Isotope* (desselben Elementes s.u.). Da die chemischen Eigenschaften eines Atoms ausschließlich durch die Anzahl seiner Elektronen (und damit der seiner Protonen) festgelegt sind (s. Abschnitt 7.13.2), ordnet man alle stabilen Isotope mit der gleichen Anzahl von Protonen demselben *chemischen Element*

zu. Auf der Erde natürlich vorkommende chemische Elemente bestehen immer aus annähernd derselben Mischung von Isotopen. Zur weiteren Systematik des Aufbaus der Atome s. Abschnitt 7.13.1.

Das am einfachsten aufgebaute Isotop ist das Wasserstoff-Isotop H_1^1 (in dieser in der Atomphysik üblichen Schreibweise kennzeichnet der untere Index die Anzahl der Protonen und der obere die Summe aus Protonen- und Neutronenzahl) mit genau einem Proton und einem Elektron. An seinem Beispiel werden wir die Problematik diskutieren, die uns im Zusammenhang mit dem Aufbau der Quantenmechanik interessiert: Da das chemische Element Wasserstoff real existiert und zu über 90·% aus diesem Isotop besteht, ist dessen Stabilität gesichert. Es besteht aber aus 2 elektrisch entgegengesetzt geladenen, also einander anziehenden Teilchen. Was also hindert diese Teilchen daran, bis zu ihrer gegenseitigen Zerstörung ineinander zu stürzen? Aus der experimentell bestimmten Bindungsenergie von $13,6 \cdot eV$ kann man vielmehr über die Gl. 4.168 einen effektiven Abstand der beiden elektrischen Ladungen von $0,1 \cdot nm$ abschätzen. Welche geheimnisvolle Wechselwirkung hält Elektron und Proton auf diesem Minimalabstand? Solange wir uns im Rahmen der klassischen Physik bewegen, stehen wir also vor dem Problem, dass wir nicht einmal mehr die Stabilität der Atome erklären können! Auch die Annahme einer Rotation des Elektrons um das Proton, bei der sich dann dessen elektrostatische Anziehung und die mechanische Fliehkraft die Waage halten würden, scheidet als Erklärung aus. Denn jede beschleunigte Bewegung einer Ladung - und eine Kreisbewegung ist eine beschleunigte Bewegung - ist mit der Emission von elektromagnetischer Strahlung verbunden (s. Abschnitt ??) (XXX: präzisieren). Dieses planeten-ähnliche System aus Proton und umkreisendem Elektron wäre daher ebenfalls nicht stabil, sondern würde wieder mit dem Kollaps enden.

Die gesuchte zusätzliche Wechselwirkung ist die sog. *Lokalisationsenergie*. Ihre Existenz ist logisch ganz eng mit der in einem der nachfolgenden Abschnitte diskutierten Unschärferelation der Quantenmechanik verknüpft. Jedes mechanische Teilchen, also jedes mit Linearimpuls versehene physikalische Objekt (s. Abschnitt 3.3.3) lässt sich nur unter Energieaufwand auf ein vorgegebenes Volumen einengen, und diese Energie nimmt mit abnehmendem Volumen und mit abnehmender Masse des Teilchens stark zu. Es ist diese Lokalisationsenergie, die bei jedem Wasserstoffatom einer weiteren Annäherung von Elektron und Proton ein Ende setzt, weil nämlich diese Annäherung gleichzeitig eine stärkere Lokalisierung insbesondere des Elektrons bewirken würde. Der Gleichgewichtszustand ergibt sich aus der Bedingung nach den Minimum der Summe aus elektrostatischer und Lokalisationsenergie. Ohne dass wir schon über Informationen verfügen über den konkreten Zusammenhang zwischen der Lokalisationsenergie und dem Lokalisationsvolumen, dürfen wir zur Orientierung annehmen, dass sich im Gleichgewicht die beiden beteiligten Energieformen in etwa die Waage halten. Auf diese Weise schätzen wir also nun den Durchmesser des Wasserstoffatoms ($= 2 \cdot \langle \text{mittlerer Abstand Proton-Elektron} \rangle$) ab zu

$$D(H_1^1) \approx 0,1 \cdot nm \quad (7.13)$$

Dieser Wert entspricht bereits sehr gut dem aktuell als richtig angesehenen Wert von

$$D(H_1^1)_{\text{Lit.}} = 0,08 \cdot nm \quad (7.14)$$

7.2.4 Die statistische Natur physikalischer Messergebnisse (*)

Als nächstes möchte ich ein experimentelles Faktum diskutieren, das bereits in den Messdaten der in den Abschnitten 7.2.1 und 7.2.2 erläuterten Experimente enthalten ist, aber unbedingt einer separaten Behandlung bedarf. Betrachten wir z.B. das in der Abb. 1 skizzierte Elektronenstreuexperiment, so können wir das Messsystem für die in der Detektionsebene ankommenden Elektronen als System zur Messung der Koordinaten (x, y) desjenigen Punktes auffassen, an dem jedes einzelne Elektron diese Ebene durchdringt. Wenn wir nun die Intensität des Elektronenstrahls soweit reduzieren, dass die zeitliche Auflösung des Messsystems ausreicht, um nahezu jedes einzelne Elektron auch wirklich separat zu vermessen, so werden wir keineswegs immer denselben Messwert (x, y) erhalten, sondern ständig unterschiedliche Werte (x_i, y_i) . Nach genügend häufiger Wiederholung dieser Einzelmessungen wird sich dann jedoch immer wieder annähernd dieselbe relative Häufigkeit dieser Werte einstellen, nämlich die in der Abb. 1 wiedergegebene Kurve. Diese statistische Natur einer jeden Einzelmessung ist ein grundlegendes Faktum der im Mikrokosmos beobachtbaren neuen Mechanik. Dieses Faktum wird uns auch im Kapitel 7.3 entscheidend helfen, die richtige logische Struktur dieser Mechanik aufzuspüren. Zumindest in den Anfangsjahren der Quantenmechanik hat dieses statistische Element der neuen Theorie eine Menge an Verwirrung gestiftet und viele Zweifler auf den Plan gerufen. Selbst Einstein konnte sich ein Leben lang mit diesem Aspekt nicht abfreunden. Sein mehrfach als authentisch belegter (s. [10]), erstmals 1926 formulierter Ausspruch *Gott würfeln nicht* dokumentiert die tief sitzenden Zweifel, die Einstein am Konzept der Quantenmechanik hatte. Ich bin der Auffassung, dass bei konsequenter Anwendung der Postulate dieser Theorie die Undeterminiertheit auf einen ganz bestimmten und sehr eingeschränkten Teilaspekt eingegrenzt ist, so dass im Grunde alles Wesentliche sehr wohl festgelegt ist. Ich werde hierauf noch mehrfach zurückkommen, s. insbesondere Abschnitt 7.5.

7.2.5 Die Unschärferelation (-)

Wir werden nun die physikalische Ursache für das Auftreten der im Abschnitt 7.2.3 skizzierten Lokalisationsenergie strenger fassen und gleichzeitig verallgemeinern. Das dabei relevante Grundphänomen ist eine in der klassischen Mechanik auch vorhandene, aber mit geringerer Tragweite verbundene Verknüpfung von jeweils zwei zu einander gehörenden Variablen. Diese paarweise Zugehörigkeit wird als *kanonisch konjugiert* (wörtlich übersetzt *im Gleichklang einander zugeordnet*) bezeichnet. Wir erhalten diese Paare von Variablen, indem wir die in der *Dynamischen Mechanik* (Kapitel 3.3) auftretenden Ausdrücke für die jeweiligen Energieformen formal mit

der Zeiteinheit dt durchmultiplizieren,

$$\begin{aligned} dE \cdot dt &= \vec{v} * d\vec{P} \cdot dt + \vec{\omega} * d\vec{L} \cdot dt + \dots \\ &= \vec{dr} * d\vec{P} + d\vec{U} * d\vec{L} + \dots \end{aligned} \quad (7.15)$$

Diese Ausdrücke haben alle die Dimension *Energie · Zeit* und bestehen jeweils aus einer extensiven dynamischen Größe X_i , die überdies häufig einen Erhaltungssatz erfüllt, und einer kinematischen Größe ξ_i , die also unmittelbar mit der Definition des Ortsraumes verknüpft ist. Insbesondere in der Quantenmechanik wird diese Dimension *Energie · Zeit* als *Wirkung* bezeichnet. Eine fundamentale Aussage der Quantenmechanik ist nun der 1927 von *Werner Karl Heisenberg* (* 1901 in Würzburg; † 1976 in München) aufgestellte

Theorem 142 *In jedem Zustand eines physikalischen Systems ist das Produkt aus der Unschärfe zweier zu einander kanonisch konjugierter Variablen nach unten beschränkt:*

$$\Delta X_i \cdot \Delta \xi_i \geq \hbar \quad (7.16)$$

Die in dieser Beziehung auftretenden Werte für die *Unschärfe* einer Größe erhalten ihre Bedeutung aus der statistischen Natur eines jeden Messergebnisses: Sie sind der Erwartungswert für die Abweichung eines einzelnen Messwertes von dem Mittelwert dieser Größe. Die Naturkonstante \hbar von der Dimension einer Wirkung ist das bereits mehrfach erwähnte, nach *Max Karl Ernst Ludwig Planck* (* 1858 in Kiel (damals Dänemark); † 1947 in Göttingen) benannte *Plancksche Wirkungsquantum**. Planck führte diese Größe ein bei seinen grundlegenden Arbeiten zur Thermodynamik der elektromagnetischen Strahlung, s. Abschnitt 8.5.2. Die Gl. 7.16 wird heute als die *Heisenbergsche Unschärferelation* bezeichnet.

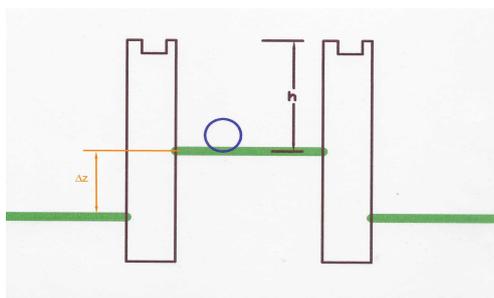
Ein weiteres experimentelles Faktum, das auf direktem Weg zur Unschärferelation führt, ist die sog. natürliche Linienbreite der Emissionslinien der Atomspektren (s. Abschnitt 7.13.3). Wenn man alle weiteren Effekte ausschaltet, die zu einer Verbreiterung dieser Linien führen (Dopplerverbreiterung bei endlicher Temperatur etc.), verbleibt eine Unschärfe dieser Linien entsprechend der Beziehung

$$\begin{aligned} \Delta E &= \hbar \cdot \Delta\omega = \frac{\hbar}{\tau} \\ \tau &: \text{mittlere Lebensdauer des angeregten Zustands} \end{aligned} \quad (7.17)$$

Für diese Situation ist also die Beziehung

$$\Delta E \cdot \tau \approx \hbar \quad (7.18)$$

*In der Literatur werden neben einander die Größen \hbar und $h = \hbar \cdot 2\pi$ benutzt und in beiden Fällen als *Plancksches Wirkungsquantum* bezeichnet. Ich werde bis auf wenige Ausnahmen ausschliesslich \hbar verwenden.

Abb. 2 Teilchen der Masse m in einem Graben der Höhe h .

erfüllt, die nichts anderes ist als die Unschärferelation. Um Emissionsspektren mit extrem niedriger Linienbreite zu erhalten, muss man daher angeregte Zustände herstellen mit sehr **langer** Lebensdauer (s. hierzu Abschnitt 7.13.3).

Wir erweitern nun die Aussagekraft der Unschärferelation, indem wir den Fall näher betrachten, in dem eine der beiden Unschärfeausdrücke verschwindet, diese Größe also *scharf* wird. Dann muss notwendig die Unschärfe der zu dieser Größe kanonisch konjugierten Größe beliebig groß werden,

$$\Delta X_i = 0 \Rightarrow \Delta \xi_i \rightarrow \infty \quad (7.19)$$

Wir erweitern nun (ohne Beweis) diese Aussage dahin gehend, dass diese Gl. 7.19 auch in der umgekehrten Richtung gilt: Wird die Unschärfe einer Größe beliebig groß, dann verschwindet die Unschärfe der zu dieser Größe kanonisch konjugierten Größe,

$$\Delta \xi_i \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta X_i = 0 \quad (7.20)$$

Diese Aussage wird uns beim Aufbau der Theorie der Quantenmechanik gute Dienste leisten.

7.2.6 Der Tunneleffekt (*)

Ein (makroskopischer) Körper der Masse m , der in dem (torlosen) Innenhof einer Burg liegt, die von einer Burgmauer der Höhe h umgeben ist (s. Abb. 2), kann diesen Innenhof nur verlassen, wenn ihm die (Aktivierungs-)Energie $M \cdot g \cdot h$ zugeführt wird. Dies gilt unabhängig davon, auf welchem Höhenniveau sich der Boden **jenseits** der Burgmauer befindet, also auch, wenn dieser Boden tiefer liegt als die Burg, wenn also der Körper durch den Transfer vom Burghof in den Außenbereich Energie gewinnen würde. Ohne äußere *Hilfe* bleibt er daher auf Dauer in dieser Burg eingesperrt. So zumindest verlangt es die klassische Mechanik. Um so überraschender war es festzustellen, dass in einer analogen Situation im Mikrokosmos das Teilchen sehr wohl und ohne *äußere Hilfe* die Burg verlassen kann, sobald nur $\Delta z > 0$ ist, der Boden außerhalb der Burg tiefer liegt als der Innenhof der Burg. Es kann, wie man sagt, die Burgmauer *durchtunneln*, und man findet es plötzlich

außerhalb der Burg und mit der kinetischen Energie $M \cdot g \cdot \Delta z$ (s. wieder Abb. 2) versehen wieder. Für den experimentellen Nachweis dieses Tunneleffektes lässt sich kein *erstes Experiment* angeben. Historisch betrachtet gab es Anfang der 20-er Jahre eine ganze Reihe von seit längerem bekannten experimentellen Fakten, deren widerspruchsfreie theoretische Deutung erst durch Annahme dieses Tunneleffektes gelang. Dies gilt insbesondere für den bereits 1896 durch *Antoine Henri Becquerel* (* 1852 in Paris; † 1908 in Le Croisic(Loire-Atlantique)) an (natürlichem) Uran experimentell gefundenen α -Zerfall der Atomkerne (Absatz S. 774). Diesen Effekt deuteten erstmals 1928 *Edward Uhler Condon* (* 1902 in Alamogordo/N.Mex.(USA); † 1974 in Boulder/Col.(USA)) und *Ronald Wilfried Gurney* (* 1898 in England; † 1953 in den USA) (XXX: präzisieren) sowie unabhängig von ihnen *George Gamow* (* 1904 in Odessa/damals Russland; † 1968 in Boulder/Col.(USA)) als **Tunneleffekt** der im Atomkern latent vorhandenen α -Teilchen (= Heliumkerne He_2^4) durch die Potenzialbarriere des Atomkerns hindurch in das Kontinuum ([12], [13]). Weitere Beispiele für durch den Tunneleffekt bedingte Phänomene sind die sog. *kalte* Emission von Elektronen aus Metallen, die bereits 1927 von *Lothar Wolfgang Nordheim* (* 1899 in München; † 1985 in La Jolla/Cal.(USA)) und von *Sir Ralph Howard Fowler* (* 1889 in Roydon/Essex(UK); † 1944 in Cambridge, UK) als quantenmechanischer Tunneleffekt gedeutet wurde ([14]), und - als ein etwas moderneres Beispiel - der sog. *Zener-Effekt*. Hierunter versteht man das in einem halbleitenden Festkörper unter gewissen Bedingungen der Bandstruktur mögliche Tunneln von Elektronen aus dem Valenzband in das Leitfähigkeitsband (s. Abschnitt 9.3).

Wir werden bald verstehen, dass der Tunneleffekt eine zwangsläufige Folge des Konzeptes der Quantenmechanik ist.

7.2.7 Die Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen (*)

Zur Erläuterung der nun zur Diskussion stehenden Problematik betrachten wir folgendes Gedankenexperiment:

In einen Kasten mit N unterscheidbaren, z.B. durchnummerierten Fächern, die jeweils nur eine Kugel aufnehmen können, werden genau N ebenfalls unterscheidbare, z.B. mit einer Buchstabenmarkierung versehene Kugeln gelegt. Dann beträgt die Anzahl der möglichen unterscheidbaren Belegungen (s. Abschnitt 7.4.10)

$$g = N! \quad (7.21)$$

Dieses System besitzt also $N!$ unterscheidbare Zustände, die alle die oben genannte Bedingung (N Kugeln in N Fächern) erfüllen. Sind dagegen die Kugeln nicht unterscheidbar, gibt es nur

$$g = 1 \quad (7.22)$$

Zustand des Systems.

Nun entspricht diese Situation aber genau derjenigen einiger realer physikalischer Systeme bei der Temperatur $0^\circ K$, z.B. einem sog. *idealen Fermigas*, benannt nach *Enrico Fermi* (* 1901 in Rom; † 1954 in Chicago), vgl. Abschnitt 8.4.7, also

z.B. einer Anzahl N von Elektronen, die in einen Kasten eingesperrt sind. Wie wir später lernen werden (s. wieder Abschnitt 8.4.7), muss sich dann jedes dieser Elektronen in einem anderen (1-Teilchen-)Zustand befinden, so dass im Zustand minimaler Gesamtenergie diese Elektronen die ersten N energieärmsten Zustände einnehmen. Diese Zustände - und nicht etwa der oben genannte Kasten, in dem diese Elektronen eingesperrt sind - bilden nun das Analogon zu dem im obigen klassischen Beispiel genannten Kasten, in das die Kugeln gelegt werden konnten. Es stellt sich daher nun die Frage, ob dieses System von N Elektronen im makroskopischen Zustand minimaler Energie eine endliche Anzahl von quantenmechanischen Zuständen gem Gl. 7.21 besitzt oder nur genau einen. Diese Anzahl von Zuständen ist aber unmittelbar mit der Entropie verknüpft (s. Abschnitt 8.4.2). Es genügt also, die Entropie dieses Systems bei der Temperatur $0^\circ K$ zu messen, um eindeutig zwischen den beiden Möglichkeiten zu unterscheiden. Ergebnis dieses Typs von Messungen ist die aus historischen Gründen als *3. Hauptsatz der Thermodynamik* bezeichnete Aussage (s. Abschnitt 8.4.3), dass nämlich die Entropie *nicht entarteter Systeme* bei Annäherung an die Temperatur $T = 0$ gegen 0 geht. (Was es mit dieser Einschränkung auf sog. nicht entartete Systeme auf sich hat, muss uns an dieser Stelle nicht näher interessieren.) Damit ist experimentell gesichert, dass identische Teilchen, die sich in demselben physikalischen Zustand befinden, bei denen also alle physikalischen Variablen denselben Wert haben, **ununterscheidbar** sind. Und es kann auch nicht unterschieden werden, ob *das erste* Teilchen im Zustand A ist und *das zweite* im Zustand B oder umgekehrt (s. hierzu auch Aufgabe 13 aus Heft 8). Diese Aussage der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen ist vielleicht manchem Leser vordergründig und intuitiv unmittelbar einsichtig. Dennoch ist zu befürchten, dass er trotzdem bei jedem einzelnen Teilchen *einen Rest von individueller Identität* vermutet, zwei in einem System befindliche Teilchen also für letztlich doch *irgendwie unterscheidbar* hält. Dieses trifft aber nicht zu, d.h. jede Annahme, die eine Unterscheidung dieser beiden Teilchen ermöglichen würde, muss falsch sein! Letztendlich kann man die Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen dahin gehend umformulieren, dass die Teilchenzahl eine ganz normale extensive Variable ist wie z.B. das Volumen V oder die Entropie S . Auch bei ihnen ist eine Zuordnung der aktuellen Werte von V oder S auf individualisierte Untersysteme nicht möglich.

Die konsequente Berücksichtigung dieses Postulats hat, wie wir noch sehen werden (Kapitel 7.8), sehr weitreichende Konsequenzen beim Aufbau der Quantenmechanik.

7.2.8 Das Korrespondenzprinzip (*)

Ein für die Konzipierung der neuen Mechanik ebenfalls sehr wichtiges und hilfreiches experimentelles Faktum ist die Tatsache, dass die Newtonsche Mechanik sich in der makroskopischen Welt - die bei ausreichend hohen Geschwindigkeiten auftretenden relativistischen Effekten sollen uns hier nicht interessieren - perfekt und ohne Ausnahme im Einklang mit den experimentellen Fakten befindet. Die neue Mechanik

kann also nicht einfach losgelöst von der Newtonschen Mechanik entwickelt werden, sondern sie muss diese als asymptotische Näherung enthalten. Welches die charakteristische Größe ist, die darüber entscheidet, ob diese Näherung in einem konkreten Einzelfall noch verwendet werden darf, gilt es noch zu ergründen, s. hierzu insbesondere Kapitel 7.10. Im analogen Fall der Einbindung der Newtonschen Mechanik in die relativistische Mechanik ist dies die Bedingung

$$v \ll c_0 \quad (7.23)$$

Diese Forderung der Einbindung der Newtonsche Mechanik als Grenzfall der neuen Mechanik wird als *Korrespondenzprinzip* bezeichnet.

7.3 Die Grundstruktur der Quantenmechanik (*)

Wir wollen nun die im Kapitel 7.2 skizzierten experimentellen Fakten verwenden, um daraus schrittweise ein logisches Konzept der Quantenmechanik zu entwickeln. Dabei werden wir, wie bereits angedeutet, diese Fakten in leicht abgeänderter Reihenfolge benutzen. Beginnen werde ich mit einigen Erläuterungen zum Begriff der *Messung*. Im Bereich der klassischen Physik ist man gewohnt, dass die grundsätzliche Bedeutung dieses Prozesses keiner Erklärung bedarf: Bei der Messung einer Größe an einem physikalischen Objekt bestimmt man den Wert, den diese Größe bei diesem Objekt aktuell angenommen hat. Und man wählt das dafür erforderliche Messverfahren derart aus, dass sich der Zustand des Objektes möglichst nicht verändert. Man kann z.B. die Geschwindigkeit eines Fahrzeugs durch eine Lichtschrankentechnik sehr präzise bestimmen, ohne dass sich hierbei die Geschwindigkeit des Fahrzeugs messbar verändert. Diese Situation verändert sich nun von Grund auf beim Übergang in den von der neuen Mechanik bestimmten Teil unserer realen Welt: Jede Messung einer physikalischen Größe verändert nun das vermessene Objekt, und zwar nicht nur geringfügig im Sinne einer Störung, sondern substanziell! Wie diese Veränderung genau aussieht, werden wir erst im weiteren Verlauf dieses Abschnitts verstehen. Andererseits benötige ich aber bereits jetzt den Begriff der Messung, um die weiteren Gedankengänge zur Entwicklung der Theorie erläutern zu können. Ich komme also nicht darum herum, den Begriff der Messung Schritt für Schritt und gemeinsam mit der Begründung der übrigen Begriffsbildungen zu präzisieren.

Betrachten wir also nun die im Abschnitt 7.2.4 beschriebene experimentelle Erfahrung über die statistische Natur der Messergebnisse. Da der Wert einer physikalischen Größe \mathbf{P} , gemeint ist das Ergebnis einer einzelnen P -Messung, nicht mehr zwangsläufig für jeden Zustand des Systems einen bestimmten Wert P_0 annimmt, kann man die möglichen Zustände eines Systems offenbar in 2 Klassen einteilen, nämlich

1. in Zustände mit einem festen (*scharfen*) Wert von \mathbf{P} ; und
2. in Zustände, bei denen \mathbf{P} nicht scharf ist.

Die zur 1. Klasse gehörenden Zustände werden auch als *Eigenzustände*[†] zu \mathbf{P} bezeichnet. Wir müssen davon ausgehen, dass ein System i.a. mehr als nur einen Eigenzustand zu \mathbf{P} besitzt mit i.a. unterschiedlichen Werten P_i . Misst man nun die Größe \mathbf{P} an einem System, das sich in einem ganz bestimmten dieser Eigenzustände zu \mathbf{P} befindet, dem wir die lfd. Nr. i geben wollen, so erhält man in jedem Fall diesen Wert P_i . Misst man dagegen die Größe \mathbf{P} an einem System, das sich in einem Zustand befindet, der nicht Eigenzustand zu \mathbf{P} ist, so erhält man bei jeder Messung andere Werte P_k . Um Missverständnisse zu vermeiden, betone ich bereits dieser Stelle, dass die Ergebnisse einer P -Messung auch im Rahmen der neuen Theorie weiterhin reell sind.

Wir verwenden nun die Unschärferelation, insbesondere deren Erweiterung in Form der Gl. 7.19 und 7.20. Ein stationärer Zustand eines Systems ist definitionsgemäß ein solcher mit einer Lebensdauer $\tau \rightarrow \infty$. Da wir die Lebensdauer mit der Zeitunschärfe identifizieren dürfen, und da die Unschärfe von Energie und Zeit über die Unschärferelation mit einander verknüpft sind, gilt

$$\tau \rightarrow \infty \leftrightarrow \Delta E = 0 \quad (7.24)$$

Dies bedeutet, dass stationäre Zustände eines Systems zwangsläufig Eigenzustände zur Energie dieses Systems sind. Darüber hinaus gibt es i.a. weitere Größen X_i und/oder ξ_i , bzgl. derer die stationären Zustände eines Systems ebenfalls Eigenzustände sind. Wieviele derartige Größen es gibt und welche es sind, hängt von der physikalischen Natur des betrachteten Systems ab. Von besonderer Bedeutung sind hierfür dessen Symmetrieeigenschaften. Ähnlich wie in der klassischen Mechanik die Symmetrieeigenschaften der Theorie festlegen, welche physikalischen Größen einen Erhaltungssatz erfüllen (s. Abschnitt 3.2.6), so legen jetzt die Symmetrieeigenschaften eines physikalischen Systems fest, welche Größen in dessen stationären Zuständen gemeinsam mit der Energie scharf sind. Auf die Einzelheiten dieser Zusammenhänge werden wir u.a. bei der Behandlung einiger konkreter Beispiele (Kapitel 7.9) zurück kommen. Wir fassen die gerade formulierten Aussagen zusammen in dem

Axiom 11 *Ein abgeschlossenes System kann nur in Zuständen existieren, die gemeinsamer Eigenzustand sind zur Energie und zu einer wohl bestimmten, durch die physikalische Struktur des Systems vorgegebenen Menge weiterer physikalischer Größen.*

Eine Angabe der Werte, die diese physikalischen Größen in einem dieser Zustände des Systems annehmen, ist daher eine bereits recht genaue Beschreibung dieses Zustands. Sie kann jedoch noch nicht vollständig sein, da sie in dieser Form nur aus reellen Werten besteht. Aus der für alle Arten von physikalischen Systemen möglichen Interferenz folgt jedoch, dass jede vollständige Zustandsbeschreibung diesem Zustand

[†]Dieser Begriff stammt aus der mathematischen Disziplin der Linearen Algebra. Weshalb es Sinn macht, diese Zustände so zu bezeichnen, werden wir im Kap. 7.4 lernen.

auch eine Phase zuordnen muss. Die Zustandsbeschreibung muss also komplexwertige Größe enthalten. Wie dann aus dieser komplexwertigen Größe $|k\rangle^\ddagger$, deren genaue Form und Gestalt uns an dieser Stelle noch völlig unbekannt ist, der (immer reelle) Wert einer physikalischen Größe errechnet wird, werden wir erst im weiteren Verlauf dieses Kapitels verstehen. Es ist jedoch gesichert, dass diese Größe $|k\rangle$ alle Informationen enthält, die zur Berechnung der Werte aller oben genannten Größen in diesem Zustand nötig sind.

Aus der für alle Systeme möglichen Interferenz folgt außerdem das Superpositionsprinzip, also

$$\begin{aligned} |k\rangle, |l\rangle &\in \{\text{Zustände des Systems}\} \Rightarrow \\ \alpha \cdot |k\rangle + \beta \cdot |l\rangle &\in \{\text{Zustände des Systems}\} \quad \forall \alpha, \beta \in \hat{\mathbb{C}} \end{aligned} \quad (7.25)$$

Diese Linearkombinationen sind dann aber i.a. keine Eigenzustände mehr zu den im Axiom 11 genannten Größen.

Als nächstes stellt sich die Frage, ob es auch noch Zustände des Systems gibt, die sich nicht als Linearkombination dieser Eigenzustände darstellen lassen. Diese Frage lässt sich auf Basis der geschilderten experimentellen Fakten nicht beantworten. Wir formulieren die Antwort als ein weiteres Postulat der neuen Mechanik:

Axiom 12 *Jeder Zustand eines physikalischen Systems ist darstellbar als Linearkombination der Zustände, die simultane Eigenzustände sind zu dem im Axiom 11 definierten für dieses System typischen Satz von Größen.*

Das Superpositionsprinzip erklärt unmittelbar und zwangsläufig die Möglichkeit des Tunneleffektes: In dem im Abschnitt 7.2.6 skizzierten physikalischen System ist der Zustand, in dem das Teilchen vollständig innerhalb der Burg konzentriert ist, ein möglicher Zustand des Systems und ebenso ein Zustand, in dem es vollständig außerhalb der Burg ist. Das Superpositionsprinzip verlangt nun, dass dann ein Zustand, in dem das Teilchen z.B. je zur Hälfte innerhalb und zur Hälfte außerhalb der Burg ist, ebenfalls ein zulässiger Zustand ist, was immer auch diese Aufteilung im Einzelnen bedeuten mag. Aus den Tunnel-Experimenten können wir also keine zusätzlichen Informationen über die logische Struktur der zu entwickelnden neuen Mechanik extrahieren.

Dagegen wird uns die Unschärferelation erneut ein weiteres kräftiges Stück voranbringen. Wir betrachten nämlich jetzt ein Paar kanonisch konjugierter Variablen des Systems. Wenn nun eine dieser beiden Variablen nicht zu dem im Satz 11 definierten Satz von ausgewählten Variablen gehört, dann kann die andere auch nicht dazu gehören. In den stationären Zuständen des Systems sind daher deren Unschärfen beide $\neq 0$,

$$\Delta X_i < \infty \Rightarrow \Delta \xi_i > 0 \quad (7.26)$$

[‡]Ich benutze an dieser Stelle die auf P. Dirac zurückgehende *ket-Schreibweise* (von bracket, engl. die Klammer) eines Zustands, ohne darauf einzugehen, was das im einzelnen bedeuten soll. Eine logisch saubere Definition wird im Kap. 7.5 erfolgen.

Bei allein räumlich begrenzten Systemen erfüllen insbesondere die Variablen Ortskoordinate \vec{r} und Linearimpuls \vec{P} diese Bedingung:

$$|\Delta \vec{r}| < \infty \Rightarrow |\Delta \vec{P}| > 0 \quad (7.27)$$

Die stationären Zustände räumlich begrenzter Systeme sind daher nicht nur keine Eigenzustände zur Ortskoordinate, sondern auch **keine** Eigenzustände zum Linearimpuls! Unabhängig davon, ob sich das räumlich begrenzte System in einem stationären oder in einem nicht stationären Zustand befindet, bei einer Messung z.B. von \vec{r} werden wir in jedem Fall von Messung zu Messung stark unterschiedliche Werte \vec{r} erhalten. Bezeichnen wir die relative Häufigkeit, mit der ein bestimmter Werte \vec{r} erhalten wird, mit $w(\vec{r})$, so enthält diese Funktion bereits einen Großteil der über den betrachteten Zustand angebbaren Information. Und berücksichtigen wir an dieser Stelle erneut die Notwendigkeit, dass das System in der Lage sein muss, Interferenzeffekte zu zeigen, so liegt es nahe, die Existenz einer komplexwertigen Funktion

$$\psi(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)| \cdot e^{i\varphi(\vec{r}, t)} \quad (7.28)$$

zu postulieren, die den Zustand des Systems **vollständig** beschreibt, und deren Betragsquadrat mit der soeben eingeführten Funktion $w(\vec{r})$ identisch ist. Dieser Wert wird meist als *Aufenthaltswahrscheinlichkeit* bezeichnet. Ich finde diese Formulierung nicht besonders gelungen, da sie eine in der Theorie nicht vorkommende Bewegung des physikalischen Objektes suggeriert, als ob sich nämlich das betrachtete Teilchen ganz schnell im Ortsraum bewegen würde und daher zum Zeitpunkt der Messung an jedem herausgegriffenen Ort mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit gerade dort angetroffen wird. Es gibt aber keinerlei experimentelle Fakten, die diese Vorstellung stützen. *Stationäre Zustände sind Zustände ohne Bewegung.* Das einzige, was sich in Abhängigkeit der Zeit verändert, ist die Phasenfunktion $\varphi(\vec{r}, t)$. Solange das System sich in diesem stationären Zustand $\psi(\vec{r}, t)$ befindet und sich nicht mit anderen physikalischen Systemen überlagert, wird durch diese zeitliche Änderung der Phase nichts verändert, was sich durch eine nachfolgende Messung an diesem System nachweisen ließe. Wir können sogar noch einen Schritt weiter gehen: Da stationäre Zustände Zustände ohne Bewegung sind, darf in diesem Fall der Betrag der Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ nicht mehr explizit von der Zeit abhängen. Und da die geforderte Interferenzfähigkeit für das durch die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ beschriebene System **als ganzem** gelten muss und nicht nur für einen räumlichen oder zeitlichen Ausschnitt, kann andererseits die Phasenfunktion für stationäre Zustände nicht mehr vom Ort abhängen. D.h. die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ faktorisiert unter Trennung der Variablen \vec{r} und t und es gilt

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\varphi(t)} \quad (7.29)$$

Das Minuszeichen im Exponenten der e -Funktion entspricht der in der Literatur üblichen Konvention. Ich verwende an dieser Stelle ausnahmsweise für 2 verschiedene

Größen denselben Buchstaben, nämlich für die Größen $\psi(\vec{r}, t)$ und $\psi(\vec{r})$. Dies entspricht der Vorgehensweise in den meisten Lehrbüchern. Ich gehe davon aus, dass hierdurch keine Verwirrung auftreten wird. Wegen der Forderung nach der Interferenzfähigkeit jedes physikalischen Systems muss die Phasenfunktion $\varphi(t)$ in der Gl. 7.29 überdies eine ganz bestimmte Struktur haben, nämlich die einer zeitperiodischen Funktion

$$\varphi(t) = \omega \cdot t + \varphi_0 \quad (7.30)$$

Denn nur dann ist es z.B. möglich, dass 2 Funktionen $\psi_1(\vec{r}, t)$ und $\psi_2(\vec{r}, t)$ an einer Stelle \vec{r}_0 nicht nur kurzzeitig, sondern auf Dauer identisch verschwinden,

$$\psi_1(\vec{r}_0, t) \equiv \psi_2(\vec{r}_0, t) \quad \forall t \quad (7.31)$$

Wie die zugehörige Kreisfrequenz ω mit den übrigen Kenngrößen des Systems zusammenhängt, müssen wir erst noch ergründen.

Die als *Wellenfunktion* bezeichnete Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ hat eine verwandte Bedeutung wie die Teilchenanzahldichte $n(\vec{r}, t)$ in der klassischen Physik. Dort erhält man die Anzahl der in einem bestimmten Volumen ΔV zur Zeit t_1 befindlichen Teilchen durch Integration über dieses Volumen,

$$N(\Delta V, t_1) = \int_{\Delta V} n(\vec{r}, t_1) \cdot d^3r \quad (7.32)$$

Analog erhalten wir nun die Anzahl an Teilchen, die bei einer auf das Volumen ΔV beschränkten Messung *im Mittel* detektiert werden, ebenfalls durch Integration, allerdings nicht von $\psi(\vec{r}, t)$ sondern seines Betragsquadrates:

$$N(\Delta V, t_1) = \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t_1) \cdot \psi(\vec{r}, t_1) \cdot d^3r \quad (7.33)$$

Dadurch ist insbesondere sicher gestellt, dass das Ergebnis immer reell ist. Handelt es sich bei dem betrachteten System um ein N_0 -Teilchen-System, muss gelten

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\vec{r}, t_1) \cdot \psi(\vec{r}, t_1) \cdot d^3r = N_0 \quad \forall t_1 \quad (7.34)$$

Zur Präzisierung und im Vorgriff auf die später erfolgende Behandlung komplizierterer Systeme wiederhole ich an dieser Stelle die Bedeutung und Anwendbarkeit dieser Funktion $\psi(\vec{r}, t)$: Sie kennzeichnet die komplexe Amplitude der Anzahlwahrscheinlichkeitsdichte eines physikalischen Systems aus N_0 Teilchen, das mit einer **einzigsten gemeinsamen derartigen Wellenfunktion** beschrieben werden darf. Was es mit dieser einschränkenden Formulierung auf sich hat, werden wir insbesondere im Abschnitt 7.8.2 erfahren. Gültig ist die einschränkende Bedingung insbesondere für Systeme mit $N_0 = 1$.

Es fehlt noch das Konzept, wie sich aus dieser Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ der Wert einer beliebigen physikalischen Größe in dem durch diese Funktion beschriebenen Zustand errechnen lässt. In der klassischen Mechanik bestimmt man die aktuellen Werte von physikalischen Größen wie Energie, Impuls etc., indem man geeignete kinematische, also aus der Bewegung des Objektes resultierende Parameter mit objektspezifischen Parametern über eine funktionelle Beziehung verknüpft. Diese Verknüpfung entspricht also einer Abbildung eines endlich dimensionalen Raumes \mathbb{R}^N in den \mathbb{R}^1 (im Fall einer skalaren physikalischen Größe) bzw. in den \mathbb{R}^3 (im Fall einer vektoriellen Größe). Z.B. beträgt die kinetische Energie eines bewegten klassischen punktförmigen Teilchens

$$E_{kin}(M, \vec{v}) = \frac{M}{2} \cdot v^2 \quad (7.35)$$

M : Masse des Teilchens

v : Geschwindigkeit des Teilchens

v ist hierbei der o.a. kinematische und M der objektspezifische Parameter. In der neuen Mechanik haben physikalische Größen \mathbf{P} i.a. keinen einzigen (scharfen) Wert mehr, es sei denn, das System befindet sich in einem Eigenzustand dieser Größe \mathbf{P} . Der Größe \mathbf{P} wird also nicht mehr eine reelle Zahl zugeordnet, sondern wiederum eine komplexwertige Funktion $\lambda(\vec{r}, t)$, genau so wie wir es bei der physikalischen Größe Ortskoordinate \mathbf{r} bereits kennengelernt haben. Für die Berechnungsvorschrift für \mathbf{P} im Zustand $\psi(\vec{r}, t)$ benötigen wir daher eine Abbildung[§] des i.a. unendlich-dimensionalen Raumes der komplexwertigen Funktionen $\{\psi(\vec{r})\}$ in den i.a. ebenfalls unendlich-dimensionalen Raum der komplexwertigen Funktionen $\{\lambda(\vec{r})\}$,

$$\bar{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t) = \lambda(\vec{r}, t) \quad (7.36)$$

Eine solche Abbildungsvorschrift bezeichnet man auch als einen *Operator*. Die Funktion $\bar{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t)$ hat dann wieder die Bedeutung einer Gewichtsfunktion, nun für die physikalische Größe \mathbf{P} . Im mathematischen Sinne sind diese beiden Funktionsräume $\{\psi(\vec{r})\}$ und $\{\lambda(\vec{r})\}$ identisch, und $\bar{\mathbf{P}}$ ist demzufolge eine Abbildung dieses Raumes in sich. Im physikalischen Sinne unterscheiden sich diese beiden Räume in der zugeordneten physikalischen Einheit, auf die sich die jeweiligen Funktionen beziehen. $\bar{\mathbf{P}}$ ist daher dimensionsbehaftet, seine Dimension ist gleich der Dimension von λ dividiert durch die Dimension von ψ . Wenn $\psi(\vec{r}, t)$, wie bisher angenommen, die Bedeutung einer Aufenthaltswahrscheinlichkeits-Amplitude hat, besitzt diese Funktion die Dimension

$$\left(\frac{\text{Teilchenanzahl}}{\text{Volumen}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.37)$$

[§]Die in Gl. 7.29 auftretende Variable t fassen wir als einen bei dieser Berechnung festgehaltenen Parameter auf.

Wenn andererseits $\overline{\mathbf{P}}$ beispielsweise der Impulsoperator ist, hat $\lambda(\vec{r}, t)$ die Dimension

$$\left(\frac{\text{Impuls}}{\text{Volumen}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.38)$$

Demzufolge hat also der Impulsoperator $\overline{\mathbf{P}}$ die Dimension

$$\left(\frac{\text{Impuls}}{\text{Teilchenzahl}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.39)$$

Zur Erleichterung des Verständnisses der hier dargestellten Zusammenhänge erinnern wir uns nochmals an eine verwandte Situation aus der klassischen Physik: In einem klassischen System mit einer über das Volumen kontinuierlichen Verteilung von Teilchen, beschrieben durch die lokale Teilchenanzahldichte $n(\vec{r}, t)$ sei z.B. nach der Verteilung der Energie gefragt. Dann kann man zunächst die Energie pro Teilchen $e = \frac{\delta E}{\delta N}$ bestimmen. Diese ist i.a. wieder eine Funktion von \vec{r} , z.B. weil das (lokal gemittelte) Geschwindigkeitsquadrat dieser Teilchen eine Funktion von \vec{r} ist. Die in einem bestimmten Volumen vorhandene Energie beträgt dann

$$E(\Delta V) = \int_{\Delta V} n(\vec{r}) \cdot e(\vec{r}) \cdot d^3 r \quad (7.40)$$

Analog zu dieser klassischen Begriffsbildung berechnet sich nun in der neuen Mechanik der Wert einer physikalischen Größe \mathbf{P} als

$$P(\psi, t; \Delta V) = \int_{\Delta V} \lambda^*(\vec{r}, t) \cdot \lambda(\vec{r}, t) \cdot d^3 r \in \mathbb{R}^1 \quad (7.41)$$

wobei die Funktion $\lambda(\vec{r}, t)$ gemäß der Gl. 7.36 berechnet wird. Der Wert dieses Integrals ist, unabhängig von der mathematischen Struktur des Operators $\overline{\mathbf{P}}$, immer reell! Erfolgt die Integration über das gesamte Volumen V_0 mit der Eigenschaft

$$\vec{r} \notin V_0 \Rightarrow \lambda(\vec{r}, t) \equiv 0 \quad (7.42)$$

so gilt

$$\int_{V_0} \lambda^*(\vec{r}, t) \cdot \lambda(\vec{r}, t) \cdot d^3 r = P_0(t) \quad (7.43)$$

$P_0(t)$ ist der Erwartungswert für die Messung der zur Zeit t insgesamt in dem System enthaltenen Menge an der physikalischen Größe \mathbf{P} .

In besonderen Fällen vereinfacht sich die Gl. 7.36 zu

$$\overline{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t) = p \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad ; \quad p \in \hat{\mathbf{C}} \quad (7.44)$$

D.h. der Operator $\overline{\mathbf{P}}$ reproduziert die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ bis auf den konstanten (i.a. komplexen) Streckungsfaktor p . Entsprechend vereinfacht sich die Gl. 7.41 zu

$$\begin{aligned} P(\psi, t; \Delta V) &= \int_{\Delta V} p^* \cdot \psi^*(\vec{r}, t) \cdot p \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \\ &= |p|^2 \cdot \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \end{aligned} \quad (7.45)$$

Zustände $\psi(\vec{r}, t)$ mit dieser Eigenschaft 7.44 bezeichnet man als *Eigenzustände* zum Operator $\overline{\mathbf{P}}$. In der Tat sind sie mit den bereits diskutierten Zuständen identisch, in denen diese Größe \mathbf{P} *scharf* ist. Den mathematisch sauberen Beweis für diese Behauptung werde ich noch im Laufe dieses Abschnitts liefern. Diese als *Eigenwertgleichung* bezeichnete Bedingung 7.44 ist jedoch i.a. nur für gewisse ausgezeichnete Zustände $\psi_i(\vec{r}, t)$ erfüllt, für die dann die reelle Zahl $|p|^2 = P$ jeweils ganz bestimmte Werte P_i annimmt. Auf diesem Wege also nimmt die *Quantisierung* Einzug in die Theorie der neuen Mechanik: Gehört die Größe \mathbf{P} zu dem durch das Axiom 11 definierten ausgezeichneten Satz von Variablen, so kann sie in stationären Zuständen des Systems nicht mehr (innerhalb gewisser Grenzen) beliebige, also kontinuierlich verteilte Werte annehmen, sondern nur noch ganz bestimmte, häufig diskret verteilte Werte.

Die bisher beschriebene Vorgehensweise bei der Konstruktion eines Operators $\overline{\mathbf{P}}$ entspricht einer Transformation von der *Ortsdarstellung* in die *P-Darstellung*. Sie ist durchaus üblich, meist wird jedoch die Berechnung der Werte physikalischer Größen anders vollzogen. Wenn man sich z.B. zur Beschreibung der Zustände für die Ortsdarstellung entschieden hat, will man auch bei der Berechnung der übrigen physikalischen Größen in dieser Ortsdarstellung verbleiben. Man fordert daher, dass gilt:

$$P(\psi, t; \Delta V) = \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \mathbf{P}\psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \quad (7.46)$$

Man sucht also einen Operator $\mathbf{P} \neq \overline{\mathbf{P}}$, der lediglich auf die Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ angewendet werden muss (und nicht auch noch auf $\psi^*(\vec{r}, t)$), um sodann über die Gl. 7.46 den korrekten Wert für P zu erhalten. Wir fassen diese Gl. 7.46 als eine **Forderung** auf; wir werden sie daher auch nicht versuchen zu beweisen, sondern uns hier darauf beschränken, eine wichtige Bedingung herzuleiten, die der neue Operator erfüllen muss, damit die Gl. 7.46 erfüllt werden kann. Hierbei konzentrieren wir uns sofort auf die Eigenzustände des Systems zu diesem neuen Operator \mathbf{P} :

$$\mathbf{P}\psi(\vec{r}, t) = P \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad (7.47)$$

Für diese Zustände wird die Gl. 7.46 zu

$$\begin{aligned} P(\psi, t) &= \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot P \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \\ &= P \cdot \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \end{aligned} \quad (7.48)$$

Dieser Ausdruck ist jedoch nur dann reell, wenn P reell ist. Wir kommen also zu dem wichtigen Schluss.

Axiom 13 *Für jedes physikalische System besitzt der Operator \mathbf{P} einer jeden messbaren physikalischen Größe P ausschließlich reelle Eigenwerte.*

Durch dieses Axiom ist die Struktur der zulässigen Operatoren stark eingeschränkt. Bei der mathematisch stringenten Formulierung der Quantenmechanik wird uns diese Aussage wichtige Dienste leisten.

Die Dimension der Operatoren \mathbf{P} ist offensichtlich nicht mit der der eingangs diskutierten Operatoren $\overline{\mathbf{P}}$ identisch. So hat der für die Ortsdarstellung geltende Impuls-Operator nicht die in der Gl. 7.39 angegebenen Dimension, sondern die Dimension

$$\frac{\text{Impuls}}{\text{Teilchenzahl}} \quad (7.49)$$

An dieser Stelle sei auch bereits angemerkt, dass die Rechenvorschrift 7.46 die Axiome eines *Skalarproduktes* zwischen den beiden Funktionen $\mathbf{P}\psi(\vec{r}, t)$ und $\psi(\vec{r}, t)$ erfüllt. Die mathematische Begriffsbildung des Skalarproduktes von Funktionen werden wir im Kapitel 7.4 näher kennenlernen. Ich bin bei der Einführung der allen messbaren physikalischen Größe zugeordneten Operatoren \mathbf{P} den (vordergründig als Umweg ansehbaren) Weg über die Operatoren $\overline{\mathbf{P}}$ insbesondere aus didaktischen Gründen gegangen: Hierdurch verliert die Begründung dieses Teil der Quantenmechanik viel von ihrer vordergründigen Willkür. In dem Skalarprodukt zur Berechnung der Erwartungswerte physikalischer Größen bleibt die Symmetrie der beiden Faktoren vollständig erhalten, und der Ausdruck $\overline{\mathbf{P}}\psi(\vec{r}, t)$ hat eine unmittelbar einsichtige Bedeutung. Auch die Modifizierung der Theorie beim Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik bleibt unmittelbar einsichtig: Die skalare Funktion $n(\vec{r})$ der Anzahldichte wird ersetzt durch das Produkt der komplexen Aufenthaltswahrscheinlichkeits-Amplitude mit ihrer komplex-konjugierten Funktion. Danach verlaufen alle weiteren Rechenschritte analog zum Vorgehen in der klassischen Mechanik.

Stationäre Zustände eines abgeschlossenen Systems müssen, wie bereits ausführlich diskutiert, insbesondere Eigenzustände bzgl. der Energie sein. Der Energieoperator wird aus historischen Gründen als *Hamilton-Operator* \mathbf{H} bezeichnet. Für ihn lautet Gl. 7.47 also

$$\mathbf{H}\psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad , \quad E \in \mathbb{R}^1 \quad (7.50)$$

und wird nach Erwin Schrödinger (* 1857 in Wien; † 1961 ebenda) als die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung* bezeichnet. Sie bildet i.a. den Ausgangspunkt zur Berechnung der stationären Zustände eines physikalischen Systems.

Es fehlt nun insbesondere noch der Weg zur Bewegungsgleichung der neuen Mechanik, also die der Gl. 3.914 entsprechende Beziehung. Einen ersten Hinweis auf deren Struktur erhalten wir durch die Form der Gl. 7.30 in Verbindung mit der Gl. 7.50. Zusammengefasst sagen diese beiden Gl. aus, dass bei stationären Zuständen die zeitliche Ableitung der Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ diese bis auf den Faktor $-i \cdot \omega$ reproduziert,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) = -\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t} \cdot i \cdot \omega \quad (7.51)$$

Dieses ist die Bewegungsgleichung für den Spezialfall stationärer Zustände,

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) = -i \cdot \omega \cdot \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) \quad (7.52)$$

Wir suchen also nach einer verallgemeinerten Form dieser Gl. 7.52, die für beliebige Zustände gültig ist und bei stationären Zustände in die Form der Gl. 7.52 übergeht. Hierzu verwenden wir ein experimentelles Ergebnis der im Abschnitt 7.2.1 beschriebenen Quantisierung ruhemasseloser Strahlung, nämlich den Zusammenhang zwischen Energie und Frequenz von Photonen,

$$\varepsilon = h \cdot f = \hbar \cdot \omega \quad (7.53)$$

Für Photonen lautet daher die Gl. 7.52

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) = \frac{-i}{\hbar} \cdot \varepsilon \cdot \psi_{\text{stat.}}(\vec{r}, t) \quad (7.54)$$

Für beliebige Zustände kann diese Gl. noch nicht korrekt sein, da dann der Wert ε des betrachteten Zustands nicht definiert ist. Die einfachste Verallgemeinerung von Gl. 7.54, die für Eigenzustände von \mathbf{H} in diese übergeht, ist

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial |k\rangle}{\partial t} = \mathbf{H} |k\rangle \quad (7.55)$$

Dieses ist die gesuchte Bewegungsgleichung der Quantenmechanik. Sie wird als die *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung* bezeichnet. Sie ist für beliebige Zustände gültig und bildet eines der Axiome der Quantenmechanik. Wir verzichten an dieser Stelle darauf, sie zu *beweisen*, d.h. auf andere, letztlich ebenfalls als Axiome zu akzeptierende Aussagen zurückzuführen. Für stationäre Zustände besagt die Gl. 7.55

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) = \hbar \cdot \omega \cdot (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) = E \cdot (\psi(\vec{r}) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t}) \quad (7.56)$$

D.h. die Beziehung

$$E = \hbar \cdot \omega \quad (7.57)$$

gilt nicht nur für Photonen, sondern allgemein für die stationären Zustände eines jeden physikalischen Systems. E ist dabei die Gesamtenergie des betrachteten Systems einschließlich der Ruheenergie $E_0 = E(v = 0)$. Wegen des Zahlenwertes von \hbar bleibt die Kreisfrequenz ω , mit der die Phase eines derartigen stationären Zustands oszilliert, nur solange in Größenordnungen, die einer experimentellen Beobachtung zugänglich sind, wie die Energie dieses Zustands nicht zu groß wird. Dieses ist die Ursache dafür, dass die Quantenmechanik insbesondere eine Theorie zur Beschreibung kleiner Teilchen ist, deren Masse und Anregungsenergien nicht so groß sind, dass die zugehörigen Frequenzen nicht mehr beobachtbar wären. Quantenmechanische Interferenzexperimente mit massebehafteten makroskopischen Objekten sind aus demselben Grund nur möglich, wenn deren Energie ausreichend scharf ist, also bei extrem tiefen Temperaturen. Nur dann ist gesichert, dass 2 derartige Objekte beim Durchlaufen einer Versuchsanordnung ihre Phase relativ zu einander nur dann verändern, wenn sie einen unterschiedlich langen Weg zurückgelegt haben.

Offenbar deutet sich an dieser Stelle auch bereits an, auf welchem Wege wir ein Kriterium definieren können für die Entscheidung, ob ein System als klassisches nicht-quantenmechanisches System behandelt werden darf, oder ob die Gesetzmäßigkeiten der Quantenmechanik beachtet werden müssen. Es ist dies die thermisch bedingte Unschärfe in der Phase der betrachteten Objekte im Verhältnis zu den innerhalb der Messanordnung auftretenden (systematischen) Phasendifferenzen.

Stationäre Zustände eines physikalischen Systems können also durch eine komplexwertige Funktion der Struktur

$$|k\rangle = |\psi(\vec{r})| \cdot e^{i\varphi_0} \cdot e^{i\omega \cdot t} \quad (7.58)$$

eindeutig beschrieben werden. φ_0 ist eine (i.a. ; s.u.) weder zeit- noch ortsabhängige Konstante. Der Zahlenwert der Größe φ_0 hat auf die Energie-Eigenwerte keinen Einfluss, er verändert aber auch nicht den Erwartungswert irgendeiner anderen physikalischen Größe in diesem Zustand. Daher stellt sich die Frage, ob diese Größe überhaupt irgendeine physikalische Relevanz besitzt. Hierzu erinnern wir uns an die generellen Aussagen zur physikalischen Bedeutung einer komplexwertigen physikalischen Größe (Abschnitt 4.2.7). Auch die komplexwertige Größe $|k\rangle$ erhält ihre vollständige Bedeutung erst durch Angabe der *Referenzschwingung* identischer Frequenz ω , auf die sich dann auch die Phasendifferenz φ_0 bezieht. Konsistent mit dieser Forderung ist die folgende Interpretation:

Da jeder quantenmechanische Energie-Eigenzustand $|k\rangle$ bzgl. der Phasenlage φ_0 entartet ist, erfolgt jede Phasenmessung ohne Veränderung des φ_0 nicht enthaltenden Teils $|\psi(\vec{r})| \cdot e^{i\omega \cdot t}$ der Wellenfunktion. Diese Phasenmessung ist nur durch die Ankopplung einer Referenzschwingung identischer Frequenz an das betrachtete physikalische System möglich. Nach einer solchen Messung ist die Phase φ_0 des Zustands

$|k\rangle$ nicht mehr unbestimmt, sondern hat einen scharfen Wert, der dann durch eine 2. Messung abgefragt werden kann. Ergebnis ist dann immer derselbe Wert wie bei der 1. Messung, es sei denn, das quantenmechanische System hat eine Wechselwirkung erfahren, die diese Phase verändert.

Die Phase φ_0 eines quantenmechanischen Energie-Eigenzustands ist also eine physikalische Realität, auch wenn sie in vielen Fällen die betrachteten Prozesse nicht beeinflusst. Es gibt aber Prozesse, in denen diese Phase relevant wird. Das wohl berühmteste Beispiel sind die Josephson-Effekte (Abschnitt 7.15.3) in der Supraleitung, ein weiteres der Aharonov-Bohm-Effekt (Abschnitt 7.7.4) .

An dieser Stelle nehme ich kurz die Diskussion der quantenmechanischen Prinzipien einer *Messung* wieder auf: Die hierbei betrachtete beliebig herausgegriffene Größe werde ich wieder mit \mathbf{P} bezeichnen. Das Ergebnis einer einzelnen P -Messung ist **immer** ein scharfer Wert, die Unschärfe kommt erst bei der Wiederholung einer derartigen Messung ins Spiel. Daher liegt es nahe anzunehmen, dass durch eine derartige Messung das System in einen Eigenzustand zu dieser Größe \mathbf{P} überführt wird, nämlich in genau den Eigenzustand, dessen Eigenwert auch das Ergebnis dieser einzelnen Messung ist. D.h. direkt im Anschluss an diese Messung ist der Wert von \mathbf{P} scharf und gleich diesem Messergebnis. Diese Annahme ist nicht beweisbar, sie steht aber im Einklang mit allen bisher bekannt gewordenen experimentellen Ergebnissen. Damit ist wohl noch immer unklar, welche Bedingungen genau ein experimenteller Aufbau erfüllen muss, damit man die durch ihn bewirkte Kopplung als eine *Messung* der Größe \mathbf{P} interpretieren darf. Offenbar handelt es sich aber immer um die Ankopplung eines makroskopischen Systems an das quantenmechanische System. Wir können aber auch ohne deren weitere Präzisierung die *Messung* bereits als eines der Basis-Begriffe für den Aufbau der Quantenmechanik verwenden, ohne in grundsätzliche logische Schwierigkeiten zu geraten.

Nun fehlt insbesondere noch das Konzept, nach dem die konkreten Strukturen der quantenmechanischen Operatoren gefunden werden können. Die wichtigste Hilfe hierfür ist das Korrespondenzprinzip. Wir verbinden diese Forderung an das asymptotische Verhalten der Quantenmechanik mit der bereits entwickelten Berechnungsvorschrift für den Mittelwert einer physikalischen Größe P in einem Zustand $\psi(\vec{r})$, s. Gl. 7.46. Wenn wir nun ein massebehaftetes Teilchen betrachten, das sich in einem Zustand befindet, den man in ausreichender Näherung auch mit den Mitteln der klassischen Mechanik beschreiben darf, dann ist dieses Teilchen wieder lokalisiert und die quantenmechanisch berechneten Mittelwerte aller seiner physikalischen Größen müssen wegen des Korrespondenzprinzips in die analogen klassisch berechneten Größen übergehen. Zumindest in diesem Grenzfall also müssen für die quantenmechanischen Mittelwerte physikalischer Größen dieselben Gesetze gelten wie in der klassischen Mechanik. Wir gehen an dieser Stelle noch einen Schritt weiter, allerdings wieder ohne hierfür eine logisch stringente Begründung geben zu können. Wir fordern, dass diese Bedingung allgemeine Gültigkeit hat:

Axiom 14 Die Zusammenhänge zwischen den quantenmechanisch berechneten Mit-

telwerten physikalischer Größen erfüllen alle Gesetze der klassischen Mechanik.

Dieses Axiom hat in der Literatur die Bezeichnung *Ehrenfest-Theorem* erhalten, benannt nach dem Physiker *Paul Ehrenfest* (* 1880 in Wien; † 1933 in Amsterdam). Betrachten wir z.B. ein Teilchen, das in klassischer Näherung den Energie/Impuls-Zusammenhang

$$E = \frac{P^2}{2 \cdot M} \quad (7.59)$$

besitzt, so muss in der Quantenmechanik für dieses Teilchen in einem beliebigen Zustand ψ gelten:

$$\langle \psi | \mathbf{E} \psi \rangle = \frac{1}{2 \cdot M} \cdot \langle \psi | \mathbf{P}^2 \psi \rangle \quad (7.60)$$

Hieraus folgt unmittelbar

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2 \cdot M} \cdot \mathbf{P}^2 \quad (7.61)$$

In ähnlicher Weise lassen sich die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Operatoren für andere konkrete Beispiel ebenfalls unmittelbar aus dem Korrespondenzprinzip folgern. Es verbleibt dann insbesondere noch die Aufgabe, die Struktur für die Operatoren einiger Grundgrößen zu bestimmen, so des Linear-Impulses und des Drehimpulses. Ich werde die Vorgehensweise am Beispiel des Impulsoperators skizzieren:

Zur Orientierung betrachten wir wieder einen Spezialfall, nämlich den der *ebenen Welle* (s. Gl. 7.5)

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 \cdot e^{-i \cdot (\omega \cdot t - k \cdot x)} \quad (7.62)$$

und differenzieren diese Gl. nach der Ortskoordinate x :

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial x} = -i \cdot \psi_0 \cdot e^{-i \cdot (\omega \cdot t - k \cdot x)} \cdot i \cdot k = k \cdot \psi(\vec{r}, t) \quad (7.63)$$

(XXX: Der an dieser Stelle noch fehlende Text zur Orientierung am Beispiel der ebenen Welle ist noch nicht verfügbar.)

In der Lagrangeschen Formulierung der klassischen Mechanik (XXX: Bezug ergänzen) resultiert die Existenz der Erhaltungsgröße Impuls aus der Forderung der Invarianz der Bewegungsgleichungen gegenüber einer translatorischen Verschiebung des Koordinatensystems. Die bei einer infinitesimalen translatorischen Verschiebung des Koordinatensystems resultierende Veränderung eines Zustands $|k\rangle$ wollen wir formal durch den Operator $\delta \mathbf{T}$ beschreiben,

$$|k\rangle^{(t)} = \delta \mathbf{T} |k\rangle \quad (7.64)$$

Stellen wir nun im Rahmen der Quantenmechanik dieselbe Invarianzforderung, dann bedeutet das, dass eine Verschiebung des Koordinatensystems den Hamilton-Operator

unverändert lässt. Wie man unmittelbar nachrechnen kann, ist dies gleichbedeutend mit der Forderung

$$\delta \mathbf{T}(\mathbf{H} |k\rangle) = \mathbf{H}(\delta \mathbf{T} |k\rangle) \quad (7.65)$$

Aus dieser Bedingung lässt sich, zusammen mit einer erneuten Verwendung des Korrespondenzprinzips, bereits die konkrete Form des Impulsoperators,

$$\mathbf{P} = -i \cdot \hbar \cdot \nabla = -i \cdot \hbar \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x}; \frac{\partial}{\partial y}; \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (7.66)$$

erschließen. Wir werden diese Schritte im einzelnen im Abschnitt 7.7.2 nachvollziehen und für die übrigen Operatoren in ähnlicher Weise vorgehen.

Die mathematisch saubere Formulierung all dieser Zusammenhänge ist der Inhalt des Kapitels 7.5. Hierfür werde ich jedoch zunächst die dafür erforderlichen mathematischen Grundlagen bereitstellen.

7.4 Mathematische Strukturen der Quantenmechanik (*)

In diesem Kapitel werde ich in möglichst komprimierter Form die mathematischen Strukturen darstellen, die für einen sauberen Aufbau der Quantenmechanik erforderlich sind. Dabei werde ich mich weniger um die Vollständigkeit in der Darstellung und um einen mathematisch sauberen konstruktiven Aufbau dieser mathematischen Strukturen bemühen, sondern mich vielmehr auf den für die Quantenmechanik unbedingt nötigen Teil beschränken und gleichzeitig versuchen, die Darstellung so zu wählen, dass der Leser die Verbindung zu den quantenmechanischen Begriffen und Zusammenhängen möglich einfach nachvollziehen kann. Lesern, denen diese Begriffe noch völlig neu sind, wird diese Darstellung wesentlich zu gedrängt und verkürzt erscheinen. Ihnen kann ich das Studium der in kaum überschaubarer Fülle verfügbaren Spezialliteratur nicht ersparen, z.B. [15], [16]. Den übrigen Lesern soll dieses Kapitel als zielgerichtete Wiederholung und Ergänzung dienen und ihnen so den Einstieg in die nachfolgenden Kapitel erleichtern.

Die meisten der in diesem Kapitel zusammengetragenen Aussagen werde ich anführen, ohne den zugehörigen Beweis zu liefern. Einige typische Beweisführungen sind als Aufgaben formuliert. Bzgl. der übrigen Beweise kann ich wieder nur auf die Fachliteratur verweisen. In vielen Fällen wird es aber dem Leser mit einiger Geduld auch gelingen, den Beweis selbst zu erbringen. Ein bei vielen Anfängern auftretendes Hindernis beim Eindringen in diese Materie besteht darin, dass viele Aussagen der Theorie der Vektorräume vordergründig einfach, fast primitiv wirken, so dass z.B. manche Beweisführungen gerade dadurch schwierig nachvollziehbar sind. Ich werde versuchen, diese Hindernisse durch ergänzende Bemerkungen etwas abzutragen .

7.4.1 Vektorräume (*)

In einer Menge \mathbf{M} von Elementen $|k\rangle$ [¶] sei eine Operation \oplus erklärt mit folgenden Eigenschaften:

Axiom 15 \oplus ist für alle Paare von Elementen aus \mathbf{M} eindeutig definiert und führt nicht aus \mathbf{M} hinaus,

$$|k\rangle, |l\rangle \in \mathbf{M} \Rightarrow |k\rangle \oplus |l\rangle \in \mathbf{M} \quad (7.67)$$

Axiom 16 die Reihenfolge der Ausführung von \oplus ist beliebig,

$$(|k\rangle \oplus |l\rangle) \oplus |m\rangle = |k\rangle \oplus (|l\rangle \oplus |m\rangle) \quad (7.68)$$

Axiom 17 \oplus ist kommutativ,

$$|k\rangle \oplus |l\rangle = |l\rangle \oplus |k\rangle \quad (7.69)$$

Axiom 18 zu \oplus existiert eine eindeutige Umkehroperation:

$$|k\rangle, |l\rangle \in \mathbf{M} \Rightarrow \exists \text{ genau ein } |x\rangle \in \mathbf{M} \text{ mit } |k\rangle \oplus |x\rangle = |l\rangle \quad (7.70)$$

Aus dem Axiom 18 folgt unmittelbar die Existenz genau eines neutralen Elementes $|0\rangle$,

$$\exists \text{ genau ein } |0\rangle \in \mathbf{M} \text{ mit: } |k\rangle \oplus |0\rangle = |k\rangle \quad \forall |k\rangle \in \mathbf{M} \quad (7.71)$$

sowie die Existenz des inversen Elementes $|k^{-1}\rangle$ zu jedem Element $|k\rangle$,

$$\forall |k\rangle \in \mathbf{M} \exists \text{ genau ein } |k^{-1}\rangle \in \mathbf{M} \text{ mit } |k\rangle \oplus |k^{-1}\rangle = |0\rangle \quad (7.72)$$

Eine Menge \mathbf{M} , für die die Axiome 15 bis 18 gelten, bezeichnet man als *kommutative Gruppe*. Die Eigenschaft der Kommutativität wird nach dem norwegischen Mathematiker Niels Hendrik Abel (* 1802 in Findø; † 1829 in Froland b. Arendal) auch als *abelsch* bezeichnet.

Außerdem sei eine Multiplikation \odot mit einer komplexen Zahl $\alpha \in \hat{\mathbf{C}}$ erklärt mit folgenden Eigenschaften:

Axiom 19 Die Operation \odot ist für alle Paare $(|k\rangle; \alpha)$ eindeutig definiert,

$$|k\rangle \in \mathbf{M}, \alpha \in \hat{\mathbf{C}} \Rightarrow \alpha \odot |k\rangle \in \mathbf{M} \quad (7.73)$$

Axiom 20 es gilt das Distributivgesetz,

$$\alpha \odot (|k\rangle \oplus |l\rangle) = \alpha \odot |k\rangle \oplus \alpha \odot |l\rangle \quad (7.74)$$

[¶]Ich habe zur Kennzeichnung der Vektoren auch an dieser Stelle bereits die Dirac-Darstellung quantenmechanischer Zustände gewählt, um anzudeuten, wohin der Weg gehen wird.

Axiom 21 die Multiplikationen \odot in \mathbf{M} und \cdot in $\hat{\mathbf{C}}$ sind miteinander verträglich,

$$(\alpha \cdot \beta) \odot |k\rangle = \alpha \odot (\beta \odot |k\rangle) \quad (7.75)$$

Axiom 22 es sind die Operationen $+$ in $\hat{\mathbf{C}}$ und \oplus sowie \odot in \mathbf{M} miteinander verträglich,

$$(\alpha + \beta) \odot |k\rangle = \alpha \odot |k\rangle \oplus \beta \odot |k\rangle \quad (7.76)$$

Die in den Axiomen 21 und 22 geforderten Verträglichkeiten zwischen den verschiedenen in \mathbf{M} bzw. in $\hat{\mathbf{C}}$ definierten Verknüpfungen sorgen auch dafür, dass beim konkreten Umgang mit diesen Symbolen i.a. keine Rechenfehler durch Verwechslung mit den im \mathbb{R}^1 oder in $\hat{\mathbf{C}}$ definierten Rechenoperationen auftreten. Deswegen werden sie in vielen Büchern auch gar nicht erst unterschiedlich gekennzeichnet. Ich habe die unterschiedliche Schreibweise beibehalten, also z.B. \cdot für die Multiplikation in $\hat{\mathbf{C}}$ und \odot für die Multiplikation in \mathbf{M} , weil ich davon ausgehe, dass der Leser hierdurch die logischen Zusammenhänge besser erkennt.

Eine Menge \mathbf{M} mit den in den Axiomen 15 bis 22 definierten Eigenschaften bezeichnen wir als einen *linearen Raum* oder auch *Vektorraum über dem Körper $\hat{\mathbf{C}}$ der komplexen Zahlen*. Entsprechend nennen wir dann die Elemente von \mathbf{M} auch *Vektoren*, und das neutrale Element den *Nullvektor*.

7.4.2 Lineare Unabhängigkeit / Definition einer Basis (*)

Als *linear unabhängig* (voneinander) bezeichnen wir eine Menge von n Vektoren $(|k_1\rangle, \dots, |k_n\rangle)$, wenn sich mit ihrer Hilfe der Nullvektor nur in der trivialen Weise darstellen lässt,

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot |k_i\rangle = |0\rangle \Rightarrow \alpha_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (7.77)$$

Dann nämlich lässt sich keiner der Vektoren $(|k_1\rangle, \dots, |k_n\rangle)$ als Linearkombination der übrigen darstellen. Ist die Anzahl der betrachteten Vektoren unendlich, bezeichnen wir diese Menge genau dann als linear unabhängig, wenn jede beliebig herausgegriffene endliche Menge linear unabhängig ist.

Wie man sich leicht klarmachen kann, lässt sich jede beliebige Menge von Vektoren durch Reduktion auf eine geeignet ausgewählte Teilmenge linear unabhängig machen. Umgekehrt lässt sich in jedem Vektorraum nur eine gewisse maximale Anzahl von linear unabhängigen Vektoren finden. Diese Zahl N bezeichnen wir als die *Dimension* des Vektorraums. N kann auch unendlich sein (s. auch Abschnitt 3.1.3). M.a.W. jeder Vektor $|k\rangle \in \mathbf{M}$ lässt sich (eindeutig) als Linearkombination einer (auf eine geeignete Weise gefundenen, s. z.B. Gl. 7.110) Menge von *Basisvektoren* $\{|b_1\rangle, \dots, |b_N\rangle\}$ darstellen,

$$|k\rangle = \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot |b_i\rangle \quad (7.78)$$

Die Menge $\{|b_1\rangle, \dots, |b_N\rangle\}$ bezeichnet man als eine *Basis* des Vektorraums \mathbf{M} .

An dieser Stelle führe ich die in der Linearen Algebra übliche *Matrixschreibweise* ein mit der als *Matrixmultiplikation* bezeichneten Operation \circ : Eine Matrix $\tilde{\mathbf{P}}_{n,m}$ ist ein in n Zeilen und m Spalten angeordnetes Schema von $n \cdot m$ komplexen (oder auch reellen) Zahlen $P_{i,j}$. Die Multiplikation $\tilde{\mathbf{P}}_{n,m}^{(1)} \circ \tilde{\mathbf{P}}_{o,p}^{(2)}$ zweier Matrizen $\tilde{\mathbf{P}}_{n,m}^{(1)}$ und $\tilde{\mathbf{P}}_{o,p}^{(2)}$ ist nur definiert, wenn die sog. Anschlusszahlen m und o , also die Spaltenanzahl von $\tilde{\mathbf{P}}_{n,m}^{(1)}$ und die Zeilenanzahl von $\tilde{\mathbf{P}}_{o,p}^{(2)}$, gleich sind. Es gilt dann

$$\tilde{\mathbf{P}}_{n,m}^{(1)} \circ \tilde{\mathbf{P}}_{m,o}^{(2)} = \tilde{\mathbf{P}}_{n,o}^{(3)} \quad \text{mit} \quad (7.79)$$

$$P_{i,j}^{(3)} = \sum_{k=1}^m P_{i,k}^{(1)} \cdot P_{k,j}^{(2)} \quad (7.80)$$

Wie man bereits auf Grund der Bedingung bzgl. der Anschlusszahlen vermuten kann, ist die Matrixmultiplikation nicht kommutativ,

$$\tilde{\mathbf{P}} \circ \tilde{\mathbf{Q}} \neq \tilde{\mathbf{Q}} \circ \tilde{\mathbf{P}} \quad (7.81)$$

auch nicht für quadratische Matrizen, für die beide Seiten der obigen Ungleichung wohl definiert sind. Daher muss für die mehrfache Anwendung dieser Operation, also für Ausdrücke der Form $\tilde{\mathbf{P}} \circ \tilde{\mathbf{Q}} \circ \tilde{\mathbf{R}}$, eine Konvention über die Reihenfolge getroffen werden. Es hat sich eingebürgert fest zu legen, dass bei derartigen Ausdrücken die Multiplikation von rechts nach links erfolgt, wenn nicht durch Klammern eine andere Reihenfolge vorgeschrieben wird:

$$\tilde{\mathbf{P}} \circ \tilde{\mathbf{Q}} \circ \tilde{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{P}} \circ (\tilde{\mathbf{Q}} \circ \tilde{\mathbf{R}}) \neq (\tilde{\mathbf{P}} \circ \tilde{\mathbf{Q}}) \circ \tilde{\mathbf{R}} \quad (7.82)$$

In dieser Schreibweise wird die Gl. 7.78 zu

$$|k\rangle = (\alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_N) \circ \begin{pmatrix} |b_1\rangle \\ \dots \\ |b_N\rangle \end{pmatrix} \quad (7.83)$$

oder auch

$$|k\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \circ (|b_1\rangle \quad \dots \quad |b_N\rangle) \quad (7.84)$$

Sobald die aktuelle Basis vereinbart ist, ist der Zeilenvektor $(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ bzw. der zugehörige Spaltenvektor eine eindeutige Darstellung und vollständige Beschreibung des Vektors $|k\rangle$, unabhängig davon, um welche Art von Objekt es sich hierbei im einzelnen handelt. Es hat sich nun eingebürgert, in nahezu allen Fällen die vollständige Schreibweise gem. der Gl. 7.83 oder 7.84 zu verkürzen und auf die explizite Nennung der Basisvektoren zu verzichten, also z.B. einfach

$$|k\rangle = (\alpha_1 \quad \dots \quad \alpha_N) \quad (7.85)$$

zu schreiben. Das führt i.a. nicht zu Fehlern, aber bei dem Anfänger schon einmal zu Verwirrungen, z.B. weil er nicht unmittelbar einsieht, weshalb man innerhalb einer Rechnung für dieselbe vektorieller Größe einmal einen Zeilenvektor gem. Gl. 7.85 und dann wieder den zugehörigen Spaltenvektor verwendet. Sobald man die vollständige Schreibweise verwendet, wird der jeweilige Rechengang i.a. unmittelbar einsichtig.

Wie man aus den Axiomen 16 und 22 leicht nachrechnen kann, erfolgt die Addition zweier derartiger Zeilenvektoren oder Spaltenvektoren koeffizientenweise,

$$(\alpha_1 \ \dots \ \alpha_N) \oplus (\beta_1 \ \dots \ \beta_N) = (\alpha_1 + \beta_1 \ \dots \ \alpha_N + \beta_N) \quad (7.86)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \dots \\ \beta_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 + \beta_1 \\ \dots \\ \alpha_N + \beta_N \end{pmatrix} \quad (7.87)$$

Sobald also eine Basis gewählt wurde, hat man gleichzeitig die Addition \oplus in \mathbf{M} auf die Addition $+$ in $\tilde{\mathbf{C}}$ zurückgeführt.

Die Wahl der Basis ist keinesfalls eindeutig. Vielmehr kann **jede beliebige** Auswahl von N linear unabhängigen Vektoren als Basis für \mathbf{M} dienen. Sind daher 2 Basen (1) und (2) bekannt, so ist jeder beliebige Vektor $|k\rangle$ in beiden Basen darstellbar,

$$|k\rangle = (\alpha_1^{(1)} \ \dots \ \alpha_N^{(1)}) \circ \begin{pmatrix} |b_1^{(1)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(1)}\rangle \end{pmatrix} = (\alpha_1^{(2)} \ \dots \ \alpha_N^{(2)}) \circ \begin{pmatrix} |b_1^{(2)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(2)}\rangle \end{pmatrix} \quad (7.88)$$

Wir berechnen nun, wie sich die Werte der Komponentendarstellung gem. Gl. 7.83 bei diesem Übergang von einer Basis (1) zu einer Basis (2) transformieren: Hierzu nutzen wir aus, dass die Basisvektoren $|b_i^{(2)}\rangle$ ihrerseits ebenfalls durch die Basis (1) darstellbar sind,

$$|b_i^{(2)}\rangle = (c_{i,1} \ \dots \ c_{i,N}) \circ \begin{pmatrix} |b_1^{(1)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(1)}\rangle \end{pmatrix} \quad (7.89)$$

Der Zusammenhang zwischen den Vektoren $|b_i^{(2)}\rangle$ und $|b_i^{(1)}\rangle$ wird also durch die Matrix

$$\tilde{\mathbf{C}} = \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{1N} \\ \dots & \dots & \dots \\ c_{N1} & \dots & c_{NN} \end{pmatrix} \quad (7.90)$$

vollständig beschrieben:

$$\left(|b_1^{(2)}\rangle \ \dots \ |b_N^{(2)}\rangle \right) = \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{1N} \\ \dots & \dots & \dots \\ c_{N1} & \dots & c_{NN} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} |b_1^{(1)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(1)}\rangle \end{pmatrix} \quad (7.91)$$

Die Zeilenvektoren von $\tilde{\mathbf{C}}$ sind also die Komponenten der neuen Basisvektoren $|b_i^{(2)}\rangle$ bei deren Darstellung in der alten Basis $|b_i^{(1)}\rangle$. Andererseits gilt

$$\begin{pmatrix} |b_1^{(2)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(2)}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |b_1^{(1)}\rangle & \dots & |b_N^{(1)}\rangle \end{pmatrix} \circ \tilde{\mathbf{C}}^T \quad (7.92)$$

Hierbei ist $\tilde{\mathbf{C}}^T$ die bzgl. $\tilde{\mathbf{C}}$ *transponierte Matrix*, bei der also Zeilen und Spalten gegeneinander vertauscht sind. Diese enthält die Komponenten der neuen Basisvektoren $|b_i^{(2)}\rangle$ bei ihrer Darstellung in der alten Basis $|b_i^{(1)}\rangle$ als Spaltenvektoren. Wir setzen die Gl. 7.92 in die Gl. 7.88 ein und erhalten

$$|k\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(1)} & \dots & \alpha_N^{(1)} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} |b_1^{(1)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(1)}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(2)} & \dots & \alpha_N^{(2)} \end{pmatrix} \circ \tilde{\mathbf{C}}^T \circ \begin{pmatrix} |b_1^{(1)}\rangle \\ \dots \\ |b_N^{(1)}\rangle \end{pmatrix} \quad (7.93)$$

Also gilt

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^{(1)} & \dots & \alpha_N^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(2)} & \dots & \alpha_N^{(2)} \end{pmatrix} \circ \tilde{\mathbf{C}}^T \quad (7.94)$$

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Lineare Unabhängigkeit / Definition einer Basis* ist noch nicht verfügbar.)

7.4.3 Die Determinante einer Matrix (-)

Die grundlegenden Begriffsbildungen, die zu der Definition einer Determinante geführt haben, sind uns bereits aus dem Abschnitt 3.1.2 bekannt. Dort haben wir uns jedoch auf den Fall des 3D-Anschauungsraums beschränkt. In dem nun beginnenden Abschnitt wird daher darum gehen, die im allgemeineren Fall eines Vektorraums mit $N > 3$ zusätzlich auftretenden (und für die Physik, insbesondere die Quantenmechanik relevanten) Zusammenhänge zu behandeln.

Auch im Fall von $N > 3$ ist die Determinante nur für quadratische Matrizen wohl definiert. Es gelten weiterhin der Determinantensatz und die Sätze 12 bis 16.

(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Abschnitts *Die Determinante einer Matrix* ist noch nicht verfügbar. Er wird auch die nachfolgende Beziehung erläutern:)

7.4.4 Untervektorräume (-)

Eine Teilmenge $\mathbf{U} \subset \mathbf{M}$, für die die Bildung einer beliebigen Linearkombination nicht aus \mathbf{U} hinausführt,

$$|k\rangle \in \mathbf{U} ; |l\rangle \in \mathbf{U} \Rightarrow \alpha \odot |k\rangle \oplus \alpha \odot |l\rangle \in \mathbf{U} \quad (7.95)$$

bildet seinerseits einen Vektorraum, den wir als einen *Untervektorraum* von \mathbf{M} bezeichnen. Diese Begriffsbildung erhält ihre Bedeutung insbesondere dadurch, dass

wir mit ihrer Hilfe \mathbf{M} in definierter Weise zerlegen können. Hierzu benötigen wir 2 Aussagen, deren Beweis ich wieder dem Leser überlasse:

Theorem 143 *Seien $\mathbf{U}_1 \subset \mathbf{M}$ und $\mathbf{U}_2 \subset \mathbf{M}$ Untervektorräume von \mathbf{M} und $\mathbf{U}_1 \cap \mathbf{U}_2 = 0$. Dann ist*

$$\mathbf{U}_1 \uplus \mathbf{U}_2 = \{|k\rangle = |k_1\rangle + |k_2\rangle\} \text{ mit } |k_1\rangle \in \mathbf{U}_1 \text{ und } |k_2\rangle \in \mathbf{U}_2 \quad (7.96)$$

ebenfalls ein Untervektorraum von \mathbf{M} und die Zerlegung

$$|k\rangle = |k_1\rangle + |k_2\rangle \quad (7.97)$$

ist eindeutig. Diese nur für diesen Fall definierte Verknüpfung \uplus wird als das direkte Produkt von \mathbf{U}_1 und \mathbf{U}_2 bezeichnet, gelegentlich auch als deren direkte Summe.

Theorem 144 (Ergänzungssatz) *Ist die Dimension von \mathbf{M} endlich, dann lässt sich zu jedem Untervektorraum $\mathbf{U}_1 \subset \mathbf{M}$ ein Untervektorraum \mathbf{U}_1^* finden, so dass*

$$\mathbf{U}_1 \uplus \mathbf{U}_1^* = \mathbf{M} \quad (7.98)$$

Offensichtlich bilden dann die Basisvektoren von \mathbf{U}_1 und die von \mathbf{U}_1^* zusammengenommen eine Basis von \mathbf{M} . Umgekehrt formuliert spannt jede Teilmenge der Basisvektoren von \mathbf{M} einen Untervektorraum auf. \mathbf{U}_1 habe die Dimension k , und es sei eine Basis von \mathbf{M} vorgegeben und die Reihenfolge ihrer Basisvektoren sei o.B.d.A. derart gewählt, dass die Basisvektoren von \mathbf{U}_1 die ersten k Vektoren der Basis von \mathbf{M} bilden. In der Darstellung als Zeilen- oder Spaltenvektoren haben dann alle Vektoren $|u\rangle \in \mathbf{U}_1$ die Form

$$|u\rangle = (\alpha_1; \dots; \alpha_k; 0; \dots; 0) \quad (7.99)$$

und entsprechend haben alle Vektoren $|u^*\rangle \in \mathbf{U}_1^*$ die Form

$$|u^*\rangle = (0; \dots; 0; \alpha_{k+1}; \dots; \alpha_N) \quad (7.100)$$

Die besondere Bedeutung dieser Begriffsbildung der Untervektorräume werden wir im Abschnitt 7.4.7 erkennen.

7.4.5 Norm / Skalarprodukt / Vollständigkeit / Orthogonalität (*)

Damit Vektorräume den Methoden der Analysis zugänglich werden, also Grenzübergangsprozesse ermöglichen, müssen sie um die Definition eines *Abstands* erweitert werden. Als Abstand $d(|k\rangle, |l\rangle)$ oder *Metrik* bezeichnen wir ein Funktional $\mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \rightarrow \mathbb{R}^1$ genau dann, wenn es folgende Eigenschaften aufweist:

Axiom 23 *Die Metrik ist positiv definit,*

$$d(|k\rangle, |l\rangle) \geq 0 \quad (7.101)$$

$$d(|k\rangle, |l\rangle) = 0 \iff |k\rangle = |l\rangle \quad (7.102)$$

Axiom 24 *sie ist kommutativ,*

$$d(|k\rangle, |l\rangle) = d(|l\rangle, |k\rangle) \quad (7.103)$$

Axiom 25 *und es gilt die Dreiecks-Ungleichung,*

$$d(|k\rangle, |m\rangle) \leq d(|k\rangle, |l\rangle) + d(|l\rangle, |m\rangle) \quad (7.104)$$

Ein Vektorraum, in dem eine Abstandsfunktion definiert ist, wird als *Metrischer Raum* bezeichnet. Eine Möglichkeit einer derartigen Abstandsdefinition ist der Weg über die *Norm* $\| |k\rangle \|$ eines Vektors. Ein Funktional $\mathbf{M} \rightarrow \hat{\mathbf{C}}$ bezeichnen wir genau dann als Norm, wenn es folgende Eigenschaften aufweist:

Axiom 26 *Die Norm ist positiv definit,*

$$\| |k\rangle \| \geq 0 \quad (7.105)$$

$$\| |k\rangle \| = 0 \iff |k\rangle = |0\rangle \quad (7.106)$$

Axiom 27 *sie erhält die Verträglichkeit der Multiplikation \odot von $|k\rangle$ mit einer komplexen Zahl mit der Multiplikation \cdot in $\hat{\mathbf{C}}$,*

$$\| \alpha \odot |k\rangle \| = |\alpha| \cdot \| |k\rangle \| \quad (7.107)$$

Axiom 28 *und es gilt die Schwarzsche Ungleichung*

$$\| |k\rangle \oplus |l\rangle \| \leq \| |k\rangle \| + \| |l\rangle \| \quad (7.108)$$

benannt nach *Karl Hermann Amandus Schwarz* (* 1843 in Hermsdorf; † 1921 in Berlin). Den Abstand zweier Vektoren definieren wir dann einfach als

$$d(|k\rangle, |l\rangle) = \| |k\rangle \ominus |l\rangle \| \quad (7.109)$$

Das Zeichen \ominus steht dabei für die Umkehrung der Addition \oplus . Ein metrischer Raum, in dem der Abstand über eine Norm definiert ist, wird als *normierter Vektorraum* bezeichnet.

Eine Möglichkeit zur Definition einer Norm ist nun wiederum der Weg über ein Funktional von der Art eines *Skalarproduktes*:

Je 2 Elementen $|k\rangle, |l\rangle \in \mathbf{M}$ sei genau eine als *Skalarprodukt* bezeichnete komplexe Zahl $\langle l | k \rangle \in \hat{\mathbf{C}}$ zugeordnet mit folgenden Eigenschaften:

Axiom 29 *Das Skalarprodukt erhält die Verträglichkeit von \oplus in \mathbf{M} mit $+$ in $\hat{\mathbf{C}}$,*

$$\langle l | k_1 \oplus k_2 \rangle = \langle l | k_1 \rangle + \langle l | k_2 \rangle \quad (7.110)$$

Axiom 30 es erhält ebenso die Verträglichkeit von \odot in $\mathbf{M} \otimes \hat{\mathbf{C}}$ mit \cdot in $\hat{\mathbf{C}}$,

$$\langle l | \alpha \odot k \rangle = \alpha \cdot \langle l | k \rangle \quad (7.111)$$

Axiom 31 und es ist anti-kommutativ,

$$\langle k | l \rangle^* = \langle l | k \rangle \quad (7.112)$$

Jedes Funktional $\mathbf{M} \otimes \mathbf{M} \rightarrow \hat{\mathbf{C}}$, das diese Axiome erfüllt, nennen wir ein *Skalarprodukt*. Die Schreibweise $\langle l | k \rangle$ für das Skalarprodukt ist an dieser Stelle nicht mehr als eine Abkürzung. Sie sagt nichts darüber aus, wie dieses Skalarprodukt im einzelnen zu bilden ist.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass manche Autoren (z.B. [17]) die durch das Axiom 31 geforderte Anti-Kommutativität des Skalarproduktes durch eine vergleichsweise komplizierte Konstruktion erzwingen: Dem ursprünglichen Vektorraum $\{|k\rangle\}$ wird ein weiterer, als *dual* bezeichneter Vektorraum $\{\langle k|\}$ über eine ein-eindeutige Abbildung

$$|k\rangle \leftrightarrow \langle k| \quad (7.113)$$

in einer Weise zugeordnet, dass für das nun definierte Skalarprodukt

$$\langle k | l \rangle \quad (7.114)$$

bei dem jeweils ein Element aus dem Raum $\{\langle k|\}$ mit einem aus dem Raum $\{|k\rangle\}$ verknüpft wird, die Axiome 29 bis 31 gültig sind. Dirac nannte die aus dem Raum $\{\langle k|\}$ entnommenen Vektoren *bra*-Vektoren und die aus dem Raum $\{|k\rangle\}$ entnommenen *ket*-Vektoren, die als Skalarprodukt zusammen gefasst dann ein *bracket* (engl. *die Klammer*) ergaben. Ich sehe mich nicht in der Lage, den Vorteil dieser Konstruktion zu erläutern.

Wie man unmittelbar nachrechnen kann, folgt aus den o.a. Axiomen des Skalarproduktes

1. die Verträglichkeit von \oplus mit $+$ auch bzgl. des vorderen Vektors,

$$\langle l_1 \oplus l_2 | k \rangle = \langle l_1 | k \rangle + \langle l_2 | k \rangle \quad (7.115)$$

2. die Anti-Verträglichkeit von \cdot mit der Multiplikation \odot des vorderen Vektors,

$$\langle \alpha \odot l | k \rangle = \alpha^* \cdot \langle l | k \rangle \quad (7.116)$$

3. und die *Cauchy-Schwarzsche Ungleichung*

$$|\langle l | k \rangle|^2 \leq \langle l | l \rangle \cdot \langle k | k \rangle \quad (7.117)$$

Unter Zuhilfenahme des Skalarproduktes ist die Norm eines Vektors einfach

$$\| |k\rangle \| = \sqrt{\langle k | k \rangle} \quad (7.118)$$

Die geforderte Positiv-Definitheit der Norm folgt unmittelbar aus dem Axiom 31.

Ein normierter Vektorraum, bei dem die Norm über ein Skalarprodukt definiert ist, wird als *metrisierter* oder nach *David Hilbert* (* 1862 in Königsberg; † 1943 in Göttingen) als *Prä-Hilbert-Raum* bezeichnet.

Wie bereits zu Beginn dieses Kapitels angedeutet, werden wir nun die über das Skalarprodukt definierte Abstandsfunktion dazu benutzen, Grenzübergangsprozesse zu definieren. Wie in der elementaren Analysis (s. Abschnitt 3.1.4) üblich, beginnen wir hierbei mit der Definition einer Cauchy-Folge in dem Prä-Hilbertraum \mathbf{M} , indem wir jeder natürlichen Zahl n ein Element $|k_n\rangle \in \mathbf{M}$ zuordnen und zwar derart, dass für genügend große Werte einer natürlichen Zahl n_0 der Abstand zweier Elemente, die beliebig aus dem oberhalb von n_0 liegenden Teil der Folge herausgegriffen werden, mit wachsendem n_0 beliebig klein wird. In der Sprache der Analysis lautet die exakte Formulierung dieser Aussage

$$\forall \varepsilon > 0 \exists n_0 \text{ mit: } d(|k_n\rangle, |k_m\rangle) = \sqrt{\langle k_n \ominus k_m | k_n \ominus k_m \rangle} < \varepsilon \quad \forall n, m > n_0 \quad (7.119)$$

Wenn nun jede in \mathbf{M} definierbare Cauchy-Folge einen Grenzwert $|g\rangle$ besitzt, der ebenfalls in \mathbf{M} liegt,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |k_n\rangle = |g\rangle \in \mathbf{M} \quad (7.120)$$

bezeichnen wir \mathbf{M} als *vollständig*.

Ein vollständiger Prä-Hilbertraum heißt einfach *Hilbertraum*. Er ist also ein Vektorraum, in dem ein Skalarprodukt erklärt ist, und der vollständig ist bzgl. der Grenzprozesse, die auf Basis dieses Skalarproduktes definiert werden können. In ihm lassen sich daher insbesondere die aus der elementaren Analysis des Anschauungsraums bekannten Prozesse der Differenziation und Integration ebenfalls ausführen, und sie führen wieder zu Elementen desselben Vektorraums.

Mit der Einführung eines Skalarproduktes ist aber auch festgelegt, wann zwei Vektoren $|k_1\rangle, |k_2\rangle \in \mathbf{M}$ *orthogonal* zueinander sind (*auf einander senkrecht stehen*), nämlich

$$|k_1\rangle \neq 0, |k_2\rangle \neq 0, |k_1\rangle \perp |k_2\rangle \iff \langle k_1 | k_2 \rangle = 0 \quad (7.121)$$

Wie man leicht beweisen kann, sind orthogonale Vektoren immer linear unabhängig.

Mit Hilfe des Skalarproduktes kann man daher zu jedem beliebigen Vektor $|k_2\rangle$ den zu $|k_1\rangle$ senkrechten Anteil bestimmen,

$$|k_2^\perp\rangle = |k_2\rangle - \frac{\langle k_2 | k_1 \rangle}{\langle k_1 | k_1 \rangle} \cdot |k_1\rangle \quad (7.122)$$

Wie man leicht nachrechnen kann, stehen $|k_2^\perp\rangle$ und $|k_1\rangle$ senkrecht aufeinander. Es gilt also

$$\langle k_2^\perp | k_1 \rangle = 0 \quad (7.123)$$

$$|k_2^\perp\rangle = 0 \iff |k_1\rangle \text{ und } |k_2\rangle \text{ linear abhängig} \quad (7.124)$$

Durch fortgesetzte Ausführung dieser Operation kann man jede beliebige Menge $\{|k_i\rangle; i = 1 \dots N\}$ von N linear unabhängigen Vektoren orthogonalisieren und auch gleich mit der Länge 1 versehen:

$$|k_1^{(o.n.)}\rangle = \frac{|k_1\rangle}{\sqrt{\langle k_1 | k_1 \rangle}} \quad (7.125)$$

$$|k_i^\perp\rangle = |k_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1} \langle k_i | k_j^{(o.n.)} \rangle \cdot |k_j^{(o.n.)}\rangle \quad ; \quad i = 2, \dots, N \quad (7.126)$$

$$|k_i^{(o.n.)}\rangle = \frac{|k_i^\perp\rangle}{\sqrt{\langle k_i^\perp | k_i^\perp \rangle}} \quad (7.127)$$

Dieses Verfahren wird nach dem deutschen Mathematiker *Erhard Schmidt* (* 1876 in Dorpat/heute Tartu (Estland); † 1959 in Berlin) als *Schmidtsches Orthonormierungsverfahren* bezeichnet. Ist N die Dimension von \mathbf{M} , bildet die derart bestimmte Menge von Vektoren $\{|k_i^\perp\rangle\}$ eine *orthonormierte Basis* $\{|b_i\rangle\}$ von \mathbf{M} . N darf dabei auch abzählbar unendlich sein. Es gilt dann insbesondere

$$\begin{aligned} \langle b_i | b_j \rangle &= 1 \text{ für } i = j \\ &= 0 \text{ sonst} \end{aligned} \quad (7.128)$$

Dieses Verhalten schreibt man auch in der Form

$$\langle b_i | b_j \rangle = \delta_{i,j} \quad (7.129)$$

und nennt $\delta_{i,j}$ das *Kronecker-Symbol* (nach *Leopold Kronecker*, * 1823 in Liegnitz; † 1891 in Berlin). Insbesondere auf Grund dieser Beziehung 7.115 vereinfacht die Wahl einer orthonormierten Basis praktisch alle konkreten Berechnungen ganz erheblich.

Den 2. Summanden in der Gl. 7.122, d.h. den Ausdruck

$$P(|k_2\rangle; |k_1\rangle) = \frac{\langle k_2 | k_1 \rangle}{\langle k_1 | k_1 \rangle} \cdot |k_1\rangle \quad (7.130)$$

nennt man die *Projektion* des Vektors $|k_2\rangle$ auf den Vektor $|k_1\rangle$. Für die betrachteten verallgemeinerten metrischen Funktionenräume ist diese Begriffsdefinition das exakte Analogon zum Begriff der orthogonalen Projektion in der Elementargeometrie (s. Definition 5 im Abschnitt 3.1.1)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Norm / Skalarprodukt / Vollständigkeit / Orthogonalität* ist noch nicht verfügbar.)

7.4.6 Funktionen-Räume (-)

Bisher habe ich nur abstrakt von Vektoren und deren Zusammenfassung zu Vektorräumen gesprochen, aber kein einziges konkretes Beispiel für derartige Konstrukte

genannt. Als **ein** derartiges Beispiel, das aber bereits wesentlich über die elementarmathematischen Vorstellungen von Vektoren im Anschauungsraum hinaus geht, werde ich jetzt Mengen von Funktionen diskutieren, die derart definiert sind, dass sie die Axiome eines Vektorraums erfüllen. *Eine* derartige Menge von Funktionen ist z.B. die der auf einem Volumen $V \subseteq \mathbb{R}^3$ definierten stetig differenzierbaren und quadratintegrierbaren reellwertigen Funktionen:

$$\left\{ f(\vec{r}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^1; \int_V |f(\vec{r})|^2 \cdot d^3r < \infty \right\} \quad (7.131)$$

Die Verknüpfungoperation \oplus zwischen den beiden Funktionen führen wir auf die Addition reeller Zahlen zurück:

$$(f_1 \oplus f_2)(\vec{r}) = f_1(\vec{r}) + f_2(\vec{r}) \quad (7.132)$$

Wie man sich leicht überzeugt, sind für dieses Konstrukt die Axiome eines Vektorraums erfüllt. Insbesondere ist jede Linearkombination von Funktionen aus diesem Raum wieder stetig differenzierbar und quadratintegrierbar. Des weiteren definieren wir folgende Operation zwischen 2 Elementen aus diesem Raum:

$$\langle f_1 | f_2 \rangle = \int_V f_1(\vec{r}) \cdot f_2(\vec{r}) \cdot d^3r \quad (7.133)$$

Wie man wiederum durch Nachrechnen unmittelbar zeigen kann, erfüllt diese Rechenvorschrift die Axiome eines *Skalarproduktes*. Insbesondere ist wegen der Quadratintegrierbarkeit der Funktionen diese Rechenvorschrift immer wohl definiert,

$$|\langle f_1 | f_2 \rangle| < \infty \quad (7.134)$$

Über dieses Skalarprodukt ist die *Länge* (die Norm) eines Vektors (also einer Funktion aus diesem Raum) und damit auch der *Abstand* 2-er Funktionen wohl definiert,

$$d(f_1, f_2) = |\langle f_1 | f_2 \rangle| \quad (7.135)$$

Wenn wir also im Folgenden von der Frage der *Konvergenz* von Funktionen-Folgen innerhalb dieses Raumes reden, ist immer die Konvergenz bzgl. des so definierten Abstandes gemeint:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} (f_i) = F \Leftrightarrow \lim_{i \rightarrow \infty} \langle f_i - F | f_i - F \rangle = 0 \quad (7.136)$$

Man kann nun beweisen, dass der von uns betrachtete Funktionenraum in diesem Sinnen *vollständig* ist. D.h. der *Grenzwert* jeder innerhalb dieses Raumes definierten konvergenten Folge ist eine ebenfalls stetig differenzierbare quadratintegrierbare Funktion. Auf diese Weise haben wir dann auch den Begriff der *Gleichheit* innerhalb dieses

Funktionen-Raumes neu definiert: Wir bezeichnen 2 Funktionen nun als *gleich*, wenn der über die Gl. 7.135 definierte Abstand zwischen ihnen den Wert 0 hat.

Wir suchen nun eine Basis dieses Vektorraums. Wie man ebenfalls (und leicht) beweisen kann, ist die Dimension dieses Raum unendlich. Wir suchen also eine Menge von linear unabhängigen Vektoren, deren Mächtigkeit zumindest abzählbar unendlich ist, und die wir dann z.B. nach dem Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahren orthonormieren können. Um an dieser Stelle konkret fortfahren zu können, müssen wir insbesondere das Integrationsvolumen, das dem betrachteten Funktionenraum zu Grunde gelegt ist, präzisieren. Ich werde mich im Folgenden auf einige wenige Beispiele beschränken, die überdies alle als Basis des jeweiligen Vektorraums zu Funktionensystemen führen werden, die in der Physik eine wichtige Rolle spielen.

Die mathematische Disziplin, die sich in dieser Weise mit Mengen von Funktionen befasst, ihnen Eigenschaften zuordnet und Zusammenhänge zwischen ihnen herstellt, an die wir über die elementare Geometrie des Anschauungsraumes intuitiv gewöhnt sind, ihnen also Längen, Winkel und andere Eigenschaften zuordnet, wird allgemein als Funktional-Analysis bezeichnet. Als einführende Literatur in dieses Fachgebiet nenne ich [35].

Die Legendre-Polynome (-)

. Bezeichnung \mathfrak{F}_L durch eine andere ersetzen ? -

In unserem 1. konkreten Beispiel beschränken wir uns auf den Fall der reellwertigen 1-dimensionalen Funktionen $f : \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1$ und definieren als Integrations"Volumen" das Intervall $-1 \leq x \leq +1$. Wir definieren also als den zu betrachtenden Funktionenraum \mathfrak{F}_L die Menge der im Intervall $[-1; +1]$ stetig differenzierbaren und quadratintegrierbaren Funktion

$$\mathfrak{F}_L = \left\{ f(x) : \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1; \int_{-1}^{+1} |f(x)|^2 \cdot dx < \infty \right\} \tag{7.137}$$

Als Skalarprodukt definieren wir den Ausdruck

$$\langle f | g \rangle = \int_{-1}^{+1} f(x) \cdot g(x) \cdot dx \tag{7.138}$$

Wir beginnen unsere Suche nach einer Basis für den Funktionen-Raum der in diesem Intervall stetig differenzierbaren und quadrat-integrierbaren Funktionen, indem wir die Funktionen

$$f_i(x) = x^i ; i \geq 0 \tag{7.139}$$

naher untersuchen. Offenbar sind diese Funktionen alle linear unabhangig, jedoch (noch) nicht orthogonal:

$$\langle f_i | f_j \rangle = \int_{-1}^{+1} x^{i+j} \cdot dx = \left[\frac{x^{i+j+1}}{i+j+1} \right]_{-1}^{+1} \quad (7.140)$$

$$= \frac{2}{i+j+1} \quad \forall (i+j) = 2 \cdot n \text{ also insbes. auch f. } i=j \quad (7.141)$$

$$= 0 \text{ sonst} \quad (7.142)$$

Sie lassen sich jedoch nach dem Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahren (Glen 7.125, 7.126 und 7.127) zu einem Satz von orthonormierten Vektoren umrechnen. Dieser leicht durchschaubare, aber mit einem gewissen Zeitaufwand verbundene Rechengang ist Gegenstand der Aufgabe 3 (a).

Leider hat es sich in der Literatur eingeburgert, nicht mit den orthonormierten Vektoren selbst umzugehen, sondern mit den um einen Umrechnungsfaktor veranderten Vektoren:

$$L_i(x) = L_i^{(0)}(x) \cdot \sqrt{\frac{2}{2 \cdot i + 1}} \quad (7.143)$$

Die in dieser Gl. 7.143 als $L_i^{(0)}(x)$ bezeichneten Vektoren sind orthonormiert, wahrend fur die Vektoren $L_i(x)$ die Beziehung

$$\langle L_i(x) | L_j(x) \rangle = \frac{2}{2 \cdot i + 1} \cdot \delta_{i,j} \quad (7.144)$$

gilt. Die ersten 6 Elemente der auf diese Weise berechneten orthogonalen Vektoren lauten

$$L_0(x) = 1 \quad (7.145)$$

$$L_1(x) = x \quad (7.146)$$

$$L_2(x) = \frac{1}{2} \cdot (3 \cdot x^2 - 1) \quad (7.147)$$

$$L_3(x) = \frac{1}{2} \cdot (5 \cdot x^3 - 3 \cdot x) \quad (7.148)$$

$$L_4(x) = \frac{1}{8} \cdot (35 \cdot x^4 - 30 \cdot x^2 + 3) \quad (7.149)$$

$$L_5(x) = \frac{1}{8} \cdot (63 \cdot x^5 - 70 \cdot x^3 + 15 \cdot x) \quad (7.150)$$

$$L_6(x) = \frac{1}{16} \cdot (231 \cdot x^6 - 315 \cdot x^4 + 105 \cdot x^2 - 5) \quad (7.151)$$

Ich gebe auch noch (ohne Beweis) die allgemeine Form des n -ten Elementes dieser Vektoren an:

$$\begin{aligned}
 L_n(x) &= \sum_{k=0}^{k_m} (-1)^k \cdot \frac{(2 \cdot n - 2 \cdot k)! \cdot x^{n-2 \cdot k}}{(n-k)! \cdot (n-2 \cdot k)! \cdot k! \cdot 2^n} \text{ wobei} & (7.152) \\
 k_m &= \frac{n}{2} \quad \forall n = 2 \cdot i \\
 &= \frac{n-1}{2} \quad \text{sonst}
 \end{aligned}$$

Eine zur Berechnung dieser Polynome häufig benutzte Beziehung ist auch die sog. *Rodrigues-Formel*, benannt nach dem französischen Bankier, Mathematiker und Sozialreformer *Benjamin Olinde Rodrigues* (* 1795 in Bordeaux; † 1851 in Paris)

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \tag{7.153}$$

Diese abzählbar endlich vielen und (bis auf den Faktor $\sqrt{\frac{2 \cdot i + 1}{2}}$, s. Gl. 7.143) orthonormierten Polynome haben die Bezeichnung *Legendre-Polynome* erhalten. Weshalb sie oft auch als die *zonalen Kugelfunktionen* bezeichnet werden, werden wir im Absatz *Die Kugelfunktionen* (ab S. 678) verstehen lernen. Es gilt nun die Aussage

Theorem 145 *Die z.B. über die Gl. 7.152 definierten Polynome*

$$\left\{ L_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2 \cdot n + 1}{2}} \cdot L_n(x) \right\} \tag{7.154}$$

bilden eine vollständige orthonormierte Basis des durch die Gl. 7.137 definierten Funktionenraumes \mathfrak{F}_L .

Den Beweis dieses Satzes findet der Leser z.B. in XXX (XXX: Das entsprechende Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.).

Ihre besondere Bedeutung für die Physik erhalten die Legendre-Polynome dadurch, dass jedes Legendre-Polynom $L_n(x)$ die zugehörige Differenzialgleichung

$$(1 - x^2) \cdot \frac{d^2 L_n(x)}{dx^2} - 2 \cdot x \cdot \frac{dL_n(x)}{dx} + n \cdot (n + 1) \cdot L_n(x) = 0 \tag{7.155}$$

erfüllt. Der Beweis der Gl. 7.155 ist Gegenstand der Aufgabe 4. Für diesen Beweis - ebenso wie für diverse andere Berechnungen mit Hilfe der Legendre-Polynome - sind die nachfolgend (wieder ohne Beweis) aufgeführten Rekursionsformeln:

$$(x^2 - 1) \cdot \frac{dL_n(x)}{dx} = n \cdot x \cdot L_n(x) - n \cdot L_{n-1}(x) \tag{7.156}$$

$$(n + 1) \cdot L_{n+1}(x) = (2 \cdot n + 1) \cdot x \cdot L_n(x) - n \cdot L_{n-1}(x) \quad (7.157)$$

hilfreich. Eine DGL von der Form der Gl. 7.155 wird allgemein als *Legendre-DGL* bezeichnet. Um den Leser vor Fehlern bei eigenen konkreten Berechnungen zu bewahren, weise ich darauf hin, dass in der o.a. Formulierung (die der in der Literatur üblichen Darstellung entspricht) die Legendre-DGL auch für die normierten Legendre-Polynome $L_n^{(0)}(x)$ ohne Änderung gültig ist, nicht aber die Rekursionsformeln 7.156 und 7.157. Diese müssen erst um die unterschiedlichen Vorfaktoren gem. Gl. 7.154 ergänzt werden.

Die Darstellung einer gegebenen Funktion als Linearkombination eines Satzes orthonormierter Basisfunktionen oder - was dasselbe ist - die Entwicklung einer Funktion nach diesem Satz von Funktionen ist aber auch eine Möglichkeit der **Approximation** dieser Funktion: Sobald wir diese Entwicklung nach einem gewissen Glied abbrechen, stellt diese endliche Summe eine - mehr oder weniger gute - Approximation der Ausgangsfunktion dar. Wie sich nun leicht beweisen lässt, ist diese nach dem n -ten Glied abgebrochene Summe von Basisfunktionen auch die **beste** Approximation der Ausgangsfunktion, die sich unter Verwendung der ersten n Basisfunktionen erreichen lässt. Der Wert eines beliebigen Gliedes in der Reihenentwicklung hängt also nicht davon ab, wieviel Glieder für die Approximation der Funktion verwendet werden.

Die Hermite'schen Polynome (-)

In unserem nächsten Beispiel beschränken wir uns weiterhin auf den Fall der reellwertigen 1-dimensionalen Funktionen $f : \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1$, erweitern aber nun das Integrations-Intervall auf die gesamte reelle Achse $(-\infty; +\infty)$. Unter diesen Bedingungen ist der Ausdruck 7.138 als Skalarprodukt nicht länger brauchbar, da die mit sehr vielen Funktionen gebildeten Integrale divergieren würden. Wir helfen uns, indem wir den die Konvergenz erzwingenden Gewichtungsfaktor e^{-x^2} ergänzen:

$$\langle f | g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \cdot f(x) \cdot g(x) \cdot dx \quad (7.158)$$

Wie der Leser leicht nachrechnen kann, erfüllt auch dieser Ausdruck die Axiome 29 bis 31 für ein Skalarprodukt. In der von mir gewählten Formulierung enthält der Exponent der e -Funktion keinen zusätzlichen multiplikativen Faktor. Die Größe x ist also dimensionslos (vgl. Kapitel 2.1). Bei jeder konkreten physikalischen Berechnung mit Hilfe der nachfolgend hergeleiteten Beziehungen muss also zunächst die Ortskoordinate durch Bezug auf eine geeignet auszuwählende Referenzlänge dimensionslos gemacht werden.

Als zu untersuchenden Funktionenraum definieren wir also nun die Menge der im gesamten \mathbb{R}^1 stetig differenzierbaren reellwertigen Funktionen, für die auch die

über das Skalarprodukt gem. Gl. 7.158 definierte Norm existiert:

$$\mathfrak{F}_H = \left\{ f(x) : \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1; \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \cdot (f(x))^2 \cdot dx < \infty \right\} \quad (7.159)$$

Wir suchen wieder eine orthonormierte Basis für diesen Funktionenraum. Als Ausgangspunkt für unsere Überlegungen wählen wir wieder die Potenzfunktionen gem. Gl. 7.139. Diese werden wir, in völliger Analogie zum Vorgehen bei der Herleitung der Legendre-Polynome (s. Absatz S. 673), nun bzgl. des jetzt geltenden Skalarproduktes nach dem Schmidtschen Verfahren orthonormieren. Dieser Rechengang ist Gegenstand der Aufgabe 3 (b).

Leider hat es sich auch in diesem Fall in der Literatur eingebürgert, nicht mit den orthonormierten Vektoren $H_n^{(0)}(x)$ selbst umzugehen, sondern mit den um einen Umrechnungsfaktor C_n veränderten Vektoren, so dass gilt

$$H_n^{(0)}(x) = C_n \cdot H_n(x) \quad (7.160)$$

Dieser Umrechnungsfaktor beträgt in diesem Fall

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!} \cdot \sqrt{\sqrt{\pi}}} \quad (7.161)$$

Die gem. der o.a. Definition nicht normierten Polynome $H_n(x)$ haben nach dem französischen Mathematiker *Charles Hermite* (* 1822 in Dieuze, Dép. Moselle (Frankreich); † 1901 in Paris) die Bezeichnung *Hermite'sche Polynome* erhalten. Ich gebe (ohne Beweis) die allgemeine Form des n -ten Elementes dieser bis auf einen veränderlichen Vorfaktor orthonormalen Basis für die betrachteten Funktionen an:

$$H_n(x) = (-1)^n \cdot \sum_{k+l=n} \frac{n!}{k! \cdot l!} \cdot (-1)^{k+l} \cdot (2 \cdot x)^k \quad (7.162)$$

Die ersten 10 Elemente dieser Basis lauten (s. Aufgabe 3 (b))

$$H_0(x) = 1 \quad (7.163)$$

$$H_1(x) = 2 \cdot x \quad (7.164)$$

$$H_2(x) = 4 \cdot x^2 - 2 \quad (7.165)$$

$$H_3(x) = 8 \cdot x^3 - 12 \cdot x \quad (7.166)$$

$$H_4(x) = 16 \cdot x^4 - 48 \cdot x^2 + 12 \quad (7.167)$$

$$H_5(x) = 32 \cdot x^5 - 160 \cdot x^3 + 120 \cdot x \quad (7.168)$$

$$H_6(x) = 64 \cdot x^6 - 480 \cdot x^4 + 720 \cdot x^2 - 120 \quad (7.169)$$

$$H_7(x) = 128 \cdot x^7 - 1344 \cdot x^5 + 3360 \cdot x^3 - 1680 \cdot x \quad (7.170)$$

$$H_8(x) = 256 \cdot x^8 - 3584 \cdot x^6 + 13440 \cdot x^4 - 13440 \cdot x^2 + 1680 \quad (7.171)$$

$$H_9(x) = 512 \cdot x^9 - 9216 \cdot x^7 + 48384 \cdot x^5 - 80640 \cdot x^3 + 3024 \cdot x \quad (7.172)$$

$$H_{10}(x) = 1024 \cdot x^{10} - 23040 \cdot x^8 + 161280 \cdot x^6 - 403200 \cdot x^4 + 302400 \cdot x^2 - 30240 \quad (7.173)$$

Es gilt nun wieder die Aussage

Theorem 146 Die z.B. über die Gl. 7.162 definierten Polynome

$$\left\{ H_n^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!} \cdot \sqrt{\sqrt{\pi}}} \cdot H_n(x) \right\} \quad (7.174)$$

bilden eine vollständige orthonormierte Basis des durch die Gl. 7.159 definierten Funktionenraumes \mathfrak{F}_H .

Den Beweis dieses Satzes findet der Leser z.B. in XXX

(XXX: Dieses Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.).

Ihre besondere Bedeutung für die Physik erhalten die Hermite'schen Polynome durch die Eigenschaft, dass jedes dieser Polynome die Differenzialgleichung

$$\frac{d^2 H_n(x)}{dx^2} - 2 \cdot x \cdot \frac{dH_n(x)}{dx} + 2 \cdot n \cdot H_n(x) = 0 \quad (7.175)$$

erfüllt. Diese DGL wird daher auch als die *Hermite'sche DGL* bezeichnet. Diese DGL aber ist identisch mit der DGL des quantenmechanischen harmonischen Oszillators, s. Abschnitt 7.9.2. Für konkrete Berechnungen oft sehr hilfreich sind die nachfolgenden Rekursiv-Beziehungen

$$H_{n+1}(x) = 2 \cdot x \cdot H_n(x) - 2 \cdot n \cdot H_{n-1}(x) \quad (7.176)$$

$$H_n(-x) = (-1)^n \cdot H_n(x) \quad (7.177)$$

Die Kugelfunktionen (-)

Wir wenden uns nun dem Fall der komplexwertigen Funktionen $\left\{ f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \hat{\mathbb{C}}^1 \right\}$ zu und wählen als Integrationsvolumen den gesamten Raum des \mathbb{R}^3 . Aus Gründen, die später offensichtlich werden, schließen wir jedoch ein gewisses, um den Koordinatenursprung konzentriertes Volumen aus:

$$|\vec{r}| > r_0 \quad (7.178)$$

Dies entspricht einer Vorsichtsmaßnahme: Wenn wir gezwungen sind, einen gewissen lokal begrenzten Bereich aus unseren Überlegungen auszuschließen, legen wir ihn in den Koordinatenursprung und dürfen sodann alle nachfolgend hergeleiteten Beziehungen verwenden. Treten diese Probleme in unserer aktuellen Fragestellung nicht auf, setzen wir einfach in allen Ergebnissen diesen Wert $r_0 = 0$.

Ausgangspunkt für die nun folgenden Überlegungen ist demnach die Menge der komplexwertigen, in dem verbleibenden Teil des \mathbb{R}^3 stetig differenzierbaren Funktionen.

$$\mathfrak{F} = \left\{ f(\vec{r}) : (\mathbb{R}^3 - \{ \vec{r} : |\vec{r}| > r_0 \}) \rightarrow \hat{\mathbb{C}}^1; f(\vec{r}) \text{ stetig differenzierbar} \right\} \quad (7.179)$$

Für diesen Raum definieren wir das Skalarprodukt als

$$\langle f | g \rangle = \int_{|\vec{r}| > r_0}^{|\vec{r}| \rightarrow \infty} f^*(\vec{r}) \cdot g(\vec{r}) \cdot d^3r \quad (7.180)$$

Daher müssen wir die Menge der zugelassenen Funktionen auf diejenigen beschränken, für die dieser Grenzwert

$$\langle f | f \rangle = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|\vec{r}| > r_0}^{|\vec{r}| = R} |f(\vec{r})|^2 \cdot d^3r \in \hat{\mathbf{C}}^1 \quad (7.181)$$

existiert. Wir nennen diesen Funktionenraum (etwas vereinfachend) die *Menge* \mathfrak{F}_K *der quadrat-integrierbaren Funktionen*:

$$\mathfrak{F}_K = \left\{ \begin{array}{l} f(\vec{r}) : (\mathbb{R}^3 - \{\vec{r} : |\vec{r}| > r_0\}) \rightarrow \hat{\mathbf{C}}^1; f(\vec{r}) \text{ stetig differenzierbar und} \\ \lim_{R \rightarrow \infty} \left(\int_{|\vec{r}| > r_0}^{|\vec{r}| = R} |f(\vec{r})|^2 \cdot d^3r \right) \in \hat{\mathbf{C}}^1 \end{array} \right\} \quad (7.182)$$

In der mathematischen Literatur wird dieser Funktionenraum meist mit dem Zeichen $L^2(V)$ gekennzeichnet. $V \subset \mathbb{R}^3$ ist dabei das Volumen, über das die Integration auszuführen ist.

Für diesen Funktionenraum suchen wir nun wieder eine Basis, d.h. eine Menge von orthonormierbaren Funktionen, die überdies vollständig sind, d.h. den gesamten Funktionenraum \mathfrak{F}_K aufspannen. Auf der Suche nach einem derartigen Satz von Funktionen gehen wir zu den Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) über und versuchen überdies den Ansatz

$$f(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (7.183)$$

Jede einzelne dieser Funktionen zeige also auf der Oberfläche jeder um den Koordinatenursprung geschlagenen Kugel ($r = const$) dieselbe Winkelverteilung

$$f(r > r_0, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (7.184)$$

Für unterschiedliche Werte von l und/oder m ergeben sich jedoch durchaus stark unterschiedliche Winkelverteilungen. Die Funktionen $R_{nl}(r)$ hängen nicht nur von ihrem eigenen Laufindex n ab, sondern ebenfalls von dem Index l , aber nicht von m . Das Integral einer Funktion $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ über diese Kugeloberfläche beträgt dann offenbar (s. Gl. XXX) (XXX: diese Gl. korrigieren)

$$\int_{\vartheta=0; \varphi=0}^{\vartheta=\pi; \varphi=2 \cdot \pi} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \cdot r^2 \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \vartheta \cdot \cos \varphi \cdot d\vartheta \cdot d\varphi = 4 \cdot \pi \cdot r_1^2 \cdot C_{lm} \quad (7.185)$$

Damit also das Integral

$$\int_{r=r_0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\cdot\pi} (R_l(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi))^2 \cdot d^3r = (4 \cdot \pi \cdot C_{lm})^2 \cdot \int_{r=r_0}^{\infty} (r_1^2 \cdot R_l(r))^2 \cdot dr \quad (7.186)$$

existiert, muss die Funktion $R_{nl}(r)$ für große r mindestens wie die Funktion $\frac{1}{r^2}$ gegen 0 streben.

In einem weiteren Schritt versuchen wir auch noch, die Variablen ϑ und φ von einander zu entkoppeln, und zwar durch den Ansatz

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = P_l(\vartheta) \cdot Q_m(\varphi) \quad (7.187)$$

Wegen dieses Produktansatzes müssen die beiden Folgen $P_l(\vartheta)$ und $Q_m(\varphi)$ von Funktionen für sich genommen orthogonal sein. Insbesondere muss also gelten:

$$\int_0^{2\cdot\pi} Q_{m_1}^*(\varphi) \cdot Q_{m_2}(\varphi) \cdot d\varphi = K_{m_1, m_2} \cdot \delta_{m_1, m_2} \quad (7.188)$$

Wegen der Stetigkeitsanforderung an die Gesamtfunktion $f(r, \vartheta, \varphi)$ müssen alle Funktionen $Q_m(\varphi)$ exakt $(2 \cdot \pi)$ -periodisch sein. Der einfachste Satz von Funktionen, der diese Bedingungen erfüllt, ist

$$Q_m(\varphi) = e^{i\cdot m \cdot \varphi} \quad (7.189)$$

Aus Gründen, die wir bald einsehen werden, führen wir nun folgende Variablen-Substitution durch:

$$\xi = \cos \vartheta \Rightarrow d\xi = -\sin \vartheta \cdot d\vartheta \quad (7.190)$$

Schreiben wir nun die Funktionen $P_l(\vartheta)$ in dieser neuen Variablen, dann gelten für diese die Grenzen

$$-1 \leq \xi \leq +1 \quad (7.191)$$

Zur Berechnung dieser Funktionen gehen wir nun wieder von den Polynomen $\{\xi^l\}$ aus und bestimmen den Satz von Linearkombinationen dieser Polynome, die zu einander orthonormiert sind. Insgesamt lautet unser Ansatz für die gesuchten Funktionen

$$f_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_n(r) \cdot P_l(\xi) \cdot e^{i\cdot m \cdot \varphi} \quad (7.192)$$

Für ihn soll gelten

$$\begin{aligned}
 & \int_{r=r_0}^{\infty} \int_{\xi=-1}^{+1} \int_{\varphi=0}^{2\cdot\pi} R_{n_1}^*(r) \cdot P_{l_1}^*(\xi) \cdot e^{-i\cdot m_1 \cdot \varphi} \cdot R_{n_2}(r) \cdot P_{l_2}(\xi) \cdot \\
 & \quad \cdot e^{i\cdot m_2 \cdot \varphi} \cdot dr \cdot r^2 \cdot \sin \vartheta \cdot \frac{d\xi}{\sin \vartheta} \cdot d\varphi \\
 = & \int_{r=r_0}^{\infty} \int_{\xi=-1}^{+1} \int_{\varphi=0}^{2\cdot\pi} R_{n_1}^*(r) \cdot P_{l_1}^*(\xi) \cdot e^{-i\cdot m_1 \cdot \varphi} \cdot R_{n_2}(r) \cdot P_{l_2}(\xi) \cdot \\
 & \quad e^{i\cdot m_2 \cdot \varphi} \cdot dr \cdot r^2 \cdot d\xi \cdot d\varphi \\
 = & \delta_{n_1 n_2} \cdot \delta_{l_1 l_2} \cdot \delta_{m_1 m_2} \tag{7.193}
 \end{aligned}$$

Wegen des faktorisierten Ansatzes können wir in dieser Gl. die Variablen umsortieren:

$$\int_{r=r_0}^{\infty} R_{n_1}^*(r) \cdot R_{n_2}(r) \cdot r^2 \cdot dr \cdot \int_{\xi=-1}^{+1} P_{l_1}^*(\xi) \cdot P_{l_2}(\xi) \cdot d\xi \cdot \int_{\varphi=0}^{2\cdot\pi} e^{i\cdot(m_2-m_1)\cdot\varphi} \cdot d\varphi \tag{7.194}$$

Die Integration über die Winkelkoordinate φ lässt sich unmittelbar ausführen:

$$\int_{\varphi=0}^{2\cdot\pi} e^{i\cdot(m_2-m_1)\cdot\varphi} \cdot d\varphi = 2 \cdot \pi \cdot \delta_{m_1 m_2} \tag{7.195}$$

Die Polynome $P_l(\xi)$, die die geforderte Bedingung der Orthonormalität

$$\int_{\xi=-1}^{+1} P_{l_1}^*(\xi) \cdot P_{l_2}(\xi) \cdot d\xi = \delta_{l_1 l_2} \tag{7.196}$$

erfüllen, kennen wir bereits. Es sind dies die im Absatz S. 673 hergeleiteten Legendre-Polynome (s. Gl. 7.154 in Verbindung mit 7.152).

Damit also schließlich der gesamte Satz von Funktionen $f_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$ orthonormiert ist, d.h. die Bedingung 7.193 erfüllt, muss auch noch gelten:

$$\int_{r=r_0}^{\infty} R_{n_1}^*(r) \cdot R_{n_2}(r) \cdot r^2 \cdot dr = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \delta_{n_1 n_2} \quad \forall l_1 = l_2 ; m_1 = m_2 \tag{7.197}$$

(XXX: Der weitere Text des Absatzes *Die Kugelfunktionen* ist noch nicht verfügbar. Er wird auch die nachfolgenden Gl. ableiten bzw. verwenden:)

$$f(r, \vartheta, \varphi) = R_l(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{7.198}$$

$$Y_{lm} = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot N_{lm} \cdot P_{lm}(\cos \vartheta) \cdot e^{i \cdot m \cdot \varphi} \quad (7.199)$$

wobei

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2 \cdot l + 1}{2} \cdot \frac{(l - m)!}{(l + m)!}} \quad (7.200)$$

$$P_{lm}(x) = (1 - x)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{|m|} \cdot P_l(x) \quad (7.201)$$

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l} \cdot \sum_{k=0}^{l/2} (-1)^k \cdot \frac{(2 \cdot l - 2 \cdot k)!}{k! \cdot (l - k)! \cdot (l - 2 \cdot k)!} \cdot x^{(l-2 \cdot k)} \quad (7.202)$$

$$\frac{1}{\sqrt{[1 + \eta^2 - 2 \cdot \eta \cdot \xi]}} = \sum_{n=0}^{\infty} \eta^n \cdot P_n(\xi) \quad (7.203)$$

$$\int_{-1}^{+1} P_0(\xi) \cdot d\xi = 2 ; \int_{-1}^{+1} P_n(\xi) \cdot d\xi = 0 \quad \forall n \neq 0 \quad (7.204)$$

Die Exponential-Funktionen (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Die Exponential-Funktionen* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Funktionen-Räume* ist noch nicht verfügbar.)

7.4.7 Operatoren / Eigenvektoren / Hermitezität (-)

(XXX: Der Kopftext des Abschnitts *Operatoren / Eigenvektoren / Hermitizität* ist noch nicht verfügbar.)

Operatoren (*)

Ein fundamentaler Begriff in der Theorie der Vektorräume ist der des *Operators*. Hierunter verstehen wir eine eindeutige Abbildung \mathbf{P} des betrachteten Vektorraums \mathbf{M}_1 in einen Vektorraum \mathbf{M}_2 ,

$$\mathbf{P} : \forall |k\rangle \in \mathbf{M}_1 \exists \text{ genau ein } |l\rangle \in \mathbf{M}_2 \text{ derart, dass } |l\rangle = \mathbf{P} |k\rangle \quad (7.205)$$

Der Operator entspricht also dem Funktionsbegriff im \mathbb{R}^1 . Dabei werden nur solche Operatoren zugelassen, die nicht aus \mathbf{M}_2 herausführen. \mathbf{M}_1 und \mathbf{M}_2 können auch identisch sein. Sind \mathbf{M}_1 und \mathbf{M}_2 Hilberträume, sind auch Differenzial- und Integraloperatoren zugelassen.

Eine wichtige Klasse von Operatoren sind *lineare Operatoren*, für die also gilt:

Axiom 32

$$\mathbf{P}(\alpha \odot |k\rangle \oplus \beta \odot |l\rangle) = \alpha \odot \mathbf{P}|k\rangle \oplus \beta \odot \mathbf{P}|l\rangle \quad \forall |k\rangle, |l\rangle \in \mathbf{M}_i \quad \text{und} \quad \forall \alpha, \beta \in \hat{\mathbf{C}} \quad (7.206)$$

Für die nun folgende Diskussion wollen wir uns auf Operatoren beschränken, die eine Abbildung des Vektorraumes \mathbf{M} in sich darstellen. Die Gesamtmenge dieser auf \mathbf{M} definierbaren linearen Operatoren wollen wir mit $\mathbf{P}(\mathbf{M})$ bezeichnen. Sobald in \mathbf{M} eine (als orthonormiert vorausgesetzte) Basis $\{|b_i\rangle\}$ vereinbart worden ist, ist sowohl $|k\rangle$ als auch $\mathbf{P}|k\rangle$ als Zeilen- oder Spaltenvektor darstellbar (s. Abschnitt 7.4.2). Und entsprechend ist jedem linearen Operator \mathbf{P} eineindeutig eine quadratische Matrix $\tilde{\mathbf{P}}$ zugeordnet, und die Berechnung $|l\rangle = \mathbf{P}|k\rangle$ erfolgt nach dem im Abschnitt 7.4.2 angegebenen Matrixkalkül,

$$\begin{pmatrix} l_1 & \dots & l_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{P}_{1,1} & \dots & \tilde{P}_{1,N} \\ \dots & \dots & \dots \\ \tilde{P}_{N,1} & \dots & \tilde{P}_{N,N} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} k_1 \\ \dots \\ k_N \end{pmatrix} \quad (7.207)$$

Die Elemente $\tilde{P}_{i,j} \in \hat{\mathbf{C}}$ dieser Matrix ergeben sich aus der Wirkung von \mathbf{P} auf die jeweiligen Basisvektoren,

$$\tilde{P}_{i,j} = \langle b_i | \mathbf{P} | b_j \rangle \quad (7.208)$$

Eigenvektoren (*)

Für die nun folgende Diskussion betrachten wir ausschließlich Vektoren $|k\rangle \neq |0\rangle$. I.a. haben die beiden Vektoren $|k\rangle$ und $\mathbf{P}|k\rangle$ wenig Gemeinsamkeiten. Es kann jedoch vorkommen, dass sie sich nur um einen Faktor $P \in \hat{\mathbf{C}}$ unterscheiden,

$$\mathbf{P}|k\rangle = P \odot |k\rangle \quad (7.209)$$

Diese Gl. 7.209 ist bei vorgegebenem Operator \mathbf{P} i.a. nicht für alle $|k\rangle \in \mathbf{M}$ erfüllt, sondern nur für ganz bestimmte $|k_n\rangle$. Diese werden *Eigenvektoren*^{||} zum Operator \mathbf{P} genannt und die komplexen Zahlen P_n die zugehörigen *Eigenwerte*. Die Gl. 7.209 bezeichnet man als die *Eigenwertgleichung* des Operators \mathbf{P} . Sie wird oft auch in der Form

$$(\mathbf{P} - P_n \odot \mathbf{1}) |k_n\rangle = |0\rangle \quad (7.210)$$

geschrieben. Dabei ist $\mathbf{1}$ der *Einheitsoperator*, der jeden Vektor unverändert lässt,

$$\mathbf{1}|k\rangle = |k\rangle \quad \forall |k\rangle \in \mathbf{M} \quad (7.211)$$

In der Matrixdarstellung zu einer orthonormierten Basis hat er die Gestalt

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (7.212)$$

^{||}Diese deutschsprachige, von Hilbert gewählte Begriffsbildung *Eigen-...* hat sich interessanterweise auch im englischsprachigen Raum eingebürgert.

D.h. der obere linke Teil dieser Matrix hat folgende Struktur: Auf der Diagonalen stehen in aufsteigender Folge die Eigenwerte von \mathbf{P} und zwar jeweils so oft wiederholt, wie der jeweiligen Entartung des Eigenwertes, also der Dimension des Untervektorraums entspricht. Jede Zeile wird linksseitig und jede Spalte nach oben hin mit Nullen aufgefüllt. Diese Aussage kann der Leser durch Ausschreiben der Eigenwertgleichung für einen beliebigen dieser Eigenvektoren unmittelbar bestätigen. Wir wollen die Abkürzung

$$\dim(\mathbf{M}) = N ; \sum_{i=1}^n \dim(UVR(P_i)) = N^* \tag{7.217}$$

verwenden. Trivialerweise gilt

$$N \leq N^* \tag{7.218}$$

Wie man sich leicht überlegen kann, gilt nur in besonderen Fällen, also nur für ganz bestimmte Operatoren das Gleichheitszeichen, während i.a. der von allen Eigenvektoren eines Operators aufgespannte Raum noch nicht den gesamten Raum \mathbf{M} umfasst. Gilt jedoch $N = N^*$, so erhält der betrachtete Operator P in dieser Basis die Gestalt

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & P_{i-1} & .0 & .0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & P_i & .0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & .0 & P_{i+1} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & P_{n-2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & P_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & P_n \end{pmatrix} \tag{7.219}$$

Die Matrix wird diagonal, und die Diagonalelemente sind mit den Eigenwerten identisch. Auf die Frage, unter welchen Bedingungen eine derartige Darstellung möglich ist, werden wir im Abschnitt 7.4.9 im Detail eingehen.

Hermitezität (*)

Mit Hilfe des im Abschnitt 7.4.5 eingeführten Skalarproduktes lässt sich eine besondere Relation zwischen den linearen Operatoren eines Vektorraums definieren, die sich als sehr hilfreich herausstellen wird. Wir nennen einen Operator \mathbf{B} *adjungiert zu* \mathbf{A} , wenn die Anwendung von \mathbf{A} auf den zweiten Vektor in einem Skalarprodukt dieselbe Auswirkung hat wie die Anwendung von \mathbf{B} auf den ersten Vektor,

$$\mathbf{B} \dagger \mathbf{A} \iff \langle \mathbf{B}l \mid k \rangle = \langle l \mid \mathbf{A}k \rangle \quad \forall \mid k \rangle, \mid l \rangle \in \mathbf{M} \tag{7.220}$$

Wir schreiben den Operator \mathbf{B} auch als \mathbf{A}^\dagger . Diese Relation ist eindeutig, d.h. es gibt nicht 2 Operatoren \mathbf{B}_1 und $\mathbf{B}_2 \neq \mathbf{B}_1$, die beide zu \mathbf{A} adjungiert sind. Einige weitere nützliche und leicht beweisbare Aussagen sind:

(XXX: Der Text zu den an dieser Stelle vorgesehenen Aussagen ist noch nicht verfügbar.)

In der Matrixdarstellung zu einer orthonormierten Basis erhält man $\widetilde{\mathbf{A}}^\dagger$ aus $\widetilde{\mathbf{A}}$, indem man jedes Matrixelement durch seinen konjugiert komplexen Wert ersetzt und überdies die Matrix transponiert, d.h. Zeilen und Spalten vertauscht,

$$\widetilde{\mathbf{A}}^\dagger = \left(\widetilde{\mathbf{A}}\right)^{*,T} \quad (7.221)$$

Von besonderer Relevanz sind nun die *selbst adjungierten Operatoren*, für die also gilt

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A} \quad (7.222)$$

Diese Eigenschaft wird nach Hermite als *Hermitezität* bezeichnet. Mit Hilfe der Gl. 7.221 schließen wir unmittelbar, dass die Diagonal-Elemente $A_{i,i}$ einer hermiteschen Matrix immer reell sind,

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A} \Rightarrow A_{i,i} \in \mathbb{R}^1 \quad (7.223)$$

Hermite'sche Operatoren haben ausschließlich reelle Eigenwerte,

$$\mathbf{P} |k_n\rangle = P_n \odot |k_n\rangle, \quad \mathbf{P}^\dagger = \mathbf{P} \Rightarrow P_n \in \mathbb{R}^1 \quad (7.224)$$

Diese Aussage folgt unmittelbar aus der Definition der Hermitezität in Verbindung mit der Antikommutativität des Skalarproduktes. Etwas schwieriger ist es, die Umkehrung dieser Aussage zu beweisen, dass also die Eigenwerte eines Operators nur dann alle reell sind, wenn der Operator hermitesch ist:

$$(\mathbf{P} |k_n\rangle = P_n \odot |k_n\rangle \Rightarrow P_n \in \mathbb{R}^1) \Rightarrow \mathbf{P}^\dagger = \mathbf{P} \quad (7.225)$$

Projektionsoperatoren (-)

Eine wichtige Klasse von Operatoren sind die Projektionsoperatoren:

Definition 149 Ein linearer Operator $\mathbf{P} \in \mathbf{P}(\mathbf{M})$ heißt Projektionsoperator, wenn gilt

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} \quad (7.226)$$

Aus der Definitionsgl. 7.226 folgt zusammen mit der Linearität des Operators unmittelbar, dass ein Projektionsoperator nur die Eigenwerte 0 und 1 haben kann. Über die Definition des Skalarproduktes können wir nun unmittelbar eine weitere wichtige Eigenschaft von Projektionsoperatoren herleiten:

(XXX: Der weitere Text des Absatzes *Hermitezität* ist noch nicht verfügbar.)

7.4.8 Verknüpfung von Operatoren (-)

In $\mathbf{P}(\mathbf{M})$ lässt sich auf naheliegende Weise die *Addition* zweier Operatoren erklären, also eine Verknüpfung, die 2 linearen Operatoren wieder einen linearen Operator zuordnet, indem nämlich diese Verknüpfung einfach auf die Addition im Vektorraum selbst zurückgeführt wird:

Definition 150 Die Addition \boxplus von 2 linearen Operatoren

$$\mathbf{P}(\mathbf{M}) \boxplus \mathbf{P}(\mathbf{M}) \rightarrow \mathbf{P}(\mathbf{M}) \tag{7.227}$$

sei definiert über die Vorschrift

$$(\mathbf{P}_1 \boxplus \mathbf{P}_2) |k\rangle = \mathbf{P}_1 |k\rangle \oplus \mathbf{P}_2 |k\rangle \quad \forall |k\rangle \in \mathbf{M} \tag{7.228}$$

Für diese Verknüpfung \boxplus sind die im Abschnitt 7.4.1 als Axiome 15 bis 18 aufgeführten Beziehungen trivialerweise erfüllt, da sich die zu beweisende Aussage ebenfalls unmittelbar auf die zugehörige Aussage bzgl. der Addition im Vektorraum selbst zurückführen lässt. Die Menge $\mathbf{P}(\mathbf{M})$ bildet daher bzgl. der Verknüpfung \boxplus eine *kommutative Gruppe*.

In ähnlicher Weise lässt sich die Verknüpfung der *Multiplikation* zweier Operatoren erklären, nämlich als Hintereinander-Ausführen der beiden Ausgangs-Operatoren:

Definition 151 Die Multiplikation \circ zweier Operatoren erfolgt nach der Vorschrift

$$(\mathbf{P}_1 \circ \mathbf{P}_2) |k\rangle = \mathbf{P}_1(\mathbf{P}_2 |k\rangle) \quad \forall |k\rangle \in \mathbf{M} \tag{7.229}$$

Es lässt sich leicht beweisen, dass

$$\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2 \in \mathbf{P}(\mathbf{M}) \Rightarrow (\mathbf{P}_1 \circ \mathbf{P}_2) \in \mathbf{P}(\mathbf{M}) \tag{7.230}$$

$$(\mathbf{P}_1 \circ \mathbf{P}_2) \circ \mathbf{P}_3 = \mathbf{P}_1 \circ (\mathbf{P}_2 \circ \mathbf{P}_3) \tag{7.231}$$

$$\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2 \in \mathbf{P}(\mathbf{M}) \Rightarrow \exists \mathbf{X}_1 \in \mathbf{P}(\mathbf{M}) \text{ mit } \mathbf{P}_1 \circ \mathbf{X}_1 = \mathbf{P}_2 \tag{7.232}$$

$$\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2 \in \mathbf{P}(\mathbf{M}) \Rightarrow \exists \mathbf{X}_2 \in \mathbf{P}(\mathbf{M}) \text{ mit } \mathbf{X}_2 \circ \mathbf{P}_2 = \mathbf{P}_1 \tag{7.233}$$

Dagegen ist diese Verknüpfung i.a. nicht kommutativ,

$$\mathbf{P}_1 \circ \mathbf{P}_2 \neq \mathbf{P}_2 \circ \mathbf{P}_1 \tag{7.234}$$

Die Definition 151 und die Gl. 7.230 bis 7.234 besagen zusammen genommen, dass $\mathbf{P}(\mathbf{M})$ bzgl. der Verknüpfung \circ eine *nicht kommutative Gruppe* bildet, wobei der Operator $\mathbf{1}$, der jeden Zustand $|k\rangle$ auf sich selbst abbildet, das neutrale Element dieser Gruppe bildet. Der Operator

$$[\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2] = \mathbf{P}_1 \circ \mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_2 \circ \mathbf{P}_1 \tag{7.235}$$

wird als der *Kommutator* von \mathbf{P}_1 und \mathbf{P}_2 bezeichnet. Er kennzeichnet eine wichtige Eigenschaft der Relation zwischen den beiden Operatoren \mathbf{P}_1 und \mathbf{P}_2 , wie wir insbesondere an folgendem wichtigen Satz erkennen:

Theorem 152 *2 Operatoren besitzen genau dann ausschließlich gemeinsame Eigenvektoren (mit i.a. unterschiedlichen Eigenwerten), wenn sie miteinander kommutieren,*

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2] = 0 &\Leftrightarrow \forall |k\rangle \in \mathbf{M} \text{ mit } (\mathbf{P}_1 |k\rangle = P_1 \cdot |k\rangle) \implies (\mathbf{P}_2 |k\rangle = P_2 \cdot |k\rangle) \\ \text{und ebenso} &: \forall |k\rangle \in \mathbf{M} \text{ mit } (\mathbf{P}_2 |k\rangle = P_2 \cdot |k\rangle) \implies (\mathbf{P}_1 |k\rangle = P_1 \cdot |k\rangle) \end{aligned} \quad (7.236)$$

Der Beweis dieses Satzes ist Gegenstand der Aufgabe 8.

Dieser Satz ist für die logische Struktur der Quantenmechanik von essentieller Bedeutung.

Ich nenne (ohne Beweis) einige den Kommutator betreffende Aussagen, die für das Rechnen mit ihm benötigt werden:

Theorem 153 *Der Kommutator 2-er Operatoren ist antisymmetrisch,*

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}] \quad (7.237)$$

linear,

$$[\mathbf{A}, (\lambda_1 \cdot \mathbf{B} + \lambda_2 \cdot \mathbf{C})] = \lambda_1 \cdot [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \lambda_2 \cdot [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \quad (7.238)$$

und es gilt die Produktregel

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B} \circ \mathbf{C}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \circ \mathbf{C} + \mathbf{B} \circ [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \quad (7.239)$$

und die Jacobi-Identität

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] = [[\mathbf{A}, \mathbf{B}], \mathbf{C}] + [\mathbf{B}, [\mathbf{A}, \mathbf{C}]] \quad (7.240)$$

(XXX: Der weitere, noch fehlende Text des Abschnitts *Verknüpfung von Operatoren* ist noch nicht verfügbar.)

7.4.9 Diagonalisierung von Operatoren (-/-)

Mit Hilfe der nun bereit gestellten mathematischen Hilfsmittel für die Verknüpfung von Operatoren wenden wir uns nun erneut der Aufgabe zu, den von allen Eigenvektoren eines Operators aufgespannten Raum aufzuspüren und mit dem gesamten Vektorraum \mathbf{M} zu vergleichen.

(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Abschnitts *Diagonalisierung von Operatoren* ist noch nicht verfügbar.)

7.4.10 Maßtheorie und Wahrscheinlichkeitsrechnung (-)

Wahrscheinlichkeitstheoretische Begriffsbildungen begegnen dem Physiker nicht nur in der Quantenmechanik, sondern gleichgewichtig auch in der Thermodynamik, der Elektrostatik, der Gravitationstheorie kontinuierlich verteilter Massen, kurzum überall dort, wo extensive physikalische Größen nicht lokalisiert, sondern über ein Volumen endlicher Größe verteilt sind. (XXX: präzisieren) Die maßtheoretischen Voraussetzungen, die für eine logisch saubere Einführung wahrscheinlichkeitstheoretischer Begriffe benötigt werden, sind generell überall dort von großem Nutzen, wo physikalische Größen sowohl kontinuierlich als auch diskret über einen gewissen Parametersatz verteilt sein können. Als Beispiele für derartige Situationen nenne ich:

- Das Wasserstoff-Atom aus positiv geladenem Atomkern und negativ geladenem Elektron. Es besitzt diskret verteilte sog. gebundene Zustände mit einer wohl definierten Bindungsenergie sowie die sog. ungebundenen Zustände, die kontinuierlich verteilt sind, sobald man als Aufenthaltsraum das gesamte Universum zulässt.
- (XXX: weiteres Beispiel)

Die nachfolgende äußerst kompakte Einführung in diese beiden eng miteinander verknüpften mathematischen Theorien kann wieder nur für diejenigen Leser ausreichend sein, denen diese Begriffsbildungen zumindest teilweise schon einmal begegnet sind. Als Vorschläge zum vertieften Studium nenne ich [18] und [19].

Ich beginne diesen Abschnitt mit einer Skizze der als *Maßtheorie* bezeichneten Erweiterung des elementaren nach Riemann benannten Integralbegriffs (Abschnitt 3.1.8). Denn wir werden diesen erweiterten Integralbegriff für die logisch saubere Einführung einiger wahrscheinlichkeitstheoretischer Begriffe benötigen.

Das Lebesgue-Integral (-/-)

Aufgabe der Integralrechnung (einer reellen Veränderlichen x) ist es, den Flächeninhalt einer vorgegebenen Funktion $f(x)$ unter dem Intervall $[a; b]$ zu berechnen, s. Abschnitt 3.1.8. Nun gibt es aber Funktionen, die nicht, wie im Abschnitt 3.1.8 erläutert, *Riemann-integrierbar* sind, deren Verwendung für die Beschreibung physikalischer Zusammenhänge aber dennoch sehr nützlich ist, z.B. die bereits mehrfach benutzte Diracsche δ -Funktion (Kapitel 2.5) oder Funktionen mit Stufenverhalten wie die in der Abb. 3 wiedergegebene Funktion. Bei der δ -Funktion lässt sich z.B. keine Folge von Intervallverfeinerungen angeben, bei der die Intervalle die Unstetigkeitsstelle bei $x = 0$ mit enthalten, und die dennoch auf Zahlenfolgen führt, die im bisher definierten Sinne konvergent sind.

Wir suchen also nun eine Verallgemeinerung des Riemannschen Begriffs eines Flächen- bzw. Rauminhaltes, der auch auf Funktionen wie z.B. die Diracsche δ -Funktion anwendbar ist. Diese Verallgemeinerung gelang 1902 dem französischen

Mathematiker *Henri Léon Lebesgue* (*1875 in Beauvais; † 1941 in Paris) im Rahmen seiner Dissertation ([21]) mit dem von ihm konzipierten, heute nach ihm benannten *Lebesgue-Maß*.

(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Absatzes *Das Lebeque-Integral* ist noch nicht verfügbar.)

Historische Entwicklung der Wahrscheinlichkeitstheorie (*)

Den ersten Versuch, den Begriff der *Wahrscheinlichkeit* mathematisch zu fassen, unternahm 1812 Laplace mit dem *kombinatorischen Ansatz*

$$p = \frac{\text{Anzahl der günstigen Fälle}}{\text{Anzahl der möglichen Fälle}} \quad (7.241)$$

So gibt es z.B. beim Würfeln mit einem 6-flächigen Würfel, dessen Flächen mit den Zahlen 1 bis 6 belegt sind, 6 verschiedene mögliche Ausgänge eines einzelnen Würfel-experimentes. Davon ergeben z.B. 3 ein geradzahliges Ergebnis. Sofern gesichert ist, dass diese 6 Basisergebnisse exakt gleichwertig sind, also gleich häufig auftreten, gilt daher

$$p(\text{geradzahliges Ergebnis}) = \frac{3}{6} = 0,5 \quad (7.242)$$

Dieser Ansatz ist beschränkt auf den rein kombinatorischen Idealfall von Zufallsexperimenten mit endlich vielen möglichen Ergebnissen, die einander exakt gleichwertig sein müssen. Er ist nur unwesentlich erweiterbar.

Der nächste Definitionsversuch von *Richard Edler v. Mises* (* 1883 in Lemberg/österr. Galizien (heute Lwiw/Ukraine); † 1953 in Boston/USA) aus dem Jahr 1919 geht von der Möglichkeit der beliebig häufigen und unabhängigen Wiederholbarkeit eines Zufallsexperimentes aus und definiert als Wahrscheinlichkeit für das Ergebnis *I* die Größe

$$p(I) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\text{Anzahl der Wiederholungen mit dem Ergebnis I}}{\text{Gesamtanzahl der Wiederholungen}} \quad (7.243)$$

Diese Definition setzt jedoch zusätzlich zu der Möglichkeit der beliebig häufigen und unabhängigen Wiederholbarkeit auch bereits die Existenz dieses Grenzwertes voraus, ohne angeben zu können, unter welchen Bedingungen und für welchen Konvergenzbegriff dieser Grenzwert existiert. Eine mathematisch saubere Einführung muss daher den umgekehrten Weg gehen und zunächst den Begriff der Wahrscheinlichkeit definieren. Erst danach kann bewiesen werden, unter welchen Voraussetzungen ein solcher Grenzwert existiert. Dieser Weg gelang 1933 *Andrej Nikolajewitsch Kolmogorov* (* 1903 in Tambow/Russland; † 1987 in Moskau) durch einen ausschließlich axiomatischen Aufbau der Wahrscheinlichkeitstheorie ([20]).

Das axiomatische Konzept der Wahrscheinlichkeitstheorie (*)

Die Basis für den axiomatischen Aufbau der Wahrscheinlichkeitstheorie bildet wieder eine Grundmenge \mathbf{M} , die jetzt die *Menge der möglichen Ergebnisse* oder der *Stichprobenraum* genannt wird. Dieser Grundmenge wird ein System \mathcal{K} von Teilmengen $\mathbf{K} \in \mathcal{K}$ zugeordnet, die als *Ereignisse* bezeichnet werden. Ein Ereignis ist also eine Zusammenfassung einer bestimmten Menge von möglichen Ergebnissen. Z.B. ist beim Würfelexperiment das Ereignis *geradzahlige Augenzahl* die Zusammenfassung der Ergebnisse 2, 4 und 6. Ich rate dem Leser, an dieser Stelle kurz innezuhalten und sich den Unterschied zwischen den Ergebnissen und den Ereignissen noch einmal klar zu machen. Das wird ihn vor einer vorzeitigen Begriffsverwirrung bewahren.

Das System \mathcal{K} der Ereignisse muss nun so beschaffen sein, dass die Mengenoperationen *Vereinigung* (Symbol \cup) und *Komplement* (Symbol \bar{X}) nicht aus ihm herausführen,

Axiom 33 $\mathbf{K} \in \mathcal{K} \Rightarrow \mathbf{K} \subset \mathbf{M}$

Axiom 34 $\mathbf{K}_i \in \mathcal{K} \Rightarrow \bigcup_{i=1}^{\infty} \mathbf{K}_i \in \mathcal{K}$

Axiom 35 $\mathbf{K} \in \mathcal{K} \Rightarrow \bar{\mathbf{K}} \in \mathcal{K}$

Axiom 36 $\mathbf{M} \in \mathcal{K}$

Wie sich leicht beweisen lässt, führt dann auch die Operation *Durchschnitt* (Symbol \cap) nicht aus \mathcal{K} hinaus,

Theorem 154

$$\mathbf{K}_i \in \mathcal{K} \Rightarrow \bigcap_{i=1}^{\infty} \mathbf{K}_i \in \mathcal{K} \tag{7.244}$$

Eine derartige Struktur bezeichnet man als einen σ -Ring über \mathbf{M} . Auf diesem σ -Ring wird jetzt eine Abbildung in das Intervall der reellen Zahlen zwischen 0 und 1 definiert,

$$p : \mathcal{K} \rightarrow [0, 1] \in \mathbb{R}^1 \tag{7.245}$$

mit folgenden Eigenschaften:

Axiom 37 Die Funktion p ist normiert, und

$$p(\{0\}) = 0 \ ; \ p(\mathbf{M}) = 1 \tag{7.246}$$

Axiom 38 sie ist additiv,

$$\mathbf{K}_1 \cap \mathbf{K}_2 = \{0\} \Rightarrow p(\mathbf{K}_1 \cup \mathbf{K}_2) = p(\mathbf{K}_1) + p(\mathbf{K}_2) \tag{7.247}$$

Diese Funktion p wird als *Wahrscheinlichkeit* oder besser als *Wahrscheinlichkeitsmaß* bezeichnet. Da p über diese Axiome hinaus durch nichts weiter festgelegt ist, kann das Wahrscheinlichkeitsmaß einer nicht leeren Menge $\mathbf{K}_j \neq \{0\}$ durchaus gleich 0 sein. Sprachlich erfasst man dieses Faktum durch die Aussage

$$\mathbf{K}_j \neq \{0\} \ ; \ p(\mathbf{K}_j) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{K}_j \text{ ist fast unmöglich} \quad (7.248)$$

Aus Gl. 7.248 folgt in Verbindung mit dem Axiom 38

$$p(\mathbf{K}_j) = 1 \Leftrightarrow \mathbf{K}_j \text{ ist fast sicher} \quad (7.249)$$

Als nächstes definieren wir die *Unabhängigkeit* zweier Ereignisse:

Definition 155

$$\mathbf{K}_1 \text{ und } \mathbf{K}_2 \text{ sind unabhängig} \Leftrightarrow p(\mathbf{K}_1 \cap \mathbf{K}_2) = p(\mathbf{K}_1) \cdot p(\mathbf{K}_2) \quad (7.250)$$

Wenn dem Leser diese Begriffsbildung noch völlig neu ist, wird er vermutlich nicht unmittelbar einsehen, dass diese abstrakte Definition mit unserer anschaulichen Vorstellung von der *Unabhängigkeit* von Ereignissen verträglich ist. Durch Gewöhnung wird der Leser aber feststellen, dass ihn diese Definition in der Tat nicht in Konflikte mit seiner Anschauung bringen wird, s. z.B. Aufgabe 9.

Zufallsgrößen / Verteilungsfunktion / Wahrscheinlichkeitsdichte (*)

In der bisherigen Definition brauchten die Merkmale zur Unterscheidung der Ergebnisse, also der Elemente des Stichprobenraums, keinesfalls Zahlen zu sein. Vielmehr kann man sich eine beliebige verbale, aber eindeutige Beschreibung vorstellen, z.B. durch Farben, Formen, Geschmacksnuancen oder durch beliebige Kombinationen derartiger Merkmale. Um jedoch mit Wahrscheinlichkeiten *rechnen* zu können, bietet es sich an, diese qualitativen Merkmale in den Bereich der reellen Zahlen abzubilden, genauer formuliert jedem Ergebnis eine reelle Zahl zuzuordnen. Die Ereignisse als Teilmengen des Stichprobenraums werden dadurch auf Teilmengen des \mathbb{R}^1 abgebildet. Die o.a. mengentheoretischen Anforderungen an die Struktur der Ereignismengen (Axiome 33 bis 36) reduzieren sich nun auf die Forderung, dass das Urbild eines jeden nach oben abgeschlossenen Intervalls des \mathbb{R}^1 zu dieser Ereignismenge gehört. Eine derartige Abbildung bezeichnen wir als eine *Zufallsgröße* a :

Definition 156 Eine Zufallsgröße a ist ein Abbildung $\mathbf{M} \rightarrow \mathbb{R}^1$ mit der Eigenschaft

$$\{m \in \mathbf{M} : a(m) \leq x\} \in \mathcal{K} \quad \forall x \in \mathbb{R}^1 \quad (7.251)$$

Als abkürzende Schreibweise führen wir ein

$$p(\{m \in \mathbf{M} : a(m) \leq x\}) = p(a \leq x) = F_a(x) \quad (7.252)$$

Die Funktion $F_a(x)$ ist zum einen eine ganz gewöhnliche Funktion, eine Abbildung des \mathbb{R}^1 in das Intervall $[0, 1]$. Man kann mit ihr umgehen, wie man es aus der elementaren Analysis gewohnt ist. Andererseits ist sie eineindeutig auf die Wahrscheinlichkeitswerte $p(a \leq x)$ abgebildet, d.h. man kann alle Aussagen und Regeln über Wahrscheinlichkeiten unmittelbar auf sie anwenden, s. z.B. den Satz 157. Sie wird als die *Verteilungsfunktion* der Zufallsgröße a bezeichnet. Aus der Definition von $F_a(x)$ folgt unmittelbar deren Monotonie:

$$x_j > x_i \Rightarrow F_a(x_j) \geq F_a(x_i) \quad (7.253)$$

Diese Begriffsbildungen von Zufallsgröße a und Verteilungsfunktion $F_a(x)$ lassen sich problemlos auf den Fall mehrerer Dimensionen erweitern, bei dem also N unterschiedliche Mengen \mathbf{M}_1 bis \mathbf{M}_n von Ergebnissen in den endlichen-dimensionalen \mathbb{R}^N abgebildet werden und so einen *Zufallsvektor* $\vec{a} = (a_1, \dots, a_N)$ definieren mit der Eigenschaft

$$\{m_i \in \mathbf{M}_i : a_i(m_i) \leq x_i\} \in \mathcal{K}_i \quad \forall x_i \in \mathbb{R}^1 \quad ; \quad i = 1, \dots, N \quad (7.254)$$

Die Verteilungsfunktion $F_{\vec{a}}(\vec{x})$ ist jetzt definiert als

$$F_{\vec{a}}(\vec{x}) = p(a_1 \leq x_1 \text{ und } \dots \text{ und } a_N \leq x_N) \quad (7.255)$$

Wegen der eineindeutigen Zuordnung von Wahrscheinlichkeitsmaß und Verteilungsfunktion lässt sich die Unabhängigkeit von Zufallsgrößen direkt auf die Unabhängigkeit von Ereignissen zurückführen:

Theorem 157 *Die Zufallsgrößen a_1 und a_2 sind genau dann unabhängig, wenn für die Verteilungsfunktion des aus a_1 und a_2 zusammengesetzten Zufallsvektors $\vec{a} = (a_1, a_2)$ gilt:*

$$F_{\vec{a}}(\vec{x}) = F_{a_1}(x_1) \cdot F_{a_2}(x_2) \quad (7.256)$$

Der Einfachheit halber betrachten wir im folgenden überwiegend nur den Fall $N = 1$. Der Übergang zum Fall $N > 1$ ist i.a. ohne größere logische Probleme vollziehbar.

Sofern die Funktion $F_a(x)$ differenzierbar ist, können wir an ihrer Stelle auch ihre Ableitung zur Berechnung konkreter Fragestellungen heranziehen,

$$f_a(x) = \frac{dF_a(x)}{dx} \quad (7.257)$$

Diese Funktion wird als *Wahrscheinlichkeitsdichte* bezeichnet. Für sie gilt

$$p(a \in [r, s]) = \int_{x=r}^{x=s} f_a(x) \cdot dx ; s > r \quad (7.258)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist **keine** Wahrscheinlichkeit, die für Wahrscheinlichkeiten geltenden Rechenregeln sind auf sie **nicht** anwendbar! Sie ist auch nicht dimensionslos wie die Verteilungsfunktion, sondern hat als Dimension den Kehrwert der Dimension der Integrationsvariablen x^{**} .

Nun ist aber keinesfalls jede Verteilungsfunktion differenzierbar im Sinne der elementaren Analysis (s. Abschnitt 3.1.7): Jede diskret verteilte Zufallsgröße, z.B. die des klassischen Würfelexperimentes mit den 6 möglichen Ergebnissen 1, 2, 3, 4, 5, 6 hat eine Verteilungsfunktion von der Struktur der Abb. 3. An den Stellen $x =$

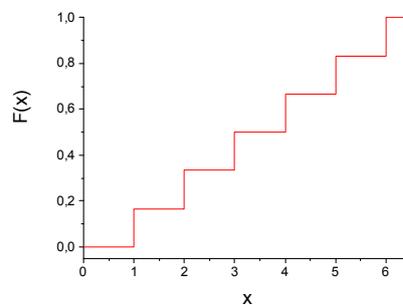


Abb. 3 Verteilungsfunktion $F(x)$ des Würfelexperimentes

1, 2, 3, 4, 5, 6 (die den Ergebnissen durch die Abbildung a zugeordnet worden sind) springt die Verteilungsfunktion jeweils um den Betrag $1/6$. $F_a(x)$ ist daher an diesen Stellen nicht differenzierbar. Es bedarf eines erweiterten Funktions- und Integrationsbegriffes, um auch für diese Fälle eine Wahrscheinlichkeitsdichte definieren zu können. Diese Aufgabe wurde von der mathematischen Theorie der Distributionen und von der Maßtheorie bewältigt (s. Absatz S.689).

In der physikalischen Praxis treten allerdings überwiegend nur Zufallsgrößen auf, deren Verteilungsfunktion bis auf abzählbar viele Stellen differenzierbar ist, und die an diesen Stellen einen Sprung endlicher Größe ausführt. An einer derartigen Sprungstelle x_i gilt also

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} F_a(x_i - \delta x) - \lim_{\delta x \rightarrow 0} F_a(x_i + \delta x) = p(a = x_i) > 0 \quad (7.259)$$

Die Abb. 4 zeigt ein Beispiel einer derartigen Verteilungsfunktion. Einer solchen

**Daher hat der in der Kernphysik definierte sog. differentielle Wirkungsquerschnitt bei Streuexperimenten z.B. die Dimension $sterad^{-1}$. Durch ungeschickten Umgang mit dem Raumwinkel wird daraus dann in vielen Publikationen und Lehrbüchern die Einheit $Länge^2$.

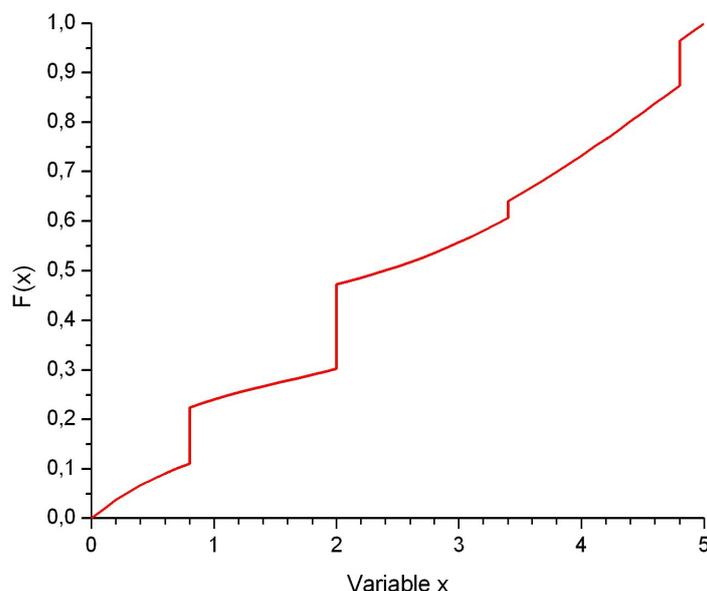


Abb. 4 Verteilungsfunktion $F(x)$ einer teilweise kontinuierlich und teilweise diskret verteilten Zufallsgröße.

Verteilungsfunktion können wir eine Wahrscheinlichkeitsdichte zuordnen, die in allen offenen Intervallen außerhalb dieser Stellen wohl definiert und endlich ist, während sie an den Unstetigkeitsstellen x_i einen entsprechend gewichteten δ -Funktionscharakter aufweist,

$$f_a(x) = f_a^{(1)}(x) + \sum_{i=1}^n p(a = x_i) \cdot \delta(x - x_i) \tag{7.260}$$

Die in der Gl. 7.260 auftretende Funktion $f_a^{(1)}(x)$ ist überall differenzierbar. Die gesamte Funktion $f_a(x)$ ist im Sinne der Maßtheorie Lebesgue-integrierbar und es gilt für sie weiterhin die Gl. 7.258.

Transformation von Zufallsgrößen (-)

Wir behandeln nun den Fall, dass eine Zufallsgröße a , die zunächst als Funktion der Variablen x vorgegeben ist, nun als Funktion der Variablen z benötigt wird. Damit diese Transformation zulässig ist, ohne dass die für eine Zufallsgröße geforderten Axiome verletzt werden, müssen gewisse Forderungen an die Transformationsbeziehung $x = x(z)$ gestellt werden. Es gilt der

Theorem 158 Für jede streng monotone Funktion $x = x(z)$ gilt:

Ist $F_a(x)$ die Verteilungsfunktion der Zufallsgröße a bzgl. der Variablen x , so ist $F_a(x(z))$ die Verteilungsfunktion von a bzgl. der Variablen z .

Um für die Zufallsgröße a an Stelle von x die Variable z verwenden zu können, muss also lediglich die Umrechnungsvorschrift $x = x(z)$ in die Verteilungsfunktion eingesetzt werden, um die neue Verteilungsfunktion $F_a(z)$ zu erhalten. Dieselbe Vorgehensweise ist jedoch für die Wahrscheinlichkeitsdichte **nicht** zulässig. Entsprechend den Regeln der Differenzialrechnung gilt vielmehr:

Theorem 159 Ist $f_a(x)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallsgröße a bzgl. der Variablen x und ist die Transformationsbeziehung $x = x(z)$ streng monoton, so berechnet sich die Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallsgröße a bzgl. der neuen Variablen z gem.

$$f_a(z) = f_a(x(z)) \cdot \frac{dx(z)}{dz} \quad (7.261)$$

Auch und gerade wenn im Zuge einer konkreten wahrscheinlichkeitstheoretischen Berechnung ein Wechsel der unabhängigen Variablen erforderlich wird, ist es also angebracht, so lange als möglich mit den jeweiligen Verteilungsfunktionen zu arbeiten und erst möglichst spät auf die Dichten überzugehen.

Erwartungswert und höhere Momente (*)

Wir beginnen diesen Absatz mit folgender Definition:

Definition 160 Der Erwartungswert $\langle a \rangle$ einer Zufallsgröße a ist definiert als

$$\langle a \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f_a(x) \cdot dx \quad (7.262)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_a(x)$ ist wieder im erweiterten Funktionsbegriff gem. Gl. 7.260 zu verstehen.

Ähnlich wie beim Begriff der Unabhängigkeit von Ereignissen und von Zufallsgrößen ist dem Leser vielleicht wieder nicht unmittelbar einsichtig, dass diese Definition eines Erwartungswertes verträglich ist mit der intuitiven Vorstellung von dem Wert, den man im Mittel zu erwarten hat. Auch an dieser Stelle hilft primär die Gewöhnung. Ich werde jedoch auf die Frage noch einmal eingehen. Die hier benutzte Kennzeichnung des Erwartungswertes ähnelt stark den für die Kennzeichnung des Skalarproduktes gewählten Symbolen (s. Absatz *Norm / Skalarprodukt / Orthogonalität* S. 667). Im strengen mathematischen Sinne handelt es sich hierbei um 2 völlig unterschiedliche Begriffsbildungen. Ich gehe davon aus, dass hierdurch keine Verwechslungen auftreten.

Aus der Definition des Erwartungswertes ergeben sich unmittelbar einige Rechenregeln,

Theorem 161 Die Berechnung des Erwartungswertes ist ein linearer Projektionsoperator,

$$\langle \alpha \cdot a_1 + \beta \cdot a_2 \rangle = \alpha \cdot \langle a_1 \rangle + \beta \cdot \langle a_2 \rangle \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}^1 \quad (7.263)$$

$$\langle \langle a \rangle \rangle = \langle a \rangle \quad (7.264)$$

Theorem 162 Für 2 unabhängige Zufallsgrößen a_1 und a_2 gilt

$$\langle a_1 \cdot a_2 \rangle = \langle a_1 \rangle \cdot \langle a_2 \rangle \quad (7.265)$$

Die Beweisführung dieser beiden Sätze überlasse ich wieder dem Leser.

Theorem 163 Für eine beliebige Lebesgue-integrierbare Funktion $g(a)$ einer Zufallsgröße a gilt

$$\langle g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} g(a(x)) \cdot f_a(x) \cdot dx \quad (7.266)$$

Eine nicht unwesentliche Bedeutung haben die Erwartungswerte ganz bestimmter Funktionen g , nämlich der höheren Potenzen von a , bevorzugt in der zentrierten Variante:

Definition 164 Das k -te zentrierte Moment von a berechnet sich gem.

$$\mu_k(a) = \langle (a - \langle a \rangle)^k \rangle \quad (7.267)$$

Insbesondere bezeichnet man das 2. zentrierte Moment als die Varianz von a ,

$$var(a) = \mu_2(a) = \langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle \quad (7.268)$$

Wie man unmittelbar nachrechnen kann, gilt

$$\mu_2(a) \geq 0 \quad \forall a \quad (7.269)$$

$$\mu_2(a) = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 \quad (7.270)$$

$$a_1 \text{ und } a_2 \text{ unabhängig} \Rightarrow \mu_2(a_1 + a_2) = \mu_2(a_1) + \mu_2(a_2) \quad (7.271)$$

Die Größe

$$\sigma(a) = \sqrt{var(a)} \quad (7.272)$$

bezeichnet man als die *Streuung* von a .

Gl. 7.270 steht in unmittelbarem logischen Zusammenhang mit dem Steiner'schen Satz der Mechanik (Abschnitt 3.3.4), Gl. 7.271 wird in der sog. *Fehlerrechnung* (s. Abschnitt 2.7.4) als *Fehlerfortpflanzungsgesetz* bezeichnet.

Kovarianz und Korrelation (-)

Im Zuge der axiomatischen Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie haben wir uns bereits mehrfach mit der Eigenschaft der Unabhängigkeit von Ereignissen und von Zufallsgrößen befasst. Jetzt werden wir Begriffsbildungen kennen lernen, die das entgegen gesetzte Verhalten quantifizieren, die also aussagen, in welchem Maße 2 Zufallsgrößen gerade **nicht** unabhängig von einander sind, sondern in irgend einer Weise mit einander verknüpft sind.

Hierzu definieren für ein betrachtetes Paar von Zufallsgrößen deren als *Kovarianz* bezeichnete Kenngröße:

Definition 165 Gegeben seien 2 Zufallsgrößen a und b . Dann bezeichnet man die Größe

$$\text{cov}(a, b) = \langle (a - \langle a \rangle) \cdot (b - \langle b \rangle) \rangle \quad (7.273)$$

als die Kovarianz der beiden Zufallsgrößen a und b .

(XXX: Der an dieser Stelle vorgesehene weitere Text zur Kovarianz ist noch nicht verfügbar. Danach folgt)

In seiner geeignet normierten Variante wird die Kovarianz als *Korrelationskoeffizient* bezeichnet:

Definition 166 Gegeben seien 2 Zufallsgrößen a und b mit von 0 verschiedener Varianz. Dann bezeichnet man die Größe

$$\rho(a, b) = \frac{\text{cov}(a, b)}{\sqrt{\text{var}(a) \cdot \text{var}(b)}} \quad (7.274)$$

als den Korrelationskoeffizienten ρ von a und b .

Offenbar gilt für alle Zufallsgrößen

$$-1 \leq \rho(a, b) \leq +1 \quad (7.275)$$

und es gilt der

Theorem 167 Für 2 abhängige Zufallsgrößen a und b gilt

$$\rho(a, b) = 0 \quad (7.276)$$

Der Beweis dieser beiden Aussagen ist Gegenstand der Aufgabe 13. Die Umkehrung des Satzes 167 ist jedoch nicht zulässig: Aus der Eigenschaft eines verschwindenden Korrelationskoeffizienten folgt nicht notwendig, dass die beiden Zufallsgrößen von einander abhängig sind.

(XXX: Der weitere Text des Absatzes *Kovarianz und Korrelation* ist noch nicht verfügbar.)

Die Dichte extensiver physikalischer Größen (-)

Bereits im Abschnitt 3.2.10 haben wir den Fall behandelt, dass eine extensive physikalische Größe (dort war es die Masse M) nicht auf einen Punkt lokalisiert, sondern über ein gewisses Volumen kontinuierlich verteilt ist. Im Abschnitt 8.1.13 werden wir diese Situation in größerer Verallgemeinerung für eine beliebige extensive Größe X diskutieren. Die durch einen Bezug auf das Volumenelement entstehende Größe

$$x(\vec{r}) = \lim_{\delta V_i \rightarrow 0} \frac{\delta X_i}{\delta V_i} \quad (7.277)$$

werden wir dann als die (volumenbezogene) *Dichte* x der Größe X bezeichnen. Diese Begriffsbildung lässt sich auch für andere Bezugsgrößen als das Volumen verwenden, z.B. für die Teilchenzahl N . An dieser Stelle stellt sich die Frage, ob es zulässig bzw. sinnvoll ist, diesen Typ von Größen ebenfalls als *Dichte* zu bezeichnen, wo wir diesen Begriff doch bereits für die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Zufallsgröße a vergeben haben. In der Tat erfüllt die Größe $x(\vec{r})$ alle Gesetze, die auch für die wahrscheinlichkeitstheoretisch definierte Dichte f_a gelten. Lediglich die Bedingung der Normierung ist (zunächst) nicht erfüllt. Diese können wir jedoch leicht erzwingen, indem wir die Dichte $x(\vec{r})$ durch den im System insgesamt enthaltenen Betrag an X dividieren,

$$x^{(\text{normiert})}(\vec{r}) = \frac{x(\vec{r})}{\int_V x(\vec{r}) \cdot d^3r} \quad (7.278)$$

Die Integration erfolgt dabei über das gesamte Volumen, in dem noch Anteile mit $x(\vec{r}) \neq 0$ enthalten sind. Wir geraten daher durch die Wortgleichheit dieser beiden Dichte-Begriffe in keinerlei Verständnisschwierigkeiten. Die Rechenregeln sind immer dieselben. Insbesondere gilt bei einer Koordinatentransformation einer Dichte x immer die Gl. 7.261!

Auch wenn im Fall einer "normalen" extensiven physikalischen Größe X zumindest im Rahmen der klassischen Physik kein Raum für eine wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation ist, so helfen uns doch die Grundkenntnisse der Wahrscheinlichkeitstheorie auch bei konkreten Berechnungen an physikalischen Systemen mit kontinuierlich verteilten extensiven Größen (s. auch Aufgabe 10).

Die Grundbegriffe der Kombinatorik (*)

Ein elementares Werkzeug zur Berechnung konkreter Fragestellungen der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist die *Kombinatorik*. Hierunter versteht man die Gesamtheit aller Fragestellungen nach dem Umfang, in dem man die Elemente einer endlichen Menge in bestimmter Weise zu Gruppen anordnen (*kombinieren*) kann. Die Vorschrift, wie genau diese Anordnung der Elemente zu einer Gruppe erfolgen soll, ist die Kernaussage der jeweiligen Fragestellung. Was genau damit gemeint ist, wird an Hand der nun behandelten Beispiele klar werden.

Wir betrachten also jeweils eine Menge \mathbf{A} von n ($n < \infty$) Elementen und sodann eine sog. *Probe* von r Elementen aus \mathbf{A} . Als erstes fragen wir nach der *Anzahl der möglichen geordneten Proben aus \mathbf{A} mit Wiederholungen und vom Umfang r* . Damit ist die Anzahl der r -Tupel gemeint mit Komponenten, die alle in \mathbf{A} enthalten sind, wobei auch mehrere Komponenten den gleichen Wert haben dürfen. Wie man leicht durch vollständige Induktion beweisen kann, hat diese Größe $k_1(n, r)$ den Wert

$$k_1(n, r) = n^r \quad (7.279)$$

Ein anschauliches Beispiel für diese Begriffsbildung ist z.B. die *Personal Identification Number* (PIN) zur Legitimierung des Benutzers bei der Verwendung einer Bankkarte o.ä. . Diese besteht üblicherweise aus 4 Ziffern, die jeweils alle Werte von 0 bis 9 annehmen können. Es gibt also

$$k_1(10, 4) = 10^4 \quad (7.280)$$

verschiedene PINs.

Wegen der zugelassenen Wiederholungen bei dem Aufbau dieses Probenotyps ist auch $r > n$ zugelassen. So beträgt beim sog. *genetischen Code* in Form einer aus verschiedenen Basen aufgebauten Desoxyribonucleinsäure (DNS) die Anzahl n der verschiedenen die Information tragenden Basen lediglich 4, während der Umfang r selbst bei der Codierung eines einzelnen Proteins bereits ca. $2,4 \cdot 10^4$ beträgt. Die Anzahl der möglichen Codierungsvarianten beträgt also in diesem Fall

$$k_1(4; 2,4 \cdot 10^4) = 2,8 \cdot 10^{14449} \quad (7.281)$$

Von dieser alle unsere Vorstellungskraft sprengenden Vielzahl an Möglichkeiten sind allerdings weitaus die meisten biologisch unbrauchbar, d.h. sie führen zu keinem biologisch funktionsfähigen Protein.

Als nächstes behandeln wir die *geordneten Proben aus \mathbf{A} ohne Wiederholungen und vom Umfang r* . Für sie gilt

$$k_2(n, r) = \frac{n!}{(n-r)!} \quad (7.282)$$

Der Beweis dieser Beziehung ist wieder über vollständige Induktion zu führen. Diese kombinatorische Situation entspricht z.B. der Einlaufwette beim Pferderennen. Hierbei muss die Reihenfolge des Ziel-Einlaufs der ersten r von insgesamt n Pferden getippt werden. Bei einer 3-er-Einlaufwette und insgesamt 12 Pferden gibt es hierfür insgesamt

$$k_2(12, 3) = \frac{12!}{9!} = 1320 \quad (7.283)$$

Möglichkeiten. Beide Begriffsbildungen zusammen, also beide Arten von geordneten Proben, werden auch als *Variationen von n Elementen zur r -ten Klasse* bezeichnet.

Der Sonderfall der *geordneten Proben aus A ohne Wiederholungen und vom Umfang $r = n$* wird auch als die *Permutationen von A* bezeichnet.

Als nächstes lassen wir nun die Einschränkung der Anordnung fallen, d.h. wir betrachten nicht mehr r -Tupel, sondern Untermengen von **A** mit jeweils r (per Definition unterschiedlichen) Elementen. Von diesen *ungeordneten Proben aus A ohne Wiederholungen und vom Umfang r* existieren jeweils

$$k_3(n, r) = \binom{n}{r} = \frac{n \cdot (n - 1) \cdot \dots \cdot (n - r + 1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot r} = \frac{n!}{r! \cdot (n - r)!} \quad (7.284)$$

Diese kombinatorische Situation entspricht z.B. dem allwöchentlich von Millionen von Deutschen gespielten Zahlenlotto 6 aus 49. Für einen derartigen Tipp existieren also

$$k_3(49, 6) = \binom{49}{6} = \frac{49!}{6! \cdot 43!} = 1,398 \cdot 10^7 \quad (7.285)$$

verschiedene mögliche Ergebnisse. Unter der Annahme gleicher Wahrscheinlichkeit für alle diese Möglichkeiten kommt also ein ganz bestimmter Tipp im Mittel alle

$$1,398 \cdot 10^7 \cdot \text{Wochen} = 2,69 \cdot 10^5 \cdot \text{Jahre}$$

vor. Wenn man dies mit der geschätzten Dauer der Menschheitsgeschichte von den frühesten Homoniden bis heute von 10^6 bis 10^8 Jahren vergleicht, ist dies keine besondere Ermutigung, sich an diesem Spiel zu beteiligen. Auch wenn man durch eine Systemwette die Chancen z.B. um 2 Größenordnungen verbessert, hat man damit die Chance, im Laufe seines Lebens auch einmal zu gewinnen, nicht wirklich substanziell verbessert.

Lassen wir bei den Definition dieser ungeordneten Proben Wiederholungen zu, erhalten wir

$$k_4(n, r) = \binom{n + r - 1}{r} = \frac{(n + r - 1)!}{r! \cdot (n - 1)!} \quad (7.286)$$

Diese kombinatorische Situation entspricht dem Fußball-Toto, bei dem das Ergebnis (Sieg der Heim-Mannschaft, Unentschieden oder Sieg der Gast-Mannschaft) von z.B. 20 Spielen zu tippen ist. Hierfür gibt es

$$k_4(3, 20) = \frac{22!}{20! \cdot 2!} = 231 \quad (7.287)$$

verschiedene mögliche Ergebnisse (, von denen der Fußball-Experte, der sich allerdings gelegentlich auch irrt, meint, einige als *unmöglich* ausschließen zu können).

Die Begriffe $k_3(n, r)$ und $k_4(n, r)$ werden zusammen genommen auch als *Kombinationen von n Elementen zur r -ten Klasse* bezeichnet.

Schließlich geben wir noch die Formel an zur Berechnung der Anzahl der möglichen Zerlegungen einer aus n Elementen bestehenden Menge in t Teilmengen

der Umfänge r_i ,

$$\sum_{i=1}^t r_i = n$$

$$k(n, r_1, \dots, r_t) = \frac{n!}{r_1! \cdot \dots \cdot r_t!} \quad (7.288)$$

Diese kombinatorische Situation entspricht z.B. der Aufteilung einer Festgesellschaft von n Personen auf t Tische unterschiedlicher Größe. Gibt es z.B.

1 Tisch für 12 Personen ; 3 Tische für 8 Personen und 4 Tische für 6 Personen

so lässt sich die Gesellschaft von insgesamt 60 Personen in

$$k(60; 12, 8, 8, 8, 6, 6, 6, 6) = \frac{60!}{12! \cdot 3 \cdot 8! \cdot 4 \cdot 6!} = 4,99 \cdot 10^{64} \quad (7.289)$$

unterschiedlichen Zusammensetzungen auf die 8 Tische aufteilen.

Einige konkrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen (*)

Wir diskutieren nun noch einige in der Physik häufiger auftretende Wahrscheinlichkeitsverteilungen und beginnen mit der *Binomialverteilung*. Diese betrifft Situationen, formal wieder durch eine Zufallsgröße a beschrieben, die als n unabhängige Wiederholungen eines Zufallsexperimentes gedeutet werden können. Aus der Menge der Ereignisse greifen wir nun genau 1 Ereignis heraus. Dieses Ereignis trete mit der Wahrscheinlichkeit α auf. Alle weiteren nicht zu diesem Ereignis gehörenden Ergebnisse werden zu dem Komplement des ersteren zusammengefasst. Dann beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass dieses Ereignis bei diesen n Wiederholungen insgesamt genau k -mal auftritt,

$$p(a = k) = \frac{n!}{k! \cdot (n - k)!} \cdot \alpha^k \cdot (1 - \alpha)^{n-k} \quad (7.290)$$

Der Beweis dieser Beziehung ist offensichtlich: Die Wahrscheinlichkeit, dass das gewählte Ereignis in allen ersten k Wiederholungen auftritt, beträgt α^k ; entsprechend beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass dieses Ereignis in sämtlichen nachfolgenden $(n - k)$ Wiederholungen nicht auftritt, $(1 - \alpha)^{n-k}$. Da jedoch irrelevant ist, in welcher Abfolge das Ereignis bei diesen Wiederholungen auftritt bzw. nicht auftritt, muss dieser Ausdruck noch mit dem kombinatorischen Faktor $k_3(n, r) = \binom{n}{r}$ multipliziert werden. Die Funktion 7.290 ist offensichtlich normiert,

$$\sum_{k=1}^n \frac{n!}{k! \cdot (n - k)!} \cdot \alpha^k \cdot (1 - \alpha)^{n-k} = 1 \quad (7.291)$$

Wir berechnen noch den Mittelwert $\langle a \rangle$ und die Streuung $\sigma(a)$ der Binomialverteilung:

$$\langle a \rangle = \sum_{k=1}^n \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!} \cdot \alpha^k \cdot (1-\alpha)^{n-k} \cdot k = n \cdot \alpha \quad (7.292)$$

$$\langle a^2 \rangle = \sum_{k=1}^n \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!} \cdot \alpha^k \cdot (1-\alpha)^{n-k} \cdot k^2 = n \cdot \alpha \cdot \{1 + \alpha \cdot (n-1)\} \quad (7.293)$$

$$\text{var}(a) = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 = n \cdot \alpha \cdot (1-\alpha) \quad (7.294)$$

Typische Beispiele für das Auftreten der Binomialverteilung sind Fragen in Zusammenhang mit sog. *Stichprobenanalysen*, s. hierzu Aufgabe 12.

Wir betrachten nun jeweils nicht nur **ein** Ereignis, sondern insgesamt m Ereignisse mit den zugehörigen Wahrscheinlichkeiten α_i ($i = 1 \dots m$). Die Ereignisse sind bereits so gewählt, dass sie den gesamten Ereignisraum *fast vollständig* (s.o.) erfassen, dass also

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i = 1 \quad (7.295)$$

Dann beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass bei n unabhängigen Wiederholungen das Ereignis 1 genau k_1 -mal, das Ereignis 2 genau k_2 -mal, ..., und dass das Ereignis m genau k_m -mal auftritt,

$$p\left(\vec{a} = (k_1; \dots; k_m); \sum_{i=1}^m k_i = n\right) = \frac{n!}{k_1! \cdot \dots \cdot k_m!} \cdot \alpha_1^{k_1} \cdot \dots \cdot \alpha_m^{k_m} \quad (7.296)$$

Diese Funktion wird als *Polynomialverteilung* bezeichnet. Aus der Definition des Ereignisses \vec{a} folgt unmittelbar, dass diese Funktion $p(\vec{a})$ normiert ist,

$$\sum_{k_1+k_2+\dots+k_m=n} \frac{n!}{k_1! \cdot \dots \cdot k_m!} \cdot \alpha_1^{k_1} \cdot \dots \cdot \alpha_m^{k_m} = 1 \quad (7.297)$$

Der algebraische Beweis dieser Behauptung ist allerdings nicht ganz einfach, weshalb wir darauf verzichten.

Ein wichtiger Sonderfall der Binomialverteilung ist derjenige, bei dem die Einzelwahrscheinlichkeit α sehr klein wird, aber gleichzeitig die Anzahl der unabhängigen Wiederholungen sehr groß ist, so dass das Produkt $n \cdot \alpha = \lambda$ endlich, i.a. > 1 bleibt::

$$n \gg 1 \ ; \ \alpha \ll 1 \ ; \ n \cdot \alpha = \lambda > 1 \quad (7.298)$$

Um die sich infolge dieser Bedingungen ergebende Näherungslösung für die Gl. 7.296 zu bestimmen, schreiben wir die Gl. in der Form

$$p(a = k) = \frac{1}{k!} \cdot n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot (n-k+1) \cdot \alpha^k \cdot (1-\alpha)^{n-k} \quad (7.299)$$

die im Zähler die k Faktoren n bis $(n - k + 1)$ enthält. Lösen wir nun den Term α^k dadurch auf, dass wir in jeden dieser Faktoren den Wert α hinein multiplizieren, und manipulieren wir in verwandter Weise den Exponenten des letzten Terms, so erhalten wir

$$p(a = k) = \frac{1}{k!} \cdot (n \cdot \alpha) \cdot (n \cdot \alpha - \alpha) \cdot \dots \cdot (n \cdot \alpha - k \cdot \alpha + \alpha) \cdot (1 - \alpha)^{\frac{1}{\alpha}(n \cdot \alpha - k \cdot \alpha)} \quad (7.300)$$

Führen wir nun in diesem Ausdruck die Näherung 7.291 durch, so dürfen wir die mittleren k Faktoren jeweils durch den Wert λ approximieren. Unter Verwendung der Beziehung

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} (1 - \alpha)^{\frac{1}{\alpha}} = \frac{1}{e} \quad (7.301)$$

erhalten wir daher

$$p(a = k) \cong \frac{1}{k!} \cdot \lambda^k \cdot e^{-\lambda} \quad (7.302)$$

Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung wird als *Poisson-Verteilung* bezeichnet. Sie enthält nur den einen Parameter λ und ist offensichtlich normiert:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \cdot \lambda^k \cdot e^{-\lambda} = e^{-\lambda} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} = 1 \quad (7.303)$$

Denn die Summe $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!}$ ist nichts anderes als die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion $y = e^\lambda$. Wir berechnen noch Mittelwert $\langle a \rangle$ und Streuung σ dieser Verteilung:

$$\langle a \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} k \cdot \frac{1}{k!} \cdot \lambda^k \cdot e^{-\lambda} = e^{-\lambda} \cdot \lambda \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k-1}}{(k-1)!} = \lambda \quad (7.304)$$

Denn es gilt

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k-1}}{k-1} = \sum_{k^*=0}^{\infty} \frac{\lambda^{k^*}}{k^*} = e^\lambda \quad (7.305)$$

Zur Berechnung von σ bestimmen wir zunächst

$$\langle a^2 \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} k^2 \cdot \frac{\lambda^k}{k!} \cdot e^{-\lambda} \quad (7.306)$$

In diesem Ausdruck ziehen wir den von k unabhängigen Term $e^{-\lambda}$ vor die Summe, berechnen von der Summe die ersten beiden Glieder explizit und benutzen dann die Identität

$$k^2 = k \cdot (k - 1) + k \quad (7.307)$$

$$\begin{aligned} \langle a^2 \rangle &= e^{-\lambda} \cdot \left(\lambda + \sum_{k=2}^{\infty} k^2 \cdot \frac{\lambda^k}{k!} \right) = e^{-\lambda} \cdot \left(\lambda + \sum_{k=2}^{\infty} (k \cdot (k-1) + k) \cdot \frac{\lambda^k}{k!} \right) \\ &= e^{-\lambda} \cdot \left[\lambda^2 \cdot \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\lambda^{k-2}}{(k-2)!} + \lambda \cdot \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k-1}}{(k-1)!} \right] = \lambda^2 + \lambda \end{aligned} \quad (7.308)$$

$$\sigma^2 = \langle a^2 \rangle - (\langle a \rangle)^2 = \lambda \quad (7.309)$$

Bei einem Experiment, das der Poisson-Verteilung gehorcht, ist also die Streuung der einzelnen Messwerte gleich der Wurzel aus ihrem mittleren Ergebnis N ,

$$\sigma = \sqrt{N} \quad (7.310)$$

Die Abb. 5 zeigt den Verlauf der Poisson-Verteilung für das Beispiel $\lambda = 5$. Ein Zu-

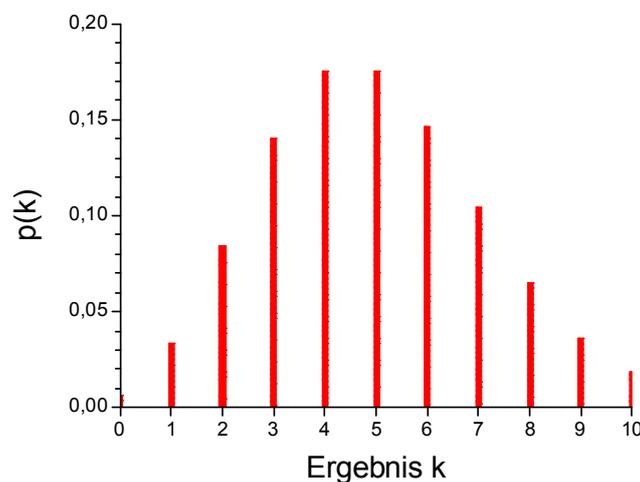


Abb. 5 Poisson-Verteilung für $\lambda = 5$

fallsexperiment ist immer dann Poisson-verteilt, wenn nur ganzzahlige positive Ergebnisse auftreten, also z.B. Zählraten, und wenn diese Ergebnisse jeweils aus der unabhängigen Überlagerung einer sehr großen Anzahl von sehr seltenen Einzelereignissen resultieren. Das hierfür in praktisch jedem Lehrbuch angeführte typische Beispiel ist der *radioaktive Zerfall*: Zur messtechnischen Untersuchung liegen eine extreme hohe Anzahl N (der Größenordnung 10^{23}) von radioaktiven Atomen vor, und für jedes dieser einzelnen Atome ist die Wahrscheinlichkeit α des radioaktiven Zerfalls innerhalb der festgelegten Messzeit Δt von z.B. $60 \cdot s$ extrem gering. Das Produkt aus beiden Werten liegt jedoch in der Größenordnung

$$\langle k \rangle = N \cdot \alpha \gtrsim 1 \quad (7.311)$$

und es gilt

$$\langle k \rangle = c \cdot N \cdot \Delta t \quad \text{wegen } k \lll n \quad (7.312)$$

Die Größe c ist eine für das radioaktive Atom spezifische Konstante. Die Größe

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{c} \quad (7.313)$$

bezeichnet man als die *Halbwertszeit* des radioaktiven Materials. Im Laufe dieser Zeit nimmt die Anzahl der (noch) nicht zerfallenen Atome auf die Hälfte des Anfangswertes ab.

Die für die Physik vermutlich wichtigste Verteilung ist die *Gauss-Verteilung*, die oft auch als *Normalverteilung* bezeichnet wird. Sie besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma} \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2 \cdot \sigma^2}} \quad (7.314)$$

Eine bestimmte Gauss-Verteilung ist durch die beiden Parameter x_0 und σ festgelegt. Diese beiden Parameter sind, wie man leicht nachrechnen kann, mit dem Mittelwert und der Streuung der Verteilung identisch,

$$\langle a \rangle = x_0 \quad ; \quad \text{var}(a) = \sigma^2 \quad (7.315)$$

Die Funktion $f_a(x)$ ist symmetrisch bezüglich x_0 ,

$$f_a(x_0 + \delta x) = f_a(x_0 - \delta x) \quad (7.316)$$

Das hat u.a. zur Folge, dass eine Zufallsgröße, die nur für ein Vorzeichen existiert, nicht exakt Gauss-verteilt sein kann, sondern höchstens näherungsweise und nur falls $\langle a \rangle \gg \sigma$. In welchem Sinne die Gauss-Verteilung die *Normalverteilung* der Wahrscheinlichkeitstheorie ist, haben wir bereits im Abschnitt 2.7.4 angedeutet.

Wir werden nun den hierfür verantwortlichen sog. *zentralen Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie* logisch korrekt einführen. Er beantwortet die Frage, welche Wahrscheinlichkeitsdichte eine Zufallsvariable aufweist, die sich als Summe einer endlichen Anzahl von Zufallsvariablen schreiben lässt. Um hierauf eine wohl definierte Antwort geben zu können, müssen wir die Menge der zugelassenen Zufallsvariablen einschränken. Wir fordern, dass die Zufallsvariablen a_i wohl definierte endliche Erwartungswerte und Varianzen haben,

$$\langle a_i \rangle < \infty \quad ; \quad \text{var}(a_i) < \infty \quad \forall i = 1 \dots n \quad (7.317)$$

und dass die Zufallsvariablen unabhängig von einander sind,

$$\langle a_i \cdot a_j \rangle = \langle a_i \rangle \cdot \langle a_j \rangle \quad \forall i \neq j \quad (7.318)$$

Wir betrachten zunächst den Spezialfall, dass die betrachteten Zufallsvariablen a_i alle die gleiche Verteilung haben. Dann gilt insbesondere

$$\langle a_i \rangle = \langle a_j \rangle = a \quad ; \quad \text{var}(a_i) = \text{var}(a_j) = \sigma^2 \quad \forall i, j \quad (7.319)$$

Theorem 168 Gegeben seien eine endliche, aber beliebig große Anzahl n von Zufallsvariablen a_i mit Verteilungen, die alle die Bedingungen 7.317 und 7.318 erfüllen. Aus diesen bilden wir die sog. standardisierte Summe dieser n Zufallsvariablen,

$$Z_n = \frac{1}{\sqrt{n \cdot \text{var}(a)}}$$

(XXX: zunächst den Fall der identisch verteilten Zufallsgrößen behandeln; der weitere Text ist noch nicht verfügbar. Darin wird der zentrale Grenzwertsatz auf den Fall der Lindeberg-Levy-Bedingung erweitert werden. finnischer Mathematiker Jarl Waldemar Lindeberg (*1876 in Helsinki; †1932 ebenda) und französischer Mathematiker Paul Pierre Lévy (*1886 in Paris; †1971 als em. Prof. der Ecole Polytechnique in Paris)

7.5 Die konsistente Formulierung der Quantenmechanik (-)

Nachdem nun die hierfür erforderlichen mathematischen Strukturen und Aussagen bereitgestellt sind, werden wir daran gehen, das Grundgerüst der Quantenmechanik in einer logisch konsistenten, axiomatisch aufgebauten Form zu präsentieren. Wir stützen uns dabei auf die im Kapitel 7.2 aus experimentellen Fakten und physikalischen Überlegungen geschlossenen Aussagen sowie auf die im Kapitel 7.4 zusammengetragenen mathematischen Zusammenhänge. Und wir werden feststellen, dass diese beiden Quellen ausreichen, um das gesamte Gebäude der Quantenmechanik zu erstellen. Mit der von mir gewählten Reihenfolge der Darstellung,

- zunächst die experimentellen Fakten,
- dann eine Zusammenfassung rein mathematischer Fakten, die keinerlei zusätzlicher physikalisch zu begründender Annahmen bedürfen, und
- danach die axiomatische Formulierung,

hoffe ich klarzumachen, auf welchen wenigen fundamentalen Annahmen diese Theorie beruht.

Axiom 39 Die Menge der Zustände $|k\rangle$ eines physikalischen Systems bildet einen Hilbert-Raum über dem Körper der komplexen Zahlen $\hat{\mathbb{C}}$.

Axiom 40 Jeder beobachtbaren physikalischen Größe P ist ein auf diesem Hilbert-Raum erklärter hermitescher Operator \mathbf{P} zugeordnet. Der (mittlere) Wert einer Größe P in einem Zustand $|k\rangle$ ist gleich dem Skalarprodukt

$$P = \langle k | \mathbf{P} k \rangle \quad (7.320)$$

Axiom 41 *Jedem physikalischen System ist ein vollständiger Satz linearer hermitescher Operatoren zugeordnet mit folgenden Eigenschaften:*

* Die Operatoren kommutieren alle miteinander.

* Die (gemeinsamen) Eigenzustände zu diesen Operatoren sind nicht entartet.

* Diese Eigenzustände sind mit den stationären Zuständen des Systems identisch. Daher ist jeder stationäre Zustand durch Angabe der Eigenwerte für jeden dieser Operatoren bis auf einen konstanten Phasenfaktor eindeutig beschrieben.

* Jeder weitere Operator ist als Funktion dieser Operatoren darstellbar.

Axiom 42 *Die zeitliche Entwicklung eines beliebigen Zustands wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung beschrieben,*

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial |k\rangle}{\partial t} = \mathbf{H} |k\rangle \quad (7.321)$$

Axiom 43 *Durch die Messung einer physikalischen Größe P wird das System in einen Eigenzustand des zugehörigen Operators \mathbf{P} überführt. In welchen der möglichen Eigenzustände zu \mathbf{P} (Bezeichnung $|P_i\rangle$) es dabei übergeht, ist unbestimmt.^{††} Durch den Ausgangszustand $|k\rangle$ ist lediglich die Wahrscheinlichkeit vorgegeben, mit der einer dieser Zustände infolge des Messprozesses angenommen wird. Diese beträgt*

$$w(|P_i\rangle) = \sqrt{|\langle P_i | \mathbf{P} k \rangle|^2} \quad (7.322)$$

Axiom 44 *Zwei identische physikalische Systeme, die sich in einem identischen Zustand befinden, sind grundsätzlich ununterscheidbar.*

Um dem Leser zu helfen, die in diesen Axiomen festgelegte Struktur logisch korrekt einzuordnen, liegt mir daran, insbesondere zu betonen: Eine bestimmte physikalische Situation, ein *Zustand*, wird durch die quantenmechanische Zustandsfunktion beschrieben, also z.B. in der Ortsdarstellung durch die komplexwertige Schrödingersche Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$. Der makroskopischen Welt zugänglich ist primär das Ergebnis einer Messung. Diese aber verändert immer den quantenmechanischen Zustand. Daher ist nicht verwunderlich, dass unterschiedlich konzipierte Messungen an identischen Zuständen zu qualitativ unterschiedlichen Ergebnissen führen können, die im Rahmen eines nicht-quantenmechanischen Interpretationsmodells nicht miteinander vereinbar sind. Ein derartiges Beispiel sind die im Kapitel 7.16 eingehend behandelten unterschiedlich strukturierten Messungen zur Interferenz einzelner Photonen an einem Doppelspalt. Alle diese bis heute in der Literatur diskutierten begrifflichen Schwierigkeiten bei speziellen Interferenz-Experimenten, in denen z.B. vermeintliche Fernwirkungen auftreten, die mit Überlichtgeschwindigkeit durch den Kosmos übertragen werden, sie alle haben ihre primäre Ursache in der Nicht-Beachtung dieser

^{††}Ich vermeide an dieser Stelle die Formulierung "kann nicht vorher gesagt werden", da dies so etwas wie eine befristete Unzulänglichkeit der Theorie in ihrem aktuellen unfertigen Zustand suggerieren würde. Vielmehr ist diese Vorhersage *grundsätzlich nicht möglich*.

Regel. Das einzelne Photon entsteht erst im Moment der Messung. Ohne die Messung besteht der Zustand aus einer Wellenfunktion mit einer bestimmten Orts- und Zeitabhängigkeit, nicht mehr und nicht weniger. Ich will allerdings an dieser Stelle ergänzen, dass meines Wissens bis heute keine logisch saubere und mathematisch eindeutige Definition des Vorgangs *Messung* existiert, die also u.a. auch folgende Fragen beantwortet:

1. Welche Kriterien müssen erfüllt sein, damit eine Störung eines quantenmechanischen Systems eine *Messung* einer bestimmten physikalischen Größe darstellt?
2. Wie genau erfolgt die zeitliche Entwicklung des Zustands im Verlauf dieser Messung?

B.a.W. müssen wir uns darauf beschränken, das Axiom 43 gleichzeitig als eine Definition des Begriffs *Messung* anzusehen:

Definition 169 *Die Messung einer physikalischen Größe P an einem quantenmechanischen System besteht darin, dass dieses System durch die (makroskopische) Messanordnung gezwungen wird, in einen Eigenzustand zu dieser Größe P überzugehen.*

Ich werde auf diese generelle Fragestellung insbesondere im Kapitel 7.16 zurückkommen. (XXX: präzisieren)

7.6 Darstellungsarten der Quantenmechanik (-/-)

(XXX: Der Kopftext des Kapitels *Darstellungsarten der Quantenmechanik* ist noch nicht verfügbar.)

7.6.1 Darstellung der Zustände als Funktionen im Ortsraum (Schrödinger-Darstellung) (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Darstellung der Zustände als Funktionen des Ortsraums (Schrödinger-Darstellung)* ist noch nicht verfügbar. In ihn wird auch die folgende Aussage aufgehen:)

Das Skalarprodukt 2-er beliebiger Zustände $\psi_1(\vec{r})$ und $\psi_2(\vec{r})$ berechnet sich in dieser Darstellung wie folgt:

$$\langle \psi_1(\vec{r}) | \psi_2(\vec{r}) \rangle = \int \psi_1(\vec{r}) \cdot \psi_2^*(\vec{r}) \cdot d^3r \quad (7.323)$$

7.6.2 Darstellung der Zustände über die Eigenzustände einer diskret verteilten Observablen (Heisenberg-Darstellung) (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Darstellung der Zustände über die Eigenzustände einer diskret verteilten Observablen (Heisenberg-Darstellung)* ist noch nicht verfügbar.)

7.6.3 Dichtefunktionale (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Dichtefunktionale* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Darstellungsarten der Quantenmechanik* ist noch nicht verfügbar.)

7.7 Die wichtigsten Operatoren (-)

(XXX: Der Kopftext des Kapitels *Operatoren* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.1 Der Orts-Operator (-)

In der sog. *Ortsdarstellung* (s. Abschnitt 7.6.1) wird zur Darstellung eines quantenmechanischen Zustands $|k\rangle$ die komplexwertige Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ benutzt, die die Bedeutung einer Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Ortsraum hat. Wie für jede observable physikalische Größe gilt auch für die Ortskoordinate \vec{r} die Beziehung

$$\langle \vec{r} \rangle = \langle \psi(\vec{r}) | \mathbf{R}(\psi(\vec{r})) \rangle \quad (7.324)$$

In dieser Gl. ist \mathbf{R} der gesuchte Ortsoperator für die Ortsdarstellung. Da nun aber $\psi(\vec{r})$ einfach die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist, wenn auch komplexwertig, muss der Ortsoperator \mathbf{R} mit dem Ortsvektor \vec{r} identisch sein, wobei sich gleichzeitig die Operator-Verknüpfung auf die (komplexwertige) Multiplikation reduziert,

$$\langle \vec{r} \rangle = \langle \psi(\vec{r}) | \vec{r} \cdot \psi(\vec{r}) \rangle \quad (7.325)$$

Zur Vermeidung von Missverständnissen wird dieser Sachverhalt in der Literatur meist komponentenweise dargestellt:

$$\langle x \rangle = \langle \psi(\vec{r}) | x \cdot \psi(\vec{r}) \rangle \quad (7.326)$$

$$\langle y \rangle = \langle \psi(\vec{r}) | y \cdot \psi(\vec{r}) \rangle \quad (7.327)$$

$$\langle z \rangle = \langle \psi(\vec{r}) | z \cdot \psi(\vec{r}) \rangle \quad (7.328)$$

Für jede skalare Größe V , die nur von der Ortskoordinate \vec{r} abhängt (XXX: präzisieren), ergibt sich der zugehörige Operator einfach als

$$\mathbf{V}(\vec{r}) = V(\vec{r}) \quad (7.329)$$

(XXX: Der weitere, noch vorgesehene Text des Abschnitts *Der Orts-Operator* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.2 Der Impuls-Operator (-)

In der klassischen Mechanik ergibt sich der mechanische Impuls eines Objektes der Masse M über dessen Geschwindigkeit \vec{v} :

$$\vec{P}_{\text{klass.}} = M \cdot \vec{v} = M \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (7.330)$$

Eine verwandte Beziehung, die also ebenfalls die Ableitung $\frac{\partial}{\partial t}$ enthält, kann für den quantenmechanischen Operator \vec{P} nicht gelten. Sonst würde nämlich für die stationären Zustände eines jeden Systems

$$\mathbf{P} = 0 \quad (7.331)$$

gelten. Für das weitere Vorgehen benötigen wir offenbar einen völlig anderen Ansatzpunkt.

Ausgangspunkt unserer Überlegungen zur Herleitung der Form des Impuls-Operators in der Ortsdarstellung ist die Erkenntnis, dass jede der 3 Ortskomponenten mit der jeweils zugehörigen Impulskomponente ein Paar von *kanonisch konjugierten* Variablen bildet (s. Abschnitt 7.2.5). Für jedes dieser Paare gilt daher

$$[\mathbf{x}_i; \mathbf{P}_j] = \mathbf{0} \quad \forall i \neq j \quad (7.332)$$

$$= c \quad \forall i = j \quad (7.333)$$

Ich verwende an dieser Stelle die in der Literatur oft benutzte Abkürzung

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}; \mathbf{x}_2 = \mathbf{y}; \mathbf{x}_3 = \mathbf{z} \quad (7.334)$$

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_x; \mathbf{P}_2 = \mathbf{P}_y; \mathbf{P}_3 = \mathbf{P}_z \quad (7.335)$$

Ausgeschrieben lautet die Gl. 7.333 z.B. für den Fall $i = j = 1$

$$x \cdot \mathbf{P}_x (\psi(x, y, z)) - \mathbf{P}_x (x \cdot \psi(x, y, z)) = c \quad (7.336)$$

und für den Fall für den Fall $i = 1; j = 2$

$$x \cdot (\mathbf{P}_y (\psi(x, y, z))) = \mathbf{P}_y (x \cdot \psi(x, y, z)) \quad (7.337)$$

Aus Gl. 7.337 schließen wir, dass \mathbf{P}_y nicht auf x wirkt.

(XXX: Der weitere, zur konkreten Form des Impuls-Operators führenden Textes ist noch nicht verfügbar. Das Ergebnis lautet:)

$$\mathbf{P}_x (\psi(x, y, z)) = -i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\psi(x, y, z)) \quad (7.338)$$

$$\mathbf{P}_y (\psi(x, y, z)) = -i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial y} (\psi(x, y, z)) \quad (7.339)$$

$$\mathbf{P}_z (\psi(x, y, z)) = -i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial}{\partial z} (\psi(x, y, z)) \quad (7.340)$$

bzw. in der abkürzenden Vektor-Schreibweise

$$\vec{\mathbf{P}}(\psi(x, y, z)) = -i \cdot \hbar \cdot \nabla(\psi(x, y, z)) \quad (7.341)$$

Eine unmittelbare Folgerung aus dieser Beziehung 7.341 ist eine einschränkende Bedingung an die Menge der Funktionen $\psi(x, y, z)$, die zur Beschreibung des quantenmechanischen Zustands eines Systems zugelassen sind. Da der Impuls \mathbf{P} eine Observable eines jeden Systems ist, muss sein Erwartungswert nicht nur als integraler Mittelwert, sondern auch an jedem Ort \vec{r} einen wohl definierten endlichen Wert annehmen. M.a.W. die Funktion $\psi(x, y, z)$ muss im gesamten Raum nach allen 3 Ortskoordinaten differenzierbar sein. Funktionen $\psi(x, y, z)$, die diese Bedingung nicht erfüllen, sind zur Beschreibung eines quantenmechanischen Zustands eines realen Systems **nicht** zugelassen.

Der Operator für das Betragsquadrat des Impulses ist

$$\mathbf{P}^2 = \vec{\mathbf{P}} * \vec{\mathbf{P}} = \mathbf{P}_x \mathbf{P}_x + \mathbf{P}_y \mathbf{P}_y + \mathbf{P}_z \mathbf{P}_z \quad (7.342)$$

$$= -\hbar^2 \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (7.343)$$

Für jede skalare Größe V , die nur von der Größe \mathbf{P}^2 abhängt, ergibt sich der zugehörige Operator einfach als

$$(\mathbf{V}(\mathbf{P}^2)) \psi = V \cdot (\mathbf{P}^2 \psi) \quad (7.344)$$

Sobald wir nun Systeme behandeln, deren Hamilton-Operator einen Term enthält, der nur von \mathbf{P}^2 abhängt, erzeugt die Beziehung 7.343 eine weitere, notwendige Bedingung an die zur Beschreibung eines quantenmechanischen Zustands zugelassenen Funktionen. Wenn dieser von \mathbf{P}^2 abhängige Term eine Observable beschreibt, z.B. die kinetische Energie des Systems, muss sein Erwartungswert nicht nur als integraler Mittelwert über den gesamten Raum, sondern auch an jedem Ort \vec{r} einen wohl definierten endlichen Wert annehmen. M.a.W. die Funktion $\psi(x, y, z)$ muss im gesamten Raum nach allen 3 Ortskoordinaten 2-mal differenzierbar sein.

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Der Impuls-Operator* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.3 Der Drehimpuls-Operator (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Der Drehimpuls-Operator* ist noch nicht verfügbar. In ihm werden auch die nachfolgend aufgeführten Beziehungen hergeleitet und erläutert werden:)

Der Drehimpuls-Operator hat also die Form

$$\mathbf{L} = \left(\vec{\mathbf{L}}_x, \vec{\mathbf{L}}_y, \vec{\mathbf{L}}_z \right) \quad (7.345)$$

Ausgeschrieben bedeutet das

$$L_x = -i \cdot \hbar \cdot (y \cdot P_z - z \cdot P_y) \quad (7.346)$$

$$L_y = -i \cdot \hbar \cdot (z \cdot P_x - x \cdot P_z) \quad (7.347)$$

$$L_z = -i \cdot \hbar \cdot (x \cdot P_y - y \cdot P_x) \quad (7.348)$$

Jede Komponente von \mathbf{L} ist also ein Vektor-Operator, d.h. er transformiert unter einer Drehung wie ein Vektor. Es gelten die Vertauschungsregeln

$$\left[\vec{\mathbf{L}}_a; \vec{\mathbf{L}}_b \right] = i \cdot \hbar \cdot (\mathfrak{E}_{abc} \bullet \mathbf{L}_c) \quad (\text{Einstein-Konvention der Summation}) \quad (7.349)$$

Hierbei ist der mit \mathfrak{E}_{ijk} gekennzeichnete Tensor 3. Stufe der bereits im Absatz S. 278 definierte Levi-Civita-Tensor. Für seine Elemente gilt

$$\varepsilon_{123} = 1 \quad (7.350)$$

$$\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik} = -\varepsilon_{ikj} \quad (7.351)$$

D.h. jede paarweise Vertauschung der Indizes ergibt einen Vorzeichenwechsel des betrachteten Elementes. Es gilt also insbesondere

$$\varepsilon_{iik} = \varepsilon_{ijj} = \varepsilon_{iji} = 0 \quad (7.352)$$

$$\varepsilon_{ij1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.353)$$

$$\varepsilon_{ij2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.354)$$

$$\varepsilon_{ij3} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.355)$$

Alle übrigen Elemente ergeben sich bereits aus diesen Gl.-en 7.353 bis 7.355.

In einem abgeschlossenen System gilt

$$[\mathbf{H}; \mathbf{L}_z] = 0 \quad (7.356)$$

$$[\mathbf{H}; \mathbf{L}^2] = 0 \quad (7.357)$$

.

7.7.4 Der Operator des elektromagnetischen Feldes (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Der Operator des elektromagnetischen Feldes* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.5 Der Operator des magnetischen Momentes (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Der Operator des magnetischen Momentes* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.6 Der Spin-Operator (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Der Spin-Operator* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.7 Der Teilchenzahl-Operator (-)

Verbleiben wir in der Ortsdarstellung, so suchen wir also nun nach dem Operator \mathbf{N} , der der Bedingung

$$N(\Delta V) = \int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \mathbf{N} \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r \quad (7.358)$$

gehört. Definitionsgemäß gilt aber bereits

$$\int_{\Delta V} \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot d^3r = N(\Delta V) \quad (7.359)$$

Solange wir uns also auf 1-Teilchen-Systeme beschränken, ist der Teilchenzahl-Operator in der Ortsdarstellung mit dem Einheits-Operator identisch,

$$\mathbf{N} = \mathbf{1} \quad (7.360)$$

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Der Teilchenzahl-Operator* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.8 Der Energie-Operator (-)

In der klassischen Mechanik berechnet sich die Energie eines mechanischen Systems als Summe eines mit dem Impuls verknüpften Terms, der *kinetischen Energie*, und eines mit der Ortskoordinate verknüpften Terms, der potentiellen Energie,

$$E_{\text{klass.}} = \frac{p^2}{2 \cdot M} + V(\vec{r}) \quad (7.361)$$

Analog erhalten wir nun den quantenmechanischen Energie-Operator eines mechanischen Systems über die Beziehung

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{P}^2}{2 \cdot M} + V(\vec{r}) \quad (7.362)$$

Dieser Operator wird in der Literatur, wie bereits erwähnt, meist als *Hamilton-Operator* \mathbf{H} bezeichnet. Über ihn kann man für jedes konkrete System dessen stationäre Zustände berechnen. Denn für sie gilt die (zeitunabhängige) Schrödinger-Gleichung (Gl. 7.50)

$$\mathbf{H}\psi = E \cdot \psi \quad (7.363)$$

Wie hierbei im einzelnen vorzugehen ist, werde ich an Hand der im Kapitel 7.9 *Anwendungsbeispiele* durchgerechneten Beispiele erläutern.

7.7.9 Die Operatoren für Ströme extensiver Größen (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Die Operatoren für Ströme extensiver Größen* ist noch nicht verfügbar.)

7.7.10 Äußere und innere Variablen (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Äußere und innere Variablen* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Die wichtigsten Operatoren* ist noch nicht verfügbar.)

7.8 Faktorisierende Systeme / 2. Quantisierung (-)

(XXX: Der Kopftext zum Kapitel *Faktorisierende Systeme / 2. Quantisierung* ist noch nicht verfügbar.)

7.8.1 Wechselwirkungsfreie Untersysteme (-)

Wir betrachten jetzt Systeme, bei denen die für deren Beschreibung geeigneten physikalischen Größen in eine Anzahl N von Gruppen zerfallen, die sich gegenseitig **nicht** beeinflussen. Damit ist gemeint, dass insbesondere der Hamilton-Operator \mathbf{H} in eine Summe von N Operatoren \mathbf{H}_i zerfällt, von denen jeder nur auf die physikalischen Größen der ihm zugeordneten i -ten Gruppe wirkt. Im Kapitel 7.9 werden wir mehrere reale Beispiele für eine derartige Situation kennen lernen, z.B. das elektrisch geladene Teilchen in einem zentralsymmetrischen elektrischen Feld (Abschnitt 7.9.3).

Für die nachfolgende Diskussion vereinbaren wir die Form $|j\rangle^{(i)}$ als Schreibweise des i -ten Untersystems im j -ten Eigenzustand zum Operator \mathbf{H}_i . Wie wir im Abschnitt 7.4.8 gelernt haben, lassen sich die Eigenzustände zu \mathbf{H} als sog. direktes Produkt der Eigenzustände $|j\rangle^{(i)}$ zu den einzelnen Summanden \mathbf{H}_i darstellen. Für das i -te Untersystem sei $M^{(i)}$ die Anzahl der Eigenzustände zu \mathbf{H}_i . Der Zustand des Gesamtsystems ist dann festgelegt, wenn vorgegeben ist, in welchem der jeweils möglichen $M^{(i)}$ Eigenzustände zum Operator \mathbf{H}_i sich jedes der N Untersysteme befindet. Insgesamt gibt es dann offenbar

$$Z_{\text{Eigenzustände}} = \prod_{i=1}^N M^{(i)} \quad (7.364)$$

derartige Eigenzustände des Gesamtsystems. Wir könnten also auch das N -Tupel

$$(j_1; \dots ; j_N) \quad (7.365)$$

zur Beschreibung des Zustands des Gesamtsystems verwenden, wobei die natürlichen Zahlen j_i die laufenden Nummern der Zustände angeben, in denen sich die einzelnen

Untersysteme befinden. Wir bleiben aber aus didaktischen Gründen bei der etwas umständlicheren Schreibweise

$$|k\rangle = \prod_{i=1}^N |j_i\rangle^{(i)} = |j_1\rangle^{(1)} \cdot |j_2\rangle^{(2)} \cdot \dots \cdot |j_N\rangle^{(N)} \quad (7.366)$$

$$\mathbf{H}_i |j_i\rangle^{(i)} = E_{j_i}^{(i)} \cdot |j_i\rangle^{(i)} ; j_i = 1 \dots M^{(i)} ; i = 1 \dots N \quad (7.367)$$

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^N \mathbf{H}_i \quad (7.368)$$

$$\mathbf{H} |k\rangle = E \cdot |k\rangle \quad (7.369)$$

$$E = \sum_{i=1}^N E_{j_i}^{(i)} \quad (7.370)$$

Bei dem o.a. Beispiel eines Teilchens in einem zentralsymmetrischen Feld bilden die additiven Terme der Translationsenergie und des Drehimpulses im Hamilton-Operator 2 derartige Untersysteme. Man könnte nun meinen, dass diese allein aus mathematischen Beziehungen abgeleiteten Gl.-en für **jedes** physikalische System gültig seien, bei dem die Ausgangsannahme gültig ist, nämlich die Existenz von wechselwirkungsfreien Untersystemen. Wie wir im Folgenden sehen werden, ist dies jedoch in dieser Form **nicht** richtig!

7.8.2 Systeme aus identischen Teilchen (-)

Wir betrachten nun eine besondere Klasse von aus Untersystemen bestehenden physikalischen Systemen, nämlich Systeme aus *wechselwirkungsfreien identischen Teilchen*. Mit *identisch* meinen wir, dass sich 2 dieser Teilchen nur dadurch unterscheiden können, dass sie unterschiedliche (quantenmechanische) Zustände angenommen haben. Eine darüber hinausgehende Individualität der Teilchen ist nicht existent. Jede Beziehung, die eine solche Individualität impliziert, muss daher falsch sein, s. Abschnitt 7.2.7. Jedes dieser als *Untersystem* auffassbaren Teilchen hat seinen eigenen, jetzt allerdings für alle diese Untersysteme gleichartigen Satz von physikalischen Größen und wird in seinen eigenen Koordinaten dargestellt. Zur Unterscheidung von dem Zustand des Gesamtsystems bezeichnen wir seine Zustände als *1-Teilchen-Zustände*. Zur Beschreibung eines derartigen Systems sehen wir die Gl. 7.366 bis 7.370 für weiterhin gültig an, einen beliebigen Eigenzustand des Systems zu \mathbf{H} beschreiben wir daher weiterhin in der Form

$$|k\rangle = \prod_{i=1}^N |j_i\rangle^{(i)} \quad (7.371)$$

Allerdings sind jetzt die Eigenwerte $E_j^{(i)}$ bei gleichem Wert j für alle Werte von i identisch,

$$E_j^{(i)} = E_j^{(k)} \quad \forall i, j, k \quad (7.372)$$

und ebenso ist die Anzahl $M^{(i)}$ der Eigenzustände für alle Untersysteme identisch,

$$M^{(i)} = M \quad \forall i \quad (7.373)$$

Ein bestimmter Eigenzustand des Gesamtsystems zum Operator \mathbf{H} ist daher jetzt wohlbestimmt, wenn angegeben ist, in welchem der für alle Teilchen gleichen M möglichen 1-Teilchen-Zustände sich jedes dieser Teilchen befindet. Insgesamt gibt es dann

$$Z_{\text{Eigenzustände}} = M^N \quad (7.374)$$

Eigenzustände des Gesamtsystems, denn die vorliegende Situation entspricht der im Abschnitt 7.4.10 angeführten kombinatorischen Größe $k_1(N, M)$. Bei dieser Argumentation haben wir allerdings noch nicht das Axiom der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen berücksichtigt! Bei einem 3-Teilchen-System seien z.B. die Zustände

$$\begin{aligned} &|2\rangle \cdot |7\rangle \cdot |11\rangle \\ &|1\rangle \cdot |8\rangle \cdot |3\rangle \\ &|7\rangle \cdot |11\rangle \cdot |2\rangle \end{aligned} \quad (7.375)$$

derartige Energie-Eigenzustände des Gesamtsystems. Sie können aber andererseits keine realen Zustände eines Systems aus 3 identischen Teilchen sein, denn der 1. und der 3. Zustand unterscheiden sich nur darin, dass die beteiligten Teilchen zyklisch gegeneinander vertauscht wurden. Wenn die Teilchen ununterscheidbar sind, darf sich aber hierbei die Zustandsfunktion höchstens um einen Phasenfaktor ändern, s. Kapitel 7.5. D.h. nur für gewöhnliche faktorisierte Systeme sind sämtliche durch die Gl. 7.371 darstellbaren Zustände Eigenzustände des Gesamtsystems. Bei einem N -Teilchen-System dagegen führt diese Gl. überwiegend zu Zuständen, die real gar nicht existieren. Sie muss daher durch einschränkende Bedingungen ergänzt werden. Reale Zustände des Systems sind dann diejenigen Linearkombinationen der Ausgangszustände, die diese Zusatzbedingungen erfüllen. Um diese Zusatzbedingungen zu finden, betrachten wir den Zustand

$$|j_1\rangle^{(1)} \cdot \dots \cdot |j_{i1}\rangle^{(i1)} \cdot \dots \cdot |j_{i2}\rangle^{(i2)} \cdot \dots \cdot |j_N\rangle^{(N)} \quad (7.376)$$

und vertauschen hierin die 1-Teilchenzustände, die die beiden Teilchen $i1$ und $i2$ einnehmen, miteinander. Dann muss gelten

$$|j_1\rangle^{(1)} \cdot \dots \cdot |j_{i1}\rangle^{(i1)} \cdot \dots \cdot |j_{i2}\rangle^{(i2)} \cdot \dots \cdot |j_N\rangle^{(N)} = e^{i\cdot\varphi} \cdot |j_1\rangle^{(1)} \cdot \dots \cdot |j_{i2}\rangle^{(i1)} \cdot \dots \cdot |j_{i1}\rangle^{(i2)} \cdot \dots \cdot |j_N\rangle^{(N)} \quad (7.377)$$

Andererseits ergibt sich durch nochmaliges Vertauschen dieser beiden 1-Teilchen-Zustände wieder der Ausgangszustand, d.h. es muss gelten

$$e^{i\cdot\varphi\cdot 2} = 1 \Rightarrow \quad (7.378)$$

$$\varphi = 0 \quad \text{oder} \quad (7.379)$$

$$\varphi = \pi \quad (7.380)$$

Reale Zustände eines N -Teilchen-Systems müssen sich also entweder *symmetrisch* oder *antisymmetrisch* bzgl. der Vertauschung zweier beliebiger 1-Teilchen-Zustände verhalten. Andererseits gilt aber das Superpositionsprinzip: Jede Linearkombination zweier realer Zustände muss wieder ein realer Zustand sein. Da aber die Summe eines symmetrischen und eines antisymmetrischen Vektors weder symmetrisch noch antisymmetrisch ist, folgt daraus, dass **sämtliche** Zustände eines N -Teilchen-Systems entweder alle symmetrisch oder alle antisymmetrisch sind. Um uns der korrekten Formulierung für die Zustände eines N -Teilchen-Systems zu nähern, betrachten wir zu einem gegebenen durch die Gl. 7.366 definierten Zustand sämtliche Zustände, die durch Permutation dieser Zahlen $j_1; \dots; j_N$ entstehen. Alle diese Zustände haben die Eigenschaft, dass die Häufigkeit, mit der jeder 1-Teilchen-Zustand angenommen wird, für alle diese Zustände gleich bleibt. Es lässt sich nun sofort eine Linearkombination dieser Zustände anzugeben, die sich symmetrisch bzgl. der Vertauschung eines beliebigen Paares von 1-Teilchen-Zuständen verhält, nämlich

$$|k\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \sum_{\text{Perm.}} |j_i\rangle^{(1)} \cdot \dots \cdot |j_k\rangle^{(N)} \quad (7.381)$$

Das jedem Summanden entsprechende N -Tupel $(j_i; \dots; j_k)$ ist eine der möglichen Permutationen des Ausgangstupels $(j_1; \dots; j_N)$, und die Summation geht über alle $N!$ möglichen Permutationen. Dieser Zustand $|k\rangle_s$ ist offensichtlich symmetrisch bzgl. der Vertauschung von 2 dieser Zahlen $j_1; \dots; j_N$. Ebenso offensichtlich ist die nun folgende Linearkombination

$$|k\rangle_{as} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |j_1\rangle^{(1)} & |j_1\rangle^{(2)} & \dots & |j_1\rangle^{(N)} \\ |j_2\rangle^{(1)} & |j_2\rangle^{(2)} & \dots & |j_2\rangle^{(N)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |j_N\rangle^{(1)} & |j_N\rangle^{(2)} & \dots & |j_N\rangle^{(N)} \end{vmatrix} \quad (7.382)$$

antisymmetrisch bzgl. der Vertauschung von 2 der Zahlen $j_1; \dots; j_N$. Denn dies entspricht der Vertauschung zweier Spalten in der obigen Determinante. Das aber invertiert deren Vorzeichen und lässt ihren Absolutwert unverändert, s. Abschnitt 7.4.3. Der Vorfaktor in diesen beiden Gl. wurde derart gewählt, dass weiterhin die Normierungsbedingung

$$\langle k | k \rangle_s = \langle k | k \rangle_{as} = 1 \quad (7.383)$$

erfüllt ist. Im Fall $N = 2$ lauten der symmetrische Zustand

$$|k\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(|j_1\rangle^{(1)} \cdot |j_2\rangle^{(2)} + |j_2\rangle^{(1)} \cdot |j_1\rangle^{(2)} \right) \quad (7.384)$$

und der antisymmetrische Zustand

$$|k\rangle_{as} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(|j_1\rangle^{(1)} \cdot |j_2\rangle^{(2)} - |j_2\rangle^{(1)} \cdot |j_1\rangle^{(2)} \right) \quad (7.385)$$

Es stellt sich natürlich die Frage, ob diese formal hergeleiteten Alternativen eine physikalische Realität haben. Wir lassen diese Frage für den Moment im Raum stehen und diskutieren die Folgerungen, die sich aus den Gl. 7.381 oder Gl. 7.382 ergeben. Hierzu betrachten wir den Fall

$$|j_k\rangle^{(i1)} = |j_l\rangle^{(i2)} \quad (7.386)$$

d.h. es gibt in der Gesamtheit von Teilchen (mindestens) 2, die sich in demselben 1-Teilchen-Zustand befinden. Dann entspricht der Operation der Vertauschung dieser beiden Teilchen $i1$ und $i2$ in jedem Fall die Identität. Dieses Verhalten ist mit der Gl. 7.379 verträglich, nicht dagegen mit der Gl. 7.380. Um also die Widerspruchsfreiheit der Theorie zu erhalten, können wir ein Vertauschungsverhalten gem. Gl. 7.380 nur zulassen, wenn wir gleichzeitig fordern, dass in einem wechselwirkungsfreien System aus mehreren derartigen Teilchen jeder 1-Teilchen-Zustand höchstens einmal vorkommt, so dass für alle Teilchen immer gilt

$$|j_k\rangle^{(i1)} \neq |j_l\rangle^{(i2)} \quad (7.387)$$

Diese Bedingung folgt auch bereits unmittelbar aus der Darstellung des antisymmetrischen Zustands als Determinante D . Wenn nämlich zwei 1-Teilchenzustände identisch sind, sind in D zwei Zeilen identisch. Dann aber ist $D = 0$, s. wieder Abschnitt 7.4.3. Bei Teilchen mit dem Vertauschungsverhalten gem. Gl. 7.379 gibt es eine derartige Einschränkung nicht. Bei ihnen können sich beliebig viele Teilchen in demselben 1-Teilchen-Zustand befinden. Dieses unterschiedliche *Besetzungsverhalten* der Teilchen innerhalb eines Ensembles hat weitreichende Konsequenzen insbesondere auf das thermodynamische Verhalten eines N -Teilchen-Systems, wie wir im Abschnitt 8.4.7 lernen werden. Zum anderen treten bei extrem tiefen Temperaturen an makroskopischen Vielteilchensystemen quantenmechanische Phänomene auf, die entscheidend von diesem Vertauschungsverhalten abhängen, s. Kapitel 7.15. An dieser Stelle beschränken wir uns darauf, den Grundzustand des Systems zu diskutieren, also den Zustand minimaler Energie. Dieser beträgt offenbar für ein System aus N Teilchen mit symmetrischem Vertauschungsverhalten

$$E_{\min}(N) = N \cdot E_1 \quad (7.388)$$

und

$$E_{\min}(N) = \sum_{j=1}^N E_j > N \cdot E_1 \quad (7.389)$$

für ein System aus N Teilchen mit antisymmetrischem Vertauschungsverhalten. Die in den Gl. 7.388 und 7.389 auftretenden Größen (E_1, \dots, E_N) sind die ersten N kleinsten Energie-Eigenwerte. Um zu prüfen, ob diese beiden unterschiedlichen Typen von Teilchen real existieren, genügt es offenbar, die Energie der real existierenden N -Teilchen-Systeme im Grundzustand (also bei der Temperatur $T = 0$, s. Abschnitt

8.4.3) in Abhängigkeit der Teilchenanzahl N zu messen. Ist der Zusammenhang $E = f(N)$ linear (bei konstantem Wert für alle übrigen sog. extensiven Variablen, insbesondere das Volumen, s. Abschnitt 8.1.2), handelt es sich um Teilchen mit symmetrischem Vertauschungsverhalten. Nimmt die Energie dagegen deutlich überproportional mit der Teilchenzahl zu, zeigen die Teilchen ein antisymmetrisches Vertauschungsverhalten. Aus den zu diesem Zweck durchgeführten Experimenten folgte eindeutig die reale Existenz beider Teilchensorten!

Es gibt also 2 fundamental unterschiedliche Arten von Teilchen. Teilchen der 1. Art haben in einem Mehrteilchen-System die Vertauschungseigenschaft

$$|j_1\rangle^{(1)} \dots |j_{i1}\rangle^{(i1)} \dots |j_{i2}\rangle^{(i2)} \dots |j_N\rangle^{(N)} = - |j_1\rangle^{(1)} \dots |j_{i2}\rangle^{(i2)} \dots |j_{i1}\rangle^{(i1)} \dots |j_N\rangle^{(N)} \quad (7.390)$$

und es sind nur Mehrteilchen-Zustände zulässig mit der Eigenschaft

$$|j_k\rangle^{(i1)} \neq |j_l\rangle^{(i2)} \quad (7.391)$$

D.h. jeder 1-Teilchen-Zustand ist höchstens einfach besetzt. Diese Teilchen haben die Bezeichnung *Fermi-Teilchen* oder *Fermionen* erhalten. Beispiele von Fermi-Teilchen sind das Elektron, das Proton und der He^3 -Kern. Wie wir im Abschnitt 7.7.6 gelernt haben, haben Fermi-Teilchen immer eine halbzahligen Spin. Das spezifische Verhalten von Fermionen in einem N -Teilchen-System hat den Namen *Pauli-Prinzip* erhalten. W. Pauli formulierte es 1925 ([24]) und erhielt dafür 1945 den Nobelpreis. Es spielt in vielen Bereichen eine fundamentale Rolle, z.B. für das Aufbauschema der Atome, das physikalische Verhalten des Elektronensystems in einem Festkörper (Abschnitt 9.3) und für die Stabilität von weißen Zwergen (Absatz S. 1204) und von Neutronensternen (Abschnitt 10.2.3).

Teilchen der 2. Art haben in einem Mehrteilchen-System die Vertauschungseigenschaft

$$|j_1\rangle^{(1)} \dots |j_{i1}\rangle^{(i1)} \dots |j_{i2}\rangle^{(i2)} \dots |j_N\rangle^{(N)} = |j_1\rangle^{(1)} \dots |j_{i2}\rangle^{(i2)} \dots |j_{i1}\rangle^{(i1)} \dots |j_N\rangle^{(N)} \quad (7.392)$$

und die jeweiligen 1-Teilchen-Zustände können beliebig oft besetzt sein. Diese Teilchen werden nach *Satyendra Nath Bose* (* 1894 in Kalkutta/Indien; † 1974 ebenda) benannt und als *Bose-Teilchen* oder *Bosonen* bezeichnet. Beispiele von Bose-Teilchen sind Photonen, der He^4 -Atomkern und das aus einem Elektron mit dem Impuls \vec{k} und einem Elektron mit dem Impuls $-\vec{k}$ zusammengesetzte *Cooper-Paar* in einem Supraleiter (Abschnitt 7.15.3).

7.8.3 Die 2. Quantisierung (-)

Die vorstehende Behandlung eines quantenmechanischen Vielteilchen-Systems entspricht in seiner logischen Struktur ziemlich genau derjenigen, die in nahezu jedem Lehrbuch zu finden ist. Ich empfinde diese Struktur jedoch alles andere als befriedigend. Schließlich wird zunächst eine angeblich mathematisch korrekte Darstellung geboten, die dann sofort mit Hilfe physikalischer Zusatzargumente wieder in Frage

gestellt und letztlich stark eingeschränkt wird. Ursache für dieses Dilemma ist die Entscheidung, den N -Teilchen-Zustand in der Form eines *geordneten direkten Produktes* aus 1-Teilchen-Zuständen darzustellen. Diese Art der Darstellung impliziert aber, dass man immer weiß, ob man nun von dem i -ten oder dem k -ten Teilchen spricht, impliziert also die Unterscheidbarkeit dieser Teilchen. Die Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen muss daher nachträglich und explizit in die Theorie ergänzt werden. Will man diesen letztendlich korrekten, aber etwas undurchsichtigen Umweg vermeiden, benötigt man eine Darstellung, die diesen Anfangsfehler genau nicht macht, die also nicht mehr zunächst jedem Teilchen der Reihe nach einen Zustand zuordnet, sondern von Anfang an nur noch angibt, wieviele Teilchen sich in den jeweiligen 1-Teilchen-Zuständen befinden. Wie uns das Prinzip der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen lehrt, ist auf diese Weise der Zustand des Gesamtsystems bereits eindeutig festgelegt. Wir kennzeichnen dann einen N -Teilchen-Zustand als

$$\begin{aligned}
 |k\rangle &= (N_1; N_2; \dots) \\
 \sum_{i=1}^{\infty} N_i &= N \qquad (7.393) \\
 N_i &: \text{Anzahl der Teilchen im Zustand mit der Energie } E_i \Rightarrow \\
 N_i &\in \check{\mathbf{N}} ; N \geq N_i \geq 0
 \end{aligned}$$

Die unabhängigen Variablen des N -Teilchen-Systems sind also jetzt diese natürlichen Zahlen N_i . Diese Art der Darstellung hat aus historischen Gründen (s. Kapitel 7.14) die Bezeichnung *2. Quantisierung* erhalten. Das Problem des Symmetrieverhaltens des Systems gegenüber der Vertauschung zweier Teilchen tritt in dieser Darstellung gar nicht erst auf. Allerdings stehen wir nun vor der Aufgabe, die den physikalischen Größen bei dieser Darstellung zugeordneten Operatoren erneut aufzufinden, dieses Mal speziell für ein N -Teilchen-System in der Darstellung der 2. Quantisierung. Zuvor klären wir die Frage nach dem Unterschied zwischen Fermi- und Bose-Teilchen. Diese Unterscheidung resultiert jetzt unmittelbar aus der Frage nach dem zulässigen Wertebereich für die Besetzungszahlen N_i . Offenbar gibt es nur 2 Möglichkeiten:

$$(1) \quad 0 \leq N_i < \infty \qquad (7.394)$$

$$(2) \quad 0 \leq N_i \leq 1 \qquad (7.395)$$

Wenn es nämlich Teilchen gäbe, für die die Besetzungszahl auf einen endlichen Wert begrenzt wäre,

$$0 \leq N_i \leq N_{\max} ; N_{\max} > 1 \qquad (7.396)$$

gäbe es für jeden 1-Teilchen-Zustand eine Art von innerem Abzählvorgang in dem betrachteten N -Teilchen-System, der dafür sorgt, dass diese Bedingung 7.396 nicht verletzt wird. Dies wäre aber in allen seinen messbaren Auswirkungen mit der Situation identisch, in der die Eigenzustände dieser Teilchensorte energie-entartet sind und ihre Beschreibung erst mit der Angabe einer weiteren Quantenzahl μ für einen

gewissen inneren Freiheitsgrad vollständig ist. Diese Quantenzahl μ kann dann N_{\max} unterschiedliche Werte annehmen. Ein konkretes real vorkommendes Beispiel für ein derartiges Verhalten ist die Spin-Quantenzahl s (s. Abschnitt 7.7.6), die bei einer bestimmten Klasse von Teilchen nur die Werte -1 oder $+1$ annehmen kann, und deren Eigenzustände in vielen Fällen in 1. Näherung energie-entartet sind.

In dieser vollständigen Formulierung der 1-Teilchen-Zustände ist dann wieder die Gl. 7.395 gültig. In der Beschreibung eines N -Teilchen-Systems nach dem Konzept der 2. Quantisierung ergibt sich also zwangsläufig die Einteilung in Fermi- und in Bose-Systeme, wobei natürlich wieder das Experiment zu befragen war, ob diese beiden Möglichkeiten auch real existieren. Die Antwort lautete - wie wir bereits wissen - *ja*. Wir geben noch den Grundzustand, also den Zustand kleinst möglicher Energie eines N -Fermi-Teilchen-Systems und eines N -Bose-Teilchen-Systems in der Formulierung der 2. Quantisierung an:

$$|k\rangle (E_{\min}) = (1; 1; \dots ; 1; 0; \dots) \quad \text{für Fermionen} \quad (7.397)$$

$$\Rightarrow E_{\min} = \sum_{i=1}^N E_i \quad (7.398)$$

$$|k\rangle (E_{\min}) = (N; 0; \dots) \Rightarrow E_{\min} = N \cdot E_1 \quad \text{für Bosonen} \quad (7.399)$$

E_i ist - entsprechend der in diesem Abschnitt gewählten Nomenklatur - die Energie des 1-Teilchen-Untersystems im Zustand i , E_1 also die Energie des 1-Teilchen-Grundzustands.

Die Operatoren physikalischer Größen in der Darstellung der 2. Quantisierung (-)

Wir stellen nun die Frage nach der Form der relevanten Operatoren in der Darstellung der 2. Quantisierung. Da die einzigen noch auftretenden Variablen die Besetzungszahlen $N_i \in \mathbb{N}$ sind, können die unmittelbar auf sie wirkenden Operatoren auch nur die Wirkung haben, eine oder mehrere dieser natürlichen Zahlen zu verändern und den so entstandenen Zustand ggffs. noch mit einer komplexen Zahl c zu multiplizieren.

(XXX: Der Text, der zeigt, dass nur Operatoren mit $\Delta N = -1/0/+1$ Matrixelemente $\neq 0$ haben können, ist noch nicht verfügbar.)

Ein Operator mit elementarster Wirkung ist daher offenbar

$$\mathbf{a}_i : \mathbf{a}_i(N_1; \dots ; N_i; \dots) = c \cdot (N_1; \dots ; N_i - 1; \dots) \quad (7.400)$$

Die Anwendung dieses Operators auf einen N -Teilchen-Zustand erniedrigt die Besetzungszahl des i -ten 1-Teilchen-Zustands um 1 und multipliziert gleichzeitig den Zustand mit der komplexen Zahl c . Entsprechend erhöht der Operator

$$\mathbf{b}_i : \mathbf{b}_i(N_1; \dots ; N_i; \dots) = d \cdot (N_1; \dots ; N_i + 1; \dots) \quad (7.401)$$

die Besetzungszahl des i -ten 1-Teilchen-Zustands um 1 und multipliziert gleichzeitig den Zustand mit der komplexen Zahl d . Der Wertebereich dieser komplexen Zahlen c und d ist zunächst einmal nicht eingeschränkt. Da jedoch die sequenzielle Anwendung von \mathbf{a}_i und \mathbf{b}_i ,

$$\mathbf{b}_i(\mathbf{a}_i(N_1; \dots; N_i; \dots)) = c \cdot d \cdot (N_1; \dots; N_i; \dots)$$

bis auf den Phasenfaktor $c \cdot d$ wieder auf den Ausgangszustand führt, muss gelten XXX.

(XXX: Der an dieser Stelle noch fehlende, umfangreiche Text ist noch nicht verfügbar. In ihm werden auch die nachfolgenden Beziehungen enthalten und erklärt sein.)

Der Orts-Operator hat nun die Form

$$\mathbf{x}_j = \frac{l_j}{\sqrt{2}} \cdot (\mathbf{a}_j + \mathbf{a}_j^\dagger) \quad j = x, y, z \quad (7.402)$$

und der Impuls-Operator beträgt

$$\mathbf{P}_j = \frac{\hbar}{l_j} \cdot \frac{1}{i \cdot \sqrt{2}} \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_j^\dagger) \quad j = x, y, z \quad (7.403)$$

Wir fassen die in diesem Abschnitt gewonnenen Erkenntnisse noch einmal zusammen:

Die Eigenzustände von physikalischen Systemen, die aus **wechselwirkungsfreien** (!) identischen Teilchen aufgebaut sind, werden üblicherweise in 2 separaten Schritten bestimmt. Als erstes ermittelt man die Eigenzustände eines einzelnen Teilchens unter den vorgegebenen Bedingungen (räumliche Begrenzungen, äußere Felder etc.). Die Eigenzustände des N -Teilchen-Systems werden dann dadurch definiert, dass man die Besetzungszahlen für jeden dieser 1-Teilchen-Zustände angibt. Handelt es sich um Fermi-Teilchen, können die Besetzungszahlen nur die Werte 0 oder 1 annehmen, handelt es sich um Bose-Teilchen, sind beliebige Werte ≥ 0 möglich.

Tritt außerdem zwischen diesen identischen Teilchen eine Wechselwirkung auf, so muss deren Auswirkung zusätzlich berechnet werden. Hierfür werden ganz überwiegend störungstheoretische Methoden eingesetzt, s. Kapitel 7.12.

7.9 Anwendungsbeispiele (-)

Mit Hilfe der im Kapitel 7.7 hergeleiteten Beziehungen für die Operatoren der wichtigsten physikalischen Größen werden wir nun die Eigenzustände einiger einfacher physikalischer Systeme berechnen. Im Zuge dieser Berechnungen werden wir auch einige zusätzliche Bedingungen kennen lernen und anwenden, die die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ erfüllen muss, damit sie als Zustand eines realen physikalischen Systems zugelassen ist.

Diese Anwendungsbeispiele werden, bewertet nach der Komplexität der jeweils vorgegebenen physikalischen Gegebenheiten, als relativ einfach und idealisiert zu bewerten sein. Dennoch wird sich ihre konkrete Berechnung bereits als mathematisch anspruchsvoll herausstellen. Es ist daher für den Anfänger alles andere als ermutigend, wenn ich nun bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel verrate, dass er mit diesen wenigen Beispielen bereits nahezu alle physikalischen Systeme kennen gelernt haben wird, die analytisch lösbar sind. Bei allen weiteren Fragestellungen müssen wir davon ausgehen, dass wir um starke physikalische Vereinfachungen, um analytische Näherungsverfahren und numerische Berechnungsmethoden nicht herum kommen werden. Daher wird eines der nachfolgenden Kapitel (Kapitel 7.12) sich ausschließlich mit den Näherungsverfahren der *quantenmechanischen Störungstheorie* befassen.

7.9.1 Das Teilchen im Kasten-Potenzial (-)

Wir betrachten ein mechanisches Teilchen der Masse M , das sich in einem skalaren Potenzial $V(\vec{r})$ befindet. Ein derartiges System hat den Hamilton-Operator

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2 \cdot M} + V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}) \quad (7.404)$$

und die (zeitunabhängige) Schrödinger-Gleichung lautet

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}) = E \cdot \psi(x, y, z) \quad (7.405)$$

Die Funktion $V(\vec{r})$ habe folgende Struktur:

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &= 0 \text{ wenn } \left(|x| < \frac{L}{2} \text{ oder } |x| > \frac{L}{2} + d \right) \\ &\quad \text{und } \left(|y| < \frac{L}{2} \text{ oder } |y| > \frac{L}{2} + d \right) \\ &\quad \text{und } \left(|z| < \frac{L}{2} \text{ oder } |z| > \frac{L}{2} + d \right) \\ &= V_0 \text{ sonst} \end{aligned} \quad (7.406)$$

Das Potenzial definiert also einen Quader der (inneren) Kantenlänge L mit einer *Außenhaut* der Dicke d , s. Abb. XXX. (XXX: Diese Abb. ist noch nicht verfügbar.) Innerhalb und außerhalb dieses Quaders hat das Potenzial den Wert 0. Lediglich im Bereich der Außenhaut hat das Potenzial einen von 0 verschiedenen Wert V_0 . Durch diese geometrische Struktur des Potenzials $V(\vec{r})$ wird das System "mechanisches Teilchen in einem skalaren Potenzial" zu einem *faktorisierenden System* gem. Kapitel 7.8: Der Hamilton-Operator des Systems zerfällt in die additiven Terme

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(x)} + \mathbf{H}^{(y)} + \mathbf{H}^{(z)} \quad (7.407)$$

und die Wellenfunktion des Gesamtsystems lässt sich als Produkt

$$\psi(x, y, z) = \psi^{(x)}(x) \cdot \psi^{(y)}(y) \cdot \psi^{(z)}(z) \quad (7.408)$$

darstellen, wobei für jeden der Faktoren eine Schrödinger-Gleichung gilt, die nicht explizit von den anderen Ortsvariablen abhängt:

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{\partial^2 \psi^{(x)}}{\partial x^2} + V^{(x)}(\vec{r}) = E^{(x)} \cdot \psi^{(x)}(x) \quad (7.409)$$

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{\partial^2 \psi^{(y)}}{\partial y^2} + V^{(y)}(\vec{r}) = E^{(y)} \cdot \psi^{(y)}(y) \quad (7.410)$$

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{\partial^2 \psi^{(z)}}{\partial z^2} + V^{(z)}(\vec{r}) = E^{(z)} \cdot \psi^{(z)}(z) \quad (7.411)$$

Die Energie-Eigenwerte des Gesamtzustands sind dann einfach

$$E = E^{(x)} + E^{(y)} + E^{(z)} \quad (7.412)$$

Wir betrachten zunächst die für die x -Koordinate geltenden Beziehungen. Alle hierbei gewonnenen Ergebnisse sind dann in analoger Weise auf die y - und z -Komponenten übertragbar.

Im Bereich des Ortsraums mit verschwindendem Potenzial $V(\vec{r}) = 0$ gilt einfach

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{\partial^2 \psi^{(x)}}{\partial x^2} = E^{(x)} \cdot \psi^{(x)}(x) \quad (7.413)$$

Wie wir durch Nachrechnen unmittelbar bestätigen können, erfüllen alle Funktionen

$$\psi^{(x)} = \psi_0^{(x)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot E^{(x)}} \cdot x} \quad (7.414)$$

diese Bedingung. Die Funktionen $\psi^{(x)}(x)$ sind also harmonische Funktionen der Ortskoordinate x mit der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{2 \cdot \pi}{k^{(x)}} = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar}{\sqrt{M \cdot E^{(x)}}} \quad (7.415)$$

In der Quantenmechanik ist die Verwendung der Wellenzahl $k^{(x)}$ gebräuchlicher,

$$k^{(x)} = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda} = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot E^{(x)}} \quad (7.416)$$

Der Wert der komplexen Amplitude $\psi_0^{(x)}$ (zu diesem Begriff s. insbes. Absatz *Darstellung von harmonischen Schwingungen* S. 507) dieser harmonischen Funktion ergibt sich aus den Randbedingungen der DGL 7.413. Die Frage, nach welchen Kriterien diese Bedingungen hergeleitet werden können, stellen wir noch für einen Moment zurück.

Wir kümmern uns nun um den Bereich des Ortsraums mit nicht verschwindendem Potenzial $V = V_0$. Hier gilt

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{\partial^2 \psi^{(x)}}{\partial x^2} = (E^{(x)} - V_0) \cdot \psi^{(x)}(x) \quad (7.417)$$

D.h. die Struktur der DGL ist im Vergleich zur Gl. 7.413 unverändert. Es ist lediglich der für den Exponenten der e -Funktion relevante Term um die Konstante V_0 relativ zum Energie-Eigenwert $E^{(x)}$ verschoben. Solange also die Bedingung

$$E^{(x)} > V_0 \quad (7.418)$$

erfüllt ist, sind die Lösungen der DGL weiterhin harmonische Funktionen, durch das endliche Potenzial sind lediglich die Wellenzahlen verschoben:

$$\psi^{(x)}(x) = \psi_0^{(x)} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot (E^{(x)} - V_0)} \cdot x} \quad (7.419)$$

$$k^{(x)} = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot (E^{(x)} - V_0)} \quad (7.420)$$

Ist dagegen

$$E^{(x)} < V_0 \quad (7.421)$$

so wird der Klammerausdruck im Exponenten der e -Funktion in Gl. 7.419 imaginär, und die allgemeine Lösung dieser Gl. lautet nun

$$\psi^{(x)}(x) = \psi_{0+}^{(x)} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot (V_0 - E^{(x)})} \cdot x} + \psi_{0-}^{(x)} \cdot e^{+\frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot (V_0 - E^{(x)})} \cdot x} \quad (7.422)$$

Die komplexen Amplituden dieser beiden Summanden ergeben sich wieder aus den Randbedingungen der DGL, s.u. . Je nach dem Vorzeichen von x wächst jeweils einer dieser beiden Summanden mit zunehmendem Wert von $|x|$ über alle Grenzen. Inwieweit dies eine physikalische Lösung darstellen kann, werden wir noch diskutieren. Wir haben bereits erläutert, dass die für die Funktion $\psi^{(x)}(x)$ geltenden Beziehungen nicht explizit von den Werten der beiden anderen Ortskoordinaten abhängen. Es liegt dennoch eine andere Art von Abhängigkeit vor: Je nach der Wahl der konkreten Werte (y, z) für die Diskussion der Funktion $\psi^{(x)}(x)$ liegt diese ganz oder nur teilweise im Ortsbereich mit verschwindendem Potenzial V . Diese Werte (y, z) bestimmen also maßgeblich, welche der beiden bereits bestimmten Lösungstypen an dieser Stelle auftreten.

Wir diskutieren nun die Frage, wie diese beiden Lösungstypen, die für den Bereich mit $V = 0$ geltende Lösung 7.414 und die für den Bereich mit $V = V_0$ geltende Lösung ??, aneinander anzuschließen sind. Hierzu erinnern wir uns daran, dass der Impuls eines Teilchens über die Ableitungen der Funktion $\psi(\vec{r})$ nach den Ortskoordinaten definiert ist (s. Gl. 7.341). Damit diese physikalische Größe überall wohl definiert und endlich ist, muss die Funktion $\psi(\vec{r})$ überall differenzierbar sein, also insbesondere auch an der Nahtstelle zwischen den beiden über die Gl. 7.406 definierten Bereichen. Diese beiden Bedingungen der Stetigkeit und der Differenzierbarkeit liefern uns die gesuchten Anschlussbedingungen!

Der dickwandige Potenzialkasten (-)

Wir betrachten nun den Fall eines Kastenpotenzials, bei dem die Bedingung

$$d \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2 \cdot M \cdot (V_0 - E_n^{(x)})}} \quad (7.423)$$

erfüllt ist. Wie die Gl. 7.420 zeigt, stellt jetzt jeweils nur der für große Werte von $|x|$ verschwindende Summand eine physikalische Lösung dar, da anderenfalls die Funktion $\psi^{(x)}(x)$ nicht mehr normierbar ist. Die Gl. der Wellenfunktion im Bereich $|x| > \frac{L}{2}$ lautet daher nun

$$\psi^{(x)}(x) = \psi_0^{(x)} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot (V_0 - E^{(x)})} \cdot |x|} \quad \forall |x| > \frac{L}{2} \quad (7.424)$$

In der Nähe der Außenhaut des Kastens ist dann die Wellenfunktion bereits bis auf beliebig kleine Werte abgeklungen, so dass für den Außenbereich des Kastens einfach gilt:

$$\psi^{(x)} \left(|x| > \frac{L}{2} + d \text{ oder } |x| > \frac{L}{2} + d \text{ oder } |x| > \frac{L}{2} + d \right) \equiv 0 \quad (7.425)$$

Für die nun folgenden Überlegungen und Rechnungen gehen wir bei der harmonischen Lösung (Gl. 7.414) (aus didaktischen Gründen) zu der Darstellung als cos- Funktion

$$\psi^{(x)} = \psi_0^{(x)} \cdot \cos \left(\frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot E^{(x)}} \cdot x \right) \quad (7.426)$$

bzw. als Sinusfunktion

$$\psi^{(x)} = \psi_0^{(x)} \cdot \sin \left(\frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2 \cdot M \cdot E^{(x)}} \cdot x \right) \quad (7.427)$$

über, s. wieder Absatz S. 507. Außerdem führen wir eine Normierung aller Energiewerte durch:

$$\tilde{E} = E \cdot \frac{2 \cdot M \cdot L^2}{\pi^2 \cdot \hbar^2} \quad (7.428)$$

Dann wird die Gl. 7.426 zu

$$\psi^{(x)} = \psi_0^{(x)} \cdot \cos \left(\pi \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} \cdot \frac{x}{L} \right) \quad (7.429)$$

und die Gl. ?? wird zu

$$\psi^{(x)}(x) = \psi_1^{(x)} \cdot e^{-\pi \cdot \sqrt{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)})} \cdot \frac{|x|}{L}} \quad (7.430)$$

B.a.w. beschränken wir uns auf die Betrachtung von Zuständen, die die Bedingung

$$\tilde{V}_0 > \tilde{E}^{(x)} \quad (7.431)$$

erfüllen und betrachten zunächst die der Gl. 7.429 entsprechenden Lösungen. Die Ableitung der Funktion 7.429 nach der Ortskoordinate x ergibt dann

$$\frac{d\psi^{(x)}}{dx} = -\psi_0^{(x)} \cdot \sin\left(\pi \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} \frac{x}{L}\right) \cdot \pi \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} \frac{1}{L} \quad (7.432)$$

Die Ableitung der Funktion 7.428 nach x beträgt

$$\frac{d\psi^{(x)}}{dx} = -\text{sign}(x) \cdot \psi_1^{(x)} \cdot e^{-\pi \cdot \sqrt{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)}) \cdot \frac{|x|}{L}}} \cdot \pi \cdot \sqrt{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)})} \cdot \frac{1}{L} \quad (7.433)$$

Die Stetigkeitsbedingung für den rechten Randpunkt des Potenzialkastens bei $x = +\frac{L}{2}$ lautet dann

$$\psi_0^{(x)} \cdot \cos\left(\pi \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} \cdot \frac{1}{2}\right) = \psi_1^{(x)} \cdot e^{-\pi \cdot \sqrt{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)})} \cdot \frac{1}{2}} \quad (7.434)$$

und die Differenzierbarkeitsbedingung

$$-\psi_0^{(x)} \cdot \sin\left(\pi \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} \frac{1}{2}\right) \cdot \pi \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} \frac{1}{L} = -\psi_1^{(x)} \cdot e^{-\pi \cdot \sqrt{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)})} \cdot \frac{1}{2}} \cdot \pi \cdot \sqrt{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)})} \cdot \frac{1}{L} \quad (7.435)$$

Wir setzen in diese Gl. die Stetigkeitsbedingung 7.432 ein und erhalten nach wenigen Umformungen

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}}\right) = \sqrt{\frac{(\tilde{V}_0 - \tilde{E}^{(x)})}{\tilde{E}^{(x)}}} = \sqrt{\frac{\tilde{V}_0}{\tilde{E}^{(x)}} - 1} \quad (7.436)$$

Dies ist eine implizite Gl. zur Bestimmung der Energie-Eigenwerte $\tilde{E}^{(x)}$. Wegen der π -Periodizität der tan-Funktion hat diese Gl. eine abzählbare Menge von Lösungen, die jedoch abbricht, sobald die Bedingung 7.431 verletzt wird.

Wir wenden uns nun den Lösungen 7.427 der DGL 7.413 zu. Wie man leicht nachrechnen kann, führen diese zu der Gl.

$$-\cot\left(\frac{\pi}{2} \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}}\right) = \sqrt{\frac{\tilde{V}_0}{\tilde{E}^{(x)}} - 1} \quad (7.437)$$

als Bestimmungs-Gl. für die Energie-Eigenwerte $\tilde{E}^{(x)}$. Insgesamt erhalten wir also 2 abzählbare Menge von Lösungen, die jeweils abbrechen, sobald die Bedingung 7.431 verletzt wird. Eine analytische Normierung dieser Funktionen $\psi^{(x)}(x)$ ist relativ umständlich in der Durchführung. Da hierdurch keine neuen physikalischen Erkenntnisse gewonnen werden können, habe ich der Einfachheit halber an dieser Stelle darauf verzichtet. Die Abb. 6 gibt das jeweils 1. Element aus dieser Menge von Lösungen (numerisch normiert) wieder, und zwar jeweils für einen relativ hohen Wert des Kastenpotenzials ($\tilde{V}_0 = 1000$) und für einen relativ niedrigen Wert ($\tilde{V}_0 = 20$).

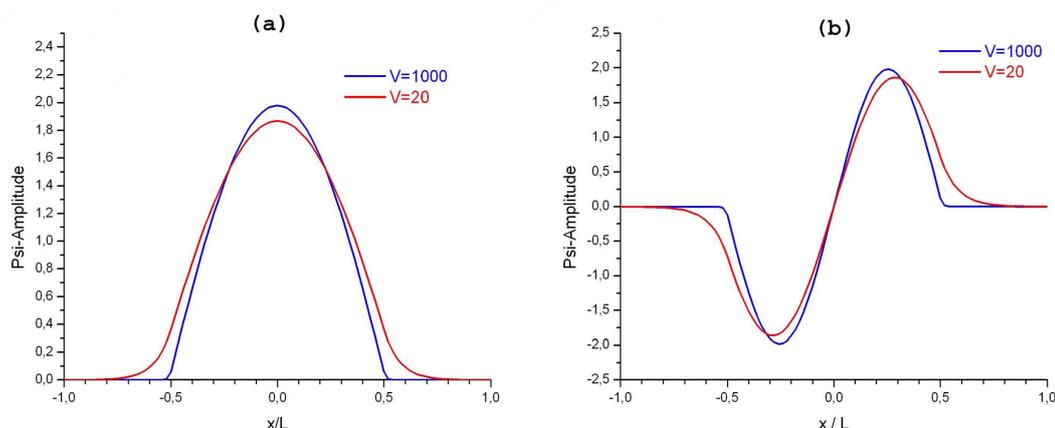


Abb. 6 Wellenfunktion $\psi(x)$ eines mechanischen Teilchens in einem Kastenpotenzial
 (a) $\tilde{E} = 0,96091$; $\tilde{V}_0 = 1000$ (blau) und $\tilde{E} = 0,76505$; $\tilde{V}_0 = 20$ (rot)
 (b) $\tilde{E} = 3,84359$; $\tilde{V}_0 = 1000$ (blau) und $\tilde{E} = 3,04447$; $\tilde{V}_0 = 20$ (rot)

Je höher der Wert des Potenzials ist, um so näher liegt der Betrag der Wellenfunktion an den Stellen $x = \pm \frac{L}{2}$ bereits bei dem Wert 0. In jedem Fall klingt der verbleibende Restwert dann innerhalb des Potenzialwalls mit $\tilde{V} = \tilde{V}_0$ jeweils exponentiell ab. Der Energie-Eigenwert ändert sich signifikant mit dem Wert des Kastenpotenzials. Die nachfolgende Tabelle gibt einige Beispiele für dieses Verhalten wieder. Der hierin benutzte Laufindex n ergibt sich aus der Zusammenfassung der beiden aus den Gl.-en 7.426 und 7.427 folgenden Lösungstypen, in dem den aus der 1. Gl. folgenden Lösungen alle ungeraden Zahlenwerte n und den aus der 2. Gl. folgenden Lösungen alle geraden Werte zugeordnet werden, s. hierzu insbesondere den nachfolgenden Absatz S. 730 .

\tilde{V}	$\tilde{E}_{n=1}$	$\tilde{E}_{n=2}$	$\tilde{E}_{n=3}$	$\tilde{E}_{n=4}$	$\tilde{E}_{n=5}$	$\tilde{E}_{n=6}$
∞	1	4	9	16	25	36
10^4	0,98739	3,9495	8,8865	15,7982	24,685	35,5457
10^3	0,96092	3,8436	8,6478	15,3932	24,019	34,5452
10^2	0,88372	3,5330	7,9419	14,0996	21,989	21,5851
10^1	0,69017	2,7239	5,9495	—	—	—

Die Zahlenwerte der Energie-Eigenwerte $\tilde{E}^{(x)}$ habe ich durch numerische Lösung der impliziten Bestimmungsgleichung 7.437 berechnet.

Der Grenzfall $E \ll V_0$ (-)

Wir betrachten nun den Fall eines *dickwandigen Kastenpotenzials*, bei dem zusätzlich die Bedingung

$$\tilde{V}_0 \gg 1 \quad (7.438)$$

erfüllt ist. Unter diesen Bedingungen dringt die Wellenfunktion $\psi^{(x)}(x)$ nicht mehr signifikant in den Bereich mit $V = V_0$ ein und die Bedingung 7.431 ist für alle Eigenzustände mit endlicher Energie erfüllt. Die der Gl. 7.434 entsprechende Bedingung lautet dann einfach

$$\psi^{(x)}\left(+\frac{L}{2}\right) = \psi^{(x)}\left(-\frac{L}{2}\right) = 0 \quad (7.439)$$

und die Bestimmungsgl. für die Energie-Eigenwerte (Gl. 7.436 bzw. 7.437) wird zu

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}}\right) = \infty \Rightarrow \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} = (2 \cdot n - 1) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.440)$$

bzw.

$$-\cot\left(\frac{\pi}{2} \cdot \sqrt{\tilde{E}^{(x)}}\right) = \infty \Rightarrow \sqrt{\tilde{E}^{(x)}} = (2 \cdot n) \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.441)$$

Zusammengefasst ergeben sich die Energie-Eigenwerte

$$\tilde{E}^{(x)} = n^2 \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.442)$$

Die von uns gewählte Referenzenergie (s. Gl. 7.428)

$$E_{ref} = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2 \cdot M \cdot L^2} \quad (7.443)$$

ist also identisch mit dem niedrigsten Energie-Eigenwert für das mechanische Teilchen im beliebig hohen dickwandigen Kastenpotenzial. Die Eigenzustände dieses Systems lauten

$$\begin{aligned} \psi_{2 \cdot n - 1}^{(x)} &= \psi_{2 \cdot n - 1; 0}^{(x)} \cdot \cos\left(\pi \cdot (2 \cdot n - 1) \cdot \frac{x}{L}\right) \quad \forall |x| \leq \frac{L}{2} \\ &= 0 \text{ sonst} \end{aligned} \quad (7.444)$$

$$\begin{aligned} \psi_{2 \cdot n}^{(x)} &= \psi_{2 \cdot n; 0}^{(x)} \cdot \sin\left(\pi \cdot 2 \cdot n \cdot \frac{x}{L}\right) \quad \forall |x| \leq \frac{L}{2} \\ &= 0 \text{ sonst} \end{aligned} \quad (7.445)$$

Wenn wir also weiterhin den Zustand minimaler Bewegungsenergie als den *Ruhezustand* des Systems bezeichnen, dann besitzt das Teilchen im Kastenpotenzial in seinem Ruhezustand eine **endliche** Bewegungsenergie gem. Gl. 7.443. Diese Energie entspricht der *Lokalisations-Energie*, wie wir sie im Abschnitt 7.2.3 besprochen haben.

Ist die Bedingungen 7.438 in analoger Weise auch für die beiden anderen Ortskoordinaten y und z gültig, so haben die Eigenzustände des Gesamtsystems die Energie

$$E_{n_x, n_y, n_z} = E_{n_x}^{(x)} + E_{n_y}^{(y)} + E_{n_z}^{(z)} = \frac{1}{2 \cdot M} \cdot \left(\frac{\pi \cdot \hbar}{L} \right)^2 \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (7.446)$$

Das dünnwandige Kasten-Potenzial (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Das dünnwandige Kasten-Potenzial* ist noch nicht verfügbar.)

Nicht lokalisierte Zustände (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Nicht lokalisierte Zustände* ist noch nicht verfügbar.)

Die Verallgemeinerung auf ein beliebiges Objektgesetz $E = E(P)$ (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Die Verallgemeinerung auf ein beliebiges Objektgesetz $E = E(P)$* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Das Teilchen im Kasten-Potenzial* ist noch nicht verfügbar.)

7.9.2 Der harmonische Oszillator (-)

In der klassischen Mechanik ist der harmonische Oszillator ein Objekt der Masse M , das sich in einem Feld der Form

$$V(x) = c \cdot x^2 \quad (7.447)$$

befindet, s. Absatz S. 319. Die Koordinate x in der Gl. 7.447 ist von den übrigen Ortskoordinaten y und z des betrachteten Systems entkoppelt, so dass wir uns bei der Diskussion des Oszillator-Verhaltens auf den 1-dimensionalen Fall beschränken dürfen. Der Einfachheit halber haben wir sogleich den Ursprung unseres Koordinatensystems in den Ort x gelegt, in dem sich das Objekt im Ruhezustand befindet. Die Gleichung für die stationäre Bewegung dieses Systems lautet dann

$$x(t) = x_0 \cdot \sin(\omega \cdot t + \varphi_0) \quad (7.448)$$

Das Objekt führt eine harmonische Schwingung aus mit der Frequenz ω , der Amplitude x_0 und der Phasenverschiebung φ_0 relativ zum (willkürlich gewählten) Nullpunkt der Zeitskala. Die Kreisfrequenz beträgt

$$\omega = \sqrt{\frac{c}{M}} \quad (7.449)$$

Amplitude und Phasenverschiebung ergeben sich aus den Anfangsbedingungen, d.h. durch Angabe der Zahlenwerte

$$x(t = 0) ; v(t = 0) \Rightarrow \quad (7.450)$$

$$\varphi_0 = \arcsin \left(\frac{x(t = 0)}{x_0} \right) \quad (7.451)$$

$$x_0 = \frac{v(t = 0)}{\omega \cdot \cos(\varphi_0)} \quad (7.452)$$

Als Vorbereitung auf den Vergleich des klassischen harmonischen Oszillators mit seinem quantenmechanischen Analogon berechnen wir die *Aufenthaltswahrscheinlichkeit* für das Masse-Teilchen in einem klassischen harmonischen Oszillator. Mit dieser Begriffsbildung meinen wir die Wahrscheinlichkeit, mit der zu einem willkürlich herausgegriffenen Zeitpunkt das Teilchen an einem bestimmten Ort x angetroffen wird. Im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie ist die Ortskoordinate bei diesem Beispiel kontinuierlich verteilt, so dass wir die Frage nach der Wahrscheinlichkeitsdichte stellen müssen, s. Absatz S. 692. Wir folgen hierbei den im Abschnitt 7.4.10 genannten Empfehlungen und berechnen zunächst die Verteilungsfunktion dieser Ortskoordinate x :

$$p(x' \leq x) = F_x(x) \quad (7.453)$$

Offensichtlich ist diese Größe identisch mit der Summe der Längen aller Zeitsegmente, während der diese Bedingung $x' \leq x$ erfüllt ist, dividiert durch die gesamte Messzeit. Wegen der Periodizität der Funktion gem. Gl. 7.448 genügt es, die Berechnung über eine Schwingungsperiode auszuführen. Für diese Berechnung sind einige Fallunterscheidungen nötig. Offenbar gilt

$$F_x(x \geq x_0) = 1 \quad (7.454)$$

$$F_x(x \leq -x_0) = 0 \quad (7.455)$$

Als nächstes betrachten wir den Wertebereich

$$0 \leq x < x_0 \quad (7.456)$$

In diesem Wertebereich nimmt die Gl. 7.448 den Funktionswert x genau 2-mal an, nämlich bei den Werten

$$\varphi_1 = \arcsin \frac{x}{x_0} ; \varphi_2 = \pi - \varphi_1 \quad (7.457)$$

und es gilt

$$(x' \leq x) \Leftrightarrow \varphi \notin [\varphi_1; \varphi_2] \Rightarrow \quad (7.458)$$

$$F_x(x) = 1 - \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \left(\pi - 2 \cdot \arcsin \frac{x}{x_0} \right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \cdot \arcsin \frac{x}{x_0} \quad (7.459)$$

Es verbleibt noch die Behandlung des Wertebereichs

$$-x_0 < x \leq 0 \quad (7.460)$$

In diesem Bereich nimmt die Gl. 7.448 den Funktionswert x an bei den Werten

$$\varphi_1 = \pi + \arcsin \left| \frac{x}{x_0} \right|; \quad \varphi_2 = 2 \cdot \pi - \arcsin \left| \frac{x}{x_0} \right| \quad (7.461)$$

und es gilt

$$(x' \leq x) \Leftrightarrow \varphi \in [\varphi_1; \varphi_2] \Rightarrow \quad (7.462)$$

$$F_x(x) = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \left(\pi - 2 \cdot \arcsin \left| \frac{x}{x_0} \right| \right) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \cdot \arcsin \left| \frac{x}{x_0} \right| \quad (7.463)$$

Da in diesem Wertebereich der \arcsin -Wert negativ ist, können wir die beiden Teilergebnisse 7.459 und 7.463 auf einfache Weise zusammenfassen:

$$F_x(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \cdot \arcsin \frac{x}{x_0} \quad \forall |x| < x_0 \quad (7.464)$$

Aus dieser Verteilungsfunktion für den Aufenthaltsort des Teilchen berechnen wir nun die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_x(x) = \frac{dF_x(x)}{dx} = \frac{1}{\pi \cdot x_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}} \quad (7.465)$$

Die Abb. 7 zeigt den Verlauf dieser beiden Funktionen $F_x(x)$ und $f_x(x)$. Zur Vereinfachung dieser Darstellung bin ich an dieser Stelle auf die relative Ortskoordinate

$$\hat{x} = \frac{x}{x_0} \quad (7.466)$$

übergegangen, d.h. die Ortskoordinate wurde auf den aktuellen Wert der Amplitude bezogen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $f(\hat{x})$ besitzt an den Stellen $|\hat{x}| = 1$ eine Wurzelsingularität. Die Verteilungsfunktion verbleibt hier stetig, hat aber an dieser Stelle eine singuläre Steigung.

Die Amplitude x_0 ist eine wichtige Kenngröße zur Charakterisierung des Schwingungszustands eines klassischen harmonischen Oszillators. Es wird jedoch später nicht einfach sein, beim quantenmechanischen Oszillator eine dieser kinematischen Kenngröße entsprechende Größe aufzufinden. Die Amplitude x_0 des klassischen Oszillators ist jedoch unmittelbar mit dessen Gesamtenergie in diesem Schwingungszustand verknüpft. Wir bestimmen diesen Zusammenhang: Da die Summe von Bewegungsenergie und Lageenergie,

$$E_{ges} = \frac{M \cdot v^2}{2} + \frac{c \cdot x^2}{2} \quad (7.467)$$

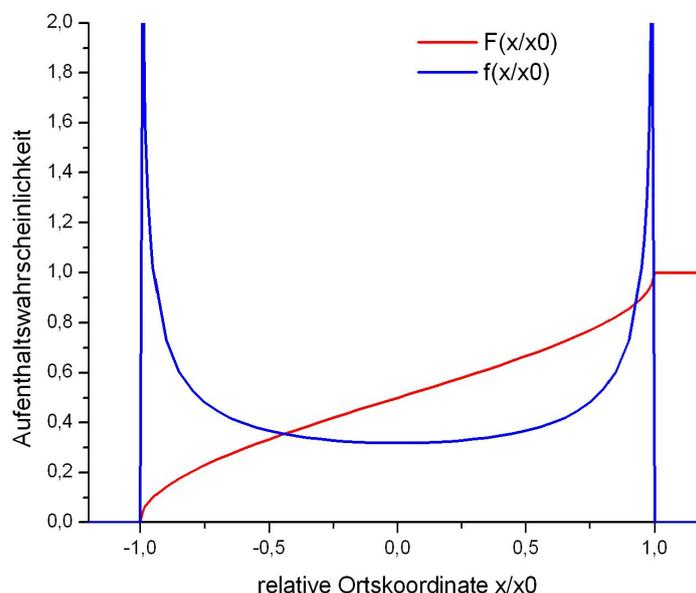


Abb. 7 Aufenthalt-Verteilungsfunktion $F(x/x_0)$ und -Dichte $f(x/x_0)$ des klassischen harmonischen Oszillators

in einem bestimmten Schwingungszustand jeweils konstant ist, beträgt diese Gesamtenergie einfach

$$E_{ges} = \frac{c \cdot x_0^2}{2} \quad (7.468)$$

Wir betrachten nun das quantenmechanische Analogon zu diesem klassischen harmonischen Oszillator. Dieses ist ein Teilchen der Masse M , das sich in einem Potenzial gem. der Gl. 7.447 befindet. Dabei lassen wir die Frage, welches reale quantenmechanische System mit diesen Annahmen zumindest in 1. Näherung verträglich ist, zunächst noch offen. Wichtige Voraussetzung für die Anwendbarkeit der nachfolgend erarbeiteten Ergebnisse ist wieder, dass die Koordinate x des betrachteten Systems von den übrigen Variablen entkoppelt ist. Dann nämlich dürfen wir die für diese Koordinate geltende Schrödinger-Gl. separat lösen. Der Hamilton-Operator dieses Systems lautet

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{\mathbf{P}^2}{2 \cdot M} + \frac{c}{2} \cdot x^2 \\ &= \frac{-\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \frac{c}{2} \cdot x^2 \end{aligned} \quad (7.469)$$

und es ergibt sich die (zeitunabhängige) Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot M} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{c}{2} \cdot x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (7.470)$$

Dieses ist eine nichtlineare Differenzialgleichung. Für sie gibt es keine a priori vorgegebene Vorschrift zur Bestimmung ihrer Lösungen $\psi_n(x)$. In Anlehnung an den klassischen harmonischen Oszillator führen wir folgende Abkürzung ein:

$$\omega = \sqrt{\frac{c}{M}} \quad (7.471)$$

Außerdem führen wir eine Variablensubstitution durch mit dem Ziel, zu einer sog. *Masterlösung* für das betrachtete Problem zu gelangen. Darunter versteht man eine Transformation der Ausgangsgleichung in eine solche, die möglichst wenig noch verbleibende frei wählbare Parameter enthält. Im hier vorliegenden Fall beziehen wir die Energie auf die Größe $\hbar \cdot \omega$,

$$E^{(r)} = \frac{E}{\hbar \cdot \omega} \quad (7.472)$$

und die Ortskoordinate x auf die Größe

$$x_{ref} = \sqrt{\frac{\omega \cdot M}{\hbar}} \Rightarrow x^{(r)} = x \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{\omega \cdot M}} \quad (7.473)$$

Diesen Ausdruck für die Referenzlänge x_{ref} erhalten wir durch folgende Überlegung: Der durch die Gl. 7.470 definierte quantenmechanische harmonische Oszillator ist durch die Werte zweier Kenngrößen eindeutig festgelegt. Diese beiden Größen sind M und c , oder auch M und ω . Alle Vorschriften zur Berechnung weiterer Kenngrößen dieses Systems sollten also außer diesen beiden Größen höchstens noch gewisse Naturkonstanten enthalten. Hierbei erwarten wir insbesondere das Auftreten der für die Quantenmechanik fundamentalen Größe \hbar . Der einfachste Ausdruck, der nur diese 3 Größen M , ω und \hbar enthält und die Dimension einer Länge besitzt, entspricht aber genau der Gl. 7.473. Die Frage nach der exakten physikalischen Bedeutung von x_{ref} lassen wir zunächst offen. Ich werde hierauf im Laufe dieses Abschnitts zurückkommen.

Durch diese Schritte wird die Gl. 7.470 zu

$$-\frac{d^2\psi(x^{(r)})}{d(x^{(r)})^2} + (x^{(r)})^2 \cdot \psi(x^{(r)}) = 2 \cdot E^{(r)} \cdot \psi(x^{(r)}) \quad (7.474)$$

Diese Gl. muss für **jeden** Wert $x^{(r)}$ gelten, auch für sehr große Werte von $x^{(r)}$. Da andererseits der Wert $E^{(r)}$ für einen betrachteten Eigenzustand $\psi(x^{(r)})$ konstant ist, also insbesondere endlich, muss für jeden Eigenzustand gelten:

$$\lim_{x^{(r)} \rightarrow \infty} \left(-\frac{d^2\psi(x^{(r)})}{d(x^{(r)})^2} + (x^{(r)})^2 \cdot \psi(x^{(r)}) \right) = 0 \quad (7.475)$$

Dieses asymptotische Verhalten hat insbesondere die Funktion

$$\psi(x^{(r)}) = e^{-\frac{1}{2} \cdot (x^{(r)})^2} \quad (7.476)$$

Wir versuchen daher den Ansatz

$$\psi(x^{(r)}) = e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot H_n(x^{(r)}) \quad (7.477)$$

als Lösung für die DGL 7.474. $H_n(x^{(r)})$ sei ein uns noch nicht näher bekanntes Polynom vom endlichem Grad n in $x^{(r)}$. Dieser Ansatz führt auf die folgenden Ausdrücke:

$$\frac{d\psi(x^{(r)})}{dx^{(r)}} = -x^{(r)} \cdot e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot H_n(x^{(r)}) + e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot \frac{dH_n(x^{(r)})}{dx^{(r)}} \quad (7.478)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi(x^{(r)})}{d(x^{(r)})^2} &= - \left(e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} - (x^{(r)})^2 \cdot e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \right) \cdot H_n(x^{(r)}) \\ &\quad - 2 \cdot x^{(r)} \cdot e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot \frac{dH_n(x^{(r)})}{dx^{(r)}} + e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot \frac{d^2H_n(x^{(r)})}{d(x^{(r)})^2} \end{aligned} \quad (7.479)$$

Damit wird die Gl. 7.474 zu

$$-\frac{d^2H_n(x^{(r)})}{d(x^{(r)})^2} + 2 \cdot x^{(r)} \cdot \frac{dH_n(x^{(r)})}{dx^{(r)}} = (2 \cdot E^{(r)} - 1) \cdot H_n(x^{(r)}) \quad (7.480)$$

Vergleichen wir nun diese Gl. mit der DGL 7.175, die für die im Absatz S. 676 behandelten Hermite'schen Polynome gilt, so stellen wir fest, dass diese beiden DGLen **identisch** sind, sofern wir verlangen, dass

$$2 \cdot E^{(r)} - 1 = 2 \cdot n \Rightarrow E^{(r)} = n + \frac{1}{2} \quad (7.481)$$

Damit haben wir gezeigt:

1. Der quantenmechanische harmonische Oszillator hat eine abzählbar unendliche Menge von Eigenzuständen $\psi_n(x^{(r)})$.
2. Diese Eigenzustände haben, bis auf einen noch zu bestimmenden konstanten, aber von n abhängenden Faktor C_n , die durch die Gl. 7.477 angegebene Form. Die Polynome $H_n(x^{(r)})$ in dieser Gl. sind identisch mit den im Absatz S. 676 behandelten Hermite'schen Polynomen.
3. Die Energie-Eigenwerte in diesen Zuständen betragen

$$E_n = \hbar \cdot \omega \cdot \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (7.482)$$

4. In seinem Ruhezustand ($n = 0$) hat der harmonische Oszillator die Energie

$$E_0 = \frac{\hbar \cdot \omega}{2} \quad (7.483)$$

5. Beim Übergang des harmonischen Oszillators von einem beliebigen Eigenzustand in den nächst höheren Eigenzustand beträgt die Energieaufnahme immer

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar \cdot \omega \quad (7.484)$$

Die Eigenfunktion des n -ten Eigenzustands des harmonischen Oszillators lautet also

$$\psi(x^{(r)}) = C_n \cdot e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot H_n^{(0)}(x^{(r)}) \quad (7.485)$$

Aus gutem Grund (s.u.) habe ich bei dieser Formulierung diejenigen Polynome verwendet, die (bei Anwendung des im Absatz S. 676 definierten Skalarproduktes) orthonormiert sind. Die quantenmechanische Normierungsbedingung für diese Zustände lautet nun

$$\langle \psi_n(x^{(r)}) | \psi_n(x^{(r)}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_n(x^{(r)}))^2 \cdot dx^{(r)} = C_n^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^{(r)})^2} \cdot (H_n^{(0)}(x^{(r)}))^2 \cdot dx^{(r)} = 1 \quad (7.486)$$

Die Funktionen $H_n^{(0)}(x^{(r)})$ wurden aber im Absatz S. 676 gerade so berechnet, dass dieses Integral gleich 1 ist. Es gilt also einfach

$$\psi(x^{(r)}) = e^{-\frac{(x^{(r)})^2}{2}} \cdot H_n^{(0)}(x^{(r)}) \quad (7.487)$$

Wir berechnen nun die Wellenfunktion des oszillierenden Teilchens in den ersten 5 Eigenzuständen. Das Ergebnis zeigt die Abb. 8. Die zu geraden Werten von n gehörenden Eigenzustände sind symmetrisch bzgl. der ψ -Achse,

$$\psi_n(-x^{(r)}) = \psi_n(x^{(r)}) \text{ wenn } n \text{ gerade} \quad (7.488)$$

und die zu ungeraden Werten von n gehörenden Eigenzustände sind antisymmetrisch bzgl. der ψ -Achse,

$$\psi_n(-x^{(r)}) = -\psi_n(x^{(r)}) \text{ wenn } n \text{ ungerade} \quad (7.489)$$

Jeder Eigenzustand $\psi_n(x^{(r)})$ nimmt insgesamt genau $(n + 1)$ -mal einen Extremwert an.

Aus der Abb. 8 können wir nun auch die Bedeutung der von mir etwas willkürlich eingeführten Referenzlänge x_{ref} ablesen: Das Intervall $(-1 < x^{(r)} < +1)$

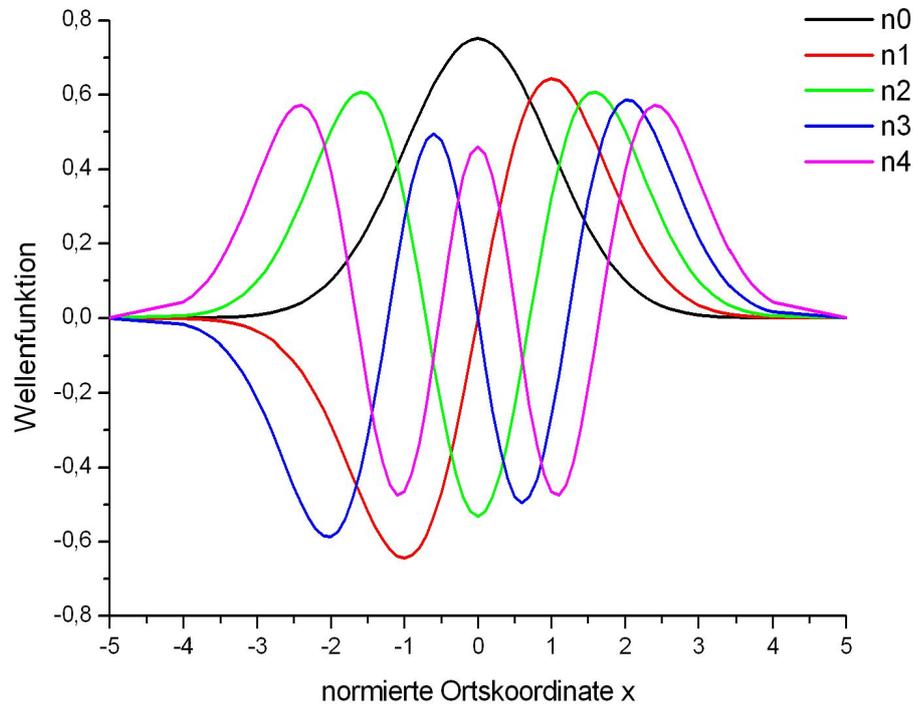


Abb. 8 Wellenfunktion $\psi(\tilde{x})$ der ersten 5 ($n = 0$ bis $n = 4$) Eigenzustände des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

markiert den Wertebereich, in dem die zu kleinen Werten von n gehörenden Eigenzustände konzentriert sind. Mit zunehmenden Werten von n breiten sich die Eigenzustände dann aber immer weiter über dieses Anfangsintervall hinaus aus.

Einer direkten physikalischen Interpretation besser zugänglich als die Wellenfunktion selbst ist deren Quadrat, die (Dichte der) Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Teilchen der Masse M . Die Abb. 9 zeigt diese Funktion für den Eigenzustand mit dem Wert $n = 10$. Diese Funktion nimmt ihr absolutes Maximum nun bei größeren Absolutwerten der Ortskoordinate an und fällt danach sehr schnell auf deutlich niedrige Werte ab. Bei noch höheren Werten von n steigen die beiden äußeren Maxima weiter an und zwar auf Kosten der dazwischen liegenden Werte. Die Funktion wird so in ihrem Verlauf der in der Abb. 7 dargestellten Aufenthaltswahrscheinlichkeit des klassischen harmonischen Oszillators immer ähnlicher. Es besteht also die Versuchung, dies als ein konkretes Beispiel für den stetigen Übergang der quantenmechanischen Beschreibung eines Systems zu seinem klassischen Analogon zu interpretieren. Dies ist jedoch streng genommen **nicht korrekt!**

Auch für sehr hohe Werte von n ist nämlich der Eigenzustand $\psi_n(x)$ mit der

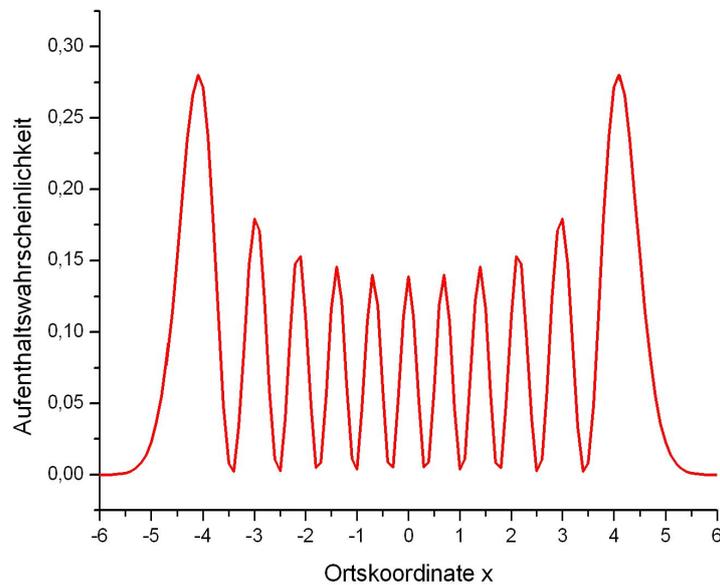


Abb. 9 Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines harmonischen Oszillators im Eigenzustand $n = 10$

Energie E_n weiterhin ein **stationärer** Zustand des (nicht mit der Umgebung wechselwirkenden) Systems eines harmonischen Oszillators. Es treten also keine messbaren Veränderungen einer physikalischen Größe auf. Wenn das Teilchen z.B. elektrisch geladen ist, erzeugt es in diesem Zustand keinerlei elektromagnetische Strahlung. Der klassische harmonische Oszillator, der sich in einem Zustand derselben Energie $E_{ges} = E_n$ befindet, stellt ein sich **bewegendes** System dar. Die zeitliche Änderung z.B. seiner Ortskoordinate (oder irgendeiner anderen physikalischen Größe) lässt sich sehr wohl messen. Und wenn das Teilchen eine elektrische Ladung trägt, sendet es während dieser mechanischen Schwingung sehr wohl elektromagnetische Strahlung aus. Der Übergang vom quantenmechanischen Oszillator zum klassischen Analogon erfordert also mehr als nur die Auswahl eines Eigenzustands mit sehr hohen Werten von n . Ich werde auf diese Problematik im Kapitel 7.10 zurück kommen.

Zum Abschluss dieses Abschnitts weise ich explizite auf die innere Logik der Herleitung dieser Ergebnisse hin:

Im Rahmen der Quantenmechanik ist kein Raum für eine unterschiedliche, z.B. problemspezifische Definition des Skalarproduktes, das seinerseits das Werkzeug ist zur Berechnung der Erwartungswerte der physikalischen Größen. Insbesondere gilt im Rahmen der Schrödinger-Darstellung die Gl. 7.323 als Berechnungsvorschrift für das

Skalarprodukt, im 1-dimensionalen Fall also die Gl.

$$\langle \psi_1(x) | \psi_2(x) \rangle = \int \psi_1(x) \cdot \psi_2^*(x) \cdot dx \quad (7.490)$$

Für die Einführung eines konvergenz-erzeugenden Faktors e^{-x^2} ist daher an dieser Stelle kein Platz. Bei der Entwicklung der Theorie der Funktionen-Räume haben wir dagegen mit unterschiedlichen Skalarprodukt-Definitionen gearbeitet und auf diese Weise insbesondere auch die Hermite'schen Polynome hergeleitet und die für sie geltende DGL 7.175 bewiesen. Einen direkten Bezug zu den mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik hat es hierbei nicht gegeben. Sobald sich dann aber herausstellte, dass sich die Lösungen der Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators als Produkt schreiben lassen aus einem Faktor $e^{-\frac{x^2}{2}}$ und einem Polynom endlichen Grades n , für das eine DGL gilt, die mit der Hermite'schen DGL identisch ist, durften wir die an diesen beiden Stellen auf unterschiedliche Weise gewonnenen Ergebnisse mit einander verknüpfen.

7.9.3 Das Elektron im Coulombfeld (-)

Wir betrachten nun ein einzelnes Elektron, das sich in einem zentralsymmetrischen elektrostatischen Feld befindet mit dem Potenzial

$$U(r) = \frac{Q}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (7.491)$$

Wenn wir als Zahlenwert der im Zentrum unseres Koordinatensystems konzentrierten Ladung Q die positive Ladungseinheit Q_0 ansetzen, entspricht diese Konfiguration dem einfachsten real existierende Atom, dem Wasserstoff-Atom. Der Hamilton-Operator dieses Systems hat offenbar die Struktur

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2 \cdot M_e} - \frac{Q_0^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (7.492)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2 \cdot M_e} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{Q_0^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (7.493)$$

Da das Potenzial $U(r)$ in vorliegenden Beispiel kugelsymmetrisch ist, ist es von Vorteil, wenn wir die weitere Berechnung in Kugelkoordinaten durchführen. Der Laplace-Operator hat in Kugelkoordinaten die Form (s. Absatz S. 208)

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (7.494)$$

wird dann der Hamilton-Operator zu

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar^2}{2 \cdot M_e} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{Q_0^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (7.495)$$

Die (zeitunabhängige) Schrödinger-Gleichung lautet nun

$$E \cdot \psi = \frac{\hbar^2}{2 \cdot M_e} \cdot \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2 \cdot \sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{Q_0^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \quad (7.496)$$

(XXX: Der weitere, umfangreiche Text des Abschnitts *Das Elektron im Coulombfeld* ist noch nicht verfügbar. Danach folgt:)

Die Energie-Eigenwerte des Systems sind

$$E_n = -\frac{1}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0)^2} \cdot \frac{M_e \cdot Q_0^4}{2 \cdot n^2 \cdot \hbar^2} \quad (7.497)$$

Hierbei ist die Energie nicht etwa relativ zum Grundzustand gemessen, sondern relativ zu der Energie des Zustands, in dem das Atom vollständig ionisiert ist.

Das Wasserstoff-Atom besitzt also eine abzählbar unendliche Anzahl von stationären Zuständen. Die Energie dieser Zustände bilden das in der Abb. 10 dargestellte

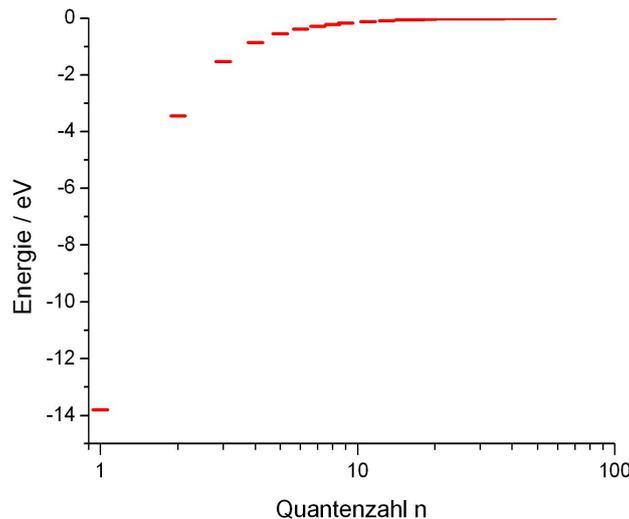


Abb. 10 Energie-Eigenwerte des H-Atoms

diskrete Spektrum, nämlich eine Zahlenfolge, die gegen den Grenzwert

$$E_\infty = 0 \quad (7.498)$$

konvergiert. Die Differenz

$$E_\infty - E_1 = \frac{1}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0)^2} \cdot \frac{M_e \cdot Q_0^4}{2 \cdot \hbar^2} = 13,6 \cdot eV \quad (7.499)$$

ist identisch mit der Ionisierungs-Energie des Atoms.

Alle Eigenzustände erfüllen die Bedingungen

$$0 \leq l < n ; |m| \leq l \quad (7.500)$$

Die Eigenzustände dieses Systems sind vollständig Drehimpuls-entartet: Beide Quantenzahlen l und m kommen in der Gl. 7.497 nicht vor. Der Bahndrehimpuls L hat in den stationären Zuständen die Eigenwerte

$$L = \sqrt{l \cdot (l + 1)} \cdot \hbar \text{ wobei } l = 0, 1 \dots (n - 1) \quad (7.501)$$

und seine z -Komponente die Eigenwerte

$$L_z = \sqrt{m \cdot (m + 1)} \cdot \hbar \text{ wobei } |m| \leq l \quad (7.502)$$

m wird meist als die *magnetische* Quantenzahl des Systems bezeichnet.

Die in diesem Abschnitt präsentierte quantenmechanische Berechnung der Eigenzustände eines H -Atoms und deren Energien gelang als erstem Schrödinger 1926, s. [37]. Bereits die Berechnung des Wertes der Ionisierungs-Energie (Gl. 7.499) war eine hervorragende Bestätigung der neuen Quantenmechanik. Denn diese Beziehung verknüpft die einer genauen Messung zugängliche Größe Ionisierungsenergie mit ausschließlich ebenfalls messbaren Größen, der Masse und der Ladung des Elektrons, und der neuen Naturkonstanten \hbar .

Die Abb. 11 ist eine graphische Darstellung der ersten 6 Eigenfunktionen dieses quantenmechanischen Systems, bei der die (senkrecht zur Zeichenebene orientierte) z -Achse der magnetischen Quantenzahl zugeordnet ist. Die Amplitude dieser Funktionen ist in einer sog. *glue-scale*-Farbcodierung wiedergegeben: Jedes Pixel dieser Darstellung hat eine Farbcodierung erhalten, die nach Helligkeit und Farbe einer linearen Abbildung der Amplitude auf die Temperatur eines schwarzen Körpers entspricht. Kleine Amplitudenwerte werden also dunkler und röter wiedergegeben und größere heller und weißer. Diese Darstellung hat den Vorteil, dass eindringlich und für den Leser unmittelbar einsichtig der stetige und die gesamte Nahumgebung des geladenen Zentrums ausfüllende Verlauf aller dieser Eigenfunktionen des Systems "Elektron im Coulombfeld" betont wird. Insbesondere in Zusammenhang mit der chemischen Bindung ist eine etwas andere Darstellung geläufig, nämlich die räumliche Darstellung einer sog. *Isofläche* der Amplitudenfunktion: Zu ihrer Definition betrachten wir zunächst alle geschlossenen Flächen \mathcal{A} mit folgender Eigenschaft:

$$\int_{V(\mathcal{A})} |\psi(r)|^2 \cdot d^3r = c < 1 \quad (7.503)$$

Als Referenzwert c wählen wir z.B. den Wert

$$c = 0,9$$

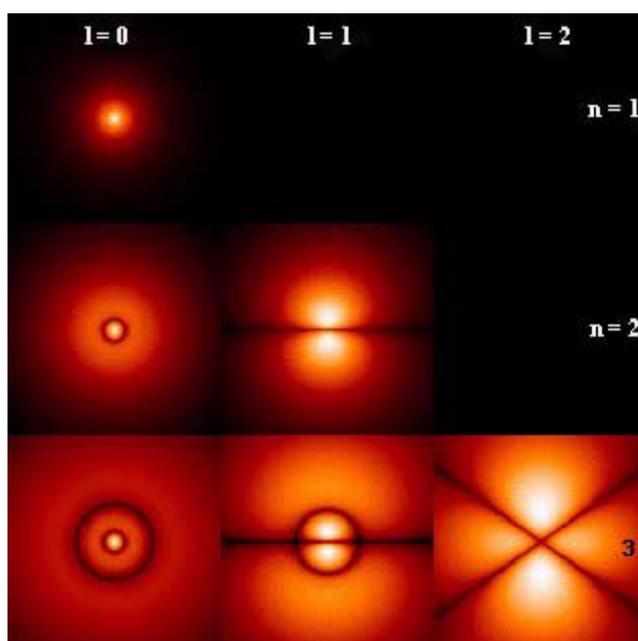


Abb. 11 Graphische Darstellung der Eigenfunktionen eines Elektrons in einem kugelsymmetrischen elektrischen Feld

(Quelle: diese Abb. basiert auf dem Bild HAtomOrbitals aus der freien Enzyklopädie Wikipedia und unterliegt der GNU-Lizenz für freie Dokumentaion Version 1.2)

Als die zum Wert c gehörende Isofläche \mathcal{I} der Wellenfunktion $\psi(r)$ bezeichnen wir nun die Fläche \mathcal{A} mit dem kleinsten Flächeninhalt, die die Bedingung 7.503 erfüllt:

$$\mathcal{A}_j = \mathcal{I}(\psi(r); c) \iff \left(\int_{V(\mathcal{A})} |\psi(r)|^2 \cdot d^3r = c \right) \wedge (|\mathcal{A}_i| \geq |\mathcal{A}_j| \forall i) \quad (7.504)$$

Die Abb. 12 zeigt für einige Eigenfunktionen eines H-Atoms die derart definierten Isoflächen. Diese Art der Darstellung hat sich insbesondere in der Chemie eingebürgert und dient hier insbesondere zur Erläuterung der verschiedenen Arten der chemischen Bindung (s. Abschnitt 7.13.2). Ein wichtiger Nachteil dieser Darstellung ist, dass die Einzelheiten der Struktur von $\psi(r)$ innerhalb des von der Isofläche eingeschlossenen Volumens vollständig unterdrückt werden.

Sobald das Wasserstoff-Atom in geeigneter Weise mit einem anderen System wechselwirkt, z.B. mit einem elektromagnetischen Strahlungsfeld (s. Abschnitt 7.13.3), sind Übergänge von einem dieser Eigenzustände in einen anderen möglich. Die Differenz der Energien dieser beiden Zustände wird dann vorzugsweise als elektromagnetische Strahlungsenergie, als *Photon* emittiert bzw. absorbiert. Diese Prozesse bilden die Grundlage der optischen Emissions- oder Absorptions-Spektroskopie, s. Abschnitt 11.11.3.

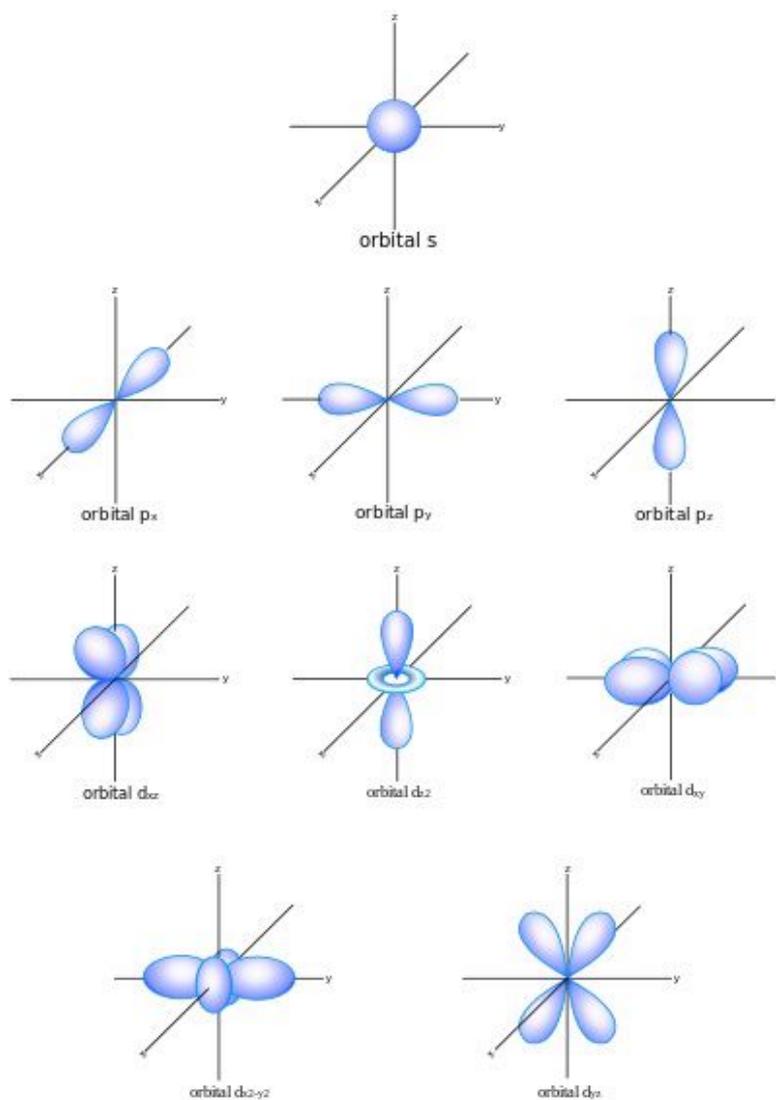


Abb. 12 Isflächen (Orbitale) eines Elektrons im zentralsymmetrischen Coulombfeld (Quelle: diese Abb. basiert auf der Graphik Chemie Orbitale aus der Wikimedia Commons und unterliegt der Lizenz CC BY-SA 3.0; der Autor ist Tim Kaluza)

Atomarer Wasserstoff erzeugt also ein diskretes, linienförmiges Emissions- oder Absorptions-Spektrum. Historisch betrachtet war daher der experimentelle Befund, dass die an geeigneten Materialien gemessenen optischen Spektren eine Linienstruktur aufweisen, ein starker Hinweis darauf, dass die Energien in den Bausteinen dieser Materialien nicht kontinuierlich, sondern **quantisiert** verteilt sind. Nun wurden aber die diskreten Absorptionslinien im Sonnenspektrum bereits 1802 durch den Chemiker und Physiker *William Hyde Wollaston* (* 1766 in East Dercham/Norfolk; † 1828 in Chislehurst/England) und 1813 durch den Physiker und Glastechniker *Josef von* (seit 1824) *Fraunhofer* (* 1787 in Straubing; † 1826 in München) entdeckt. Es muss daher aus heutiger Sicht eher überraschen, dass nicht dieses wiederum aus heutiger Sicht spektakuläre Ergebnis die Entwicklung der Quantenmechanik auslöste, sondern ein vordergründig deutlich weniger aufregendes Ergebnis aus dem Jahr 1900: die erfolgreichen Bemühungen von Planck, eine brauchbare semi-empirische Interpolationsformel für die spektrale Verteilung der thermischen Strahlung eines sog. *schwarzen Körpers* zu finden, s. Abschnitt 8.5.

Zum Abschluss dieses Abschnitts ist es nun wichtig anzumerken, dass die hier durchgeführten quantenmechanischen Berechnungen die Eigenzustände des Systems aus einem Elektron und einem zentralsymmetrischen elektrischen Feld der Polstärke $+Q_0$ vollständig und korrekt wiedergeben, **nicht** aber die des *H*-Atoms. Allerdings sind die derart berechneten Eigenzustände auch für das *H*-Atom bereits eine recht gute Näherungslösung. Wir haben jedoch eine Reihe von zusätzlichen Effekten außer Acht gelassen:

1. den Spin des Elektrons;
2. die Kopplung zwischen dem Spin und dem Drehimpuls des Elektrons, die sog. *Spin-Bahn-Kopplung*;
3. den Spin des Atomkerns und seine Kopplung mit dem Spin und dem Drehimpuls des Elektrons.

Alle diese Effekte führen (unterschiedlich deutlich) zu einer Aufhebung der Entartungen des Systems, d.h. zu einer Aufspaltung der in der Abb. 10 gezeichneten Energie-Niveaus für die jeweils unterschiedlichen Werte von l , m und s . Ich werde auf diese Effekte an anderer Stelle zurückkommen.

7.9.4 *Das elektromagnetische Strahlungsfeld (-/-)*

(XXX: Der Text des Abschnitts *Das elektromagnetische Strahlungsfeld* ist noch nicht verfügbar.)

7.9.5 *2-Zustands-Systeme (-/-)*

(XXX: Der Text des Abschnitts *2-Zustands-Systeme* ist noch nicht verfügbar.)

7.10 Der quasi-klassische Grenzfall (-/-)

(XXX: Der Text des Kapitels *Der quasi-klassische Grenzfall* ist noch nicht verfügbar.)

7.11 Verschränkte Zustände (-/-)

(XXX: Der Text des Kapitels *Verschränkte Zustände* ist noch nicht verfügbar. In diesen Text wird auch die nachfolgende Passage aufgehen:)

Häufig wird diese Eigenschaft von Experimenten mit verschränkten Zuständen als ein Hinweis interpretiert, dass in diesem Fall das Prinzip der Kausalität verletzt sei: Im Zuge einer *heimtlichen Fernwirkung* hängt das Ergebnis einer Messung an einem Ort davon ab, zu welchem Ergebnis eine an einem weit entfernten Ort durchgeführte Messung geführt hat. Ich halte diese Interpretation für voreilig in folgendem Sinne: Die klassische, d.h. nicht-relativistische Quantenmechanik enthält keinerlei Aussagen über die Mechanismen des Wirkungstransports über hinreichend große Entfernungen und kann daher bei den oben genannten Experimenten gar nicht in der Lage sein, korrekte und logisch konsistente Aussagen zu liefern. Es gilt abzuwarten, bis dieselben Experimente mit Hilfe der relativistischen Quantenmechanik interpretiert worden sind. Erst danach kann die Frage nach einer evtl. Verletzung der Kausalität erneut gestellt werden.

7.12 Quantenmechanische Störungstheorie (-)

Ebenso wie manch andere physikalische Theorie hat auch die Quantenmechanik die Eigenschaft, dass nur sehr wenige reale Problemstellungen auf analytisch lösbare Gleichungen führen. Bei konkreten Berechnungen ist man daher sehr bald darauf angewiesen, Näherungsverfahren einzusetzen. Das wichtigste dabei eingesetzte Konzept ist das des *störungstheoretischen Ansatzes*: Man trennt den Hamilton-Operator, der das reale System beschreibt (oder zumindest approximiert), auf

- in den Operator des *idealisierten Systems*, für den eine analytische Lösung existiert (oder bereits eine Näherungslösung bekannt ist), und
- in den verbleibenden Anteil, der dann als *Störung* des idealisierten Systems aufgefasst wird. Diese Störung wird dann als ausreichend klein angenommen um vorauszusetzen, dass sie die Lösungen des ungestörten Systems nicht völlig verändert, sondern dass nur eine gewisse *Korrektur* dieser Lösungen erforderlich wird.

Wie hierbei im einzelnen vorgegangen wird, werden wir im Laufe dieses Kapitels zumindest im Ansatz verstehen lernen. Die Kreativität des theoretischen Physikers bei dieser Vorgehensweise besteht insbesondere darin, das Grundsystem so zu konzipieren, dass diese Methode auch zum Erfolg führt, dass nämlich die aus

diesem Konzept resultierenden störungstheoretischen Korrekturen, die meist aus einer unendlichen Reihe von Termen bestehen, ausreichend schnell konvergieren. In vielen realen Fällen müssen hierbei dennoch unendlich viele derartige Korrektur-Terme berücksichtigt werden. Das handwerkliche Geschick besteht dann darin, diese Terme in einer Weise zu sortieren, das hieraus z.B. konvergente unendliche Reihen entstehen. Häufig bleiben aber auch Terme übrig, für die es nicht gelingt, eine handhabbare Bearbeitung zu finden. Der pragmatische Ausweg besteht dann häufig darin, sie einfach wegzulassen (*unter den Teppich zu kehren*), obwohl es meist schwierig ist, ein Argument dafür zu finden, dass man gerade diese Terme unberücksichtigt lassen darf, und dass man aber die übrigen Terme unbedingt berücksichtigen muss.

Systeme, die im ungestörten Ausgangszustand entartet sind, bedürfen einer besonderen störungstheoretischen Behandlung, s. Abschnitt 7.12.2. Die Entartung wird durch die Berücksichtigung der Störung i.a. aufgehoben.

Störungstheoretische Verfahren sind insbesondere bei der Behandlung von Vielkörperproblemen unverzichtbar, s. Kapitel 7.15.1. Hier versucht man, das Basissystem so geschickt zu wählen, dass die Zustände des realen Systems als sog. *elementare Anregungen* dieses Basissystems aufgefasst werden können, die dann in vielen Fällen eine zumindest formale Verwandtschaft zu einem freien Teilchen in einem geeignet definierten Potenzial zeigen und deshalb meist als *Quasiteilchen* bezeichnet werden.

Eine 2. wichtige Anwendung des störungstheoretischen Konzeptes ist die (schwache) Wechselwirkung eines quantenmechanischen Systems mit einem zeitabhängigen äußeren Feld. Dieses Feld verändert dann die Eigenzustände des betrachteten Systems nur geringfügig, so dass diese im wesentlichen erhalten bleiben. Die Wechselwirkung äußert sich primär darin, dass diese Zustände keine echten Eigenzustände mehr sind, sondern nur noch eine endliche Lebensdauer besitzen. Diese Lebensdauer oder, direkt damit verknüpft, die Wahrscheinlichkeit, mit der ein derartiger Zustand im Laufe eines vorgegebenen Zeitintervalls (der *Messzeit*) in einen anderen übergeht, kann man dann über einen störungstheoretischen Ansatz berechnen. Hierauf werden wir im Abschnitt 7.12.4 näher eingehen.

7.12.1 Die zeitunabhängige Störung eines nicht entarteten Systems (-)

Wir betrachten also jetzt ein physikalisches System, dessen Hamilton-Operator in die Terme

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(0)} + \lambda \cdot \mathbf{H}^{(1)} \quad ; \quad \lambda \in \mathbb{R}^1 \quad (7.505)$$

zerfällt. \mathbf{H}_0 ist der Hamilton-Operator des ungestörten Systems, seine Eigenzustände $|k^{(0)}\rangle$ und deren Eigenwerte $E_k^{(0)}$ werden als bekannt vorausgesetzt,

$$\mathbf{H}^{(0)} |k^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} \cdot |k^{(0)}\rangle \quad (7.506)$$

Unter der Abkürzung k verstehen wir wieder einen vollständigen Satz aller für dieses System geltenden Quantenzahlen. Wir können uns diesen Satz derart auf die Menge

der natürlichen Zahlen abgebildet denken, dass k letztlich eine aus dieser Menge heraus gegriffene natürliche Zahl ist. Weshalb wir zunächst zur Vereinfachung voraussetzen, dass diese Eigenzustände nicht entartet sind, wird im Verlauf dieses Abschnitts offensichtlich werden. $\mathbf{H}^{(1)}$ ist der Operator der Störung dieses Systems. Der reellwertige Vorfaktor λ ist ein einfaches mathematisches Hilfsmittel, um die im weiteren Verlauf der Rechnung auftretenden störungstheoretischen Terme nach ihrer Ordnung sortieren zu können. Trivialerweise gilt

$$\lambda = 0 \Rightarrow \mathbf{H} = \mathbf{H}^{(0)} \quad (7.507)$$

Die Eigenzustände des gestörten Systems schreiben wir in der Form $|k^{(S)}\rangle$:

$$(\mathbf{H}^{(0)} + \lambda \cdot \mathbf{H}^{(1)}) |k^{(S)}\rangle = E_k^{(S)} \cdot |k^{(S)}\rangle \quad (7.508)$$

Da die Menge aller Eigenzustände zu $\mathbf{H}^{(0)}$ eine Basis des Zustandsraums bildet, können wir auch die Eigenzustände des neuen Operators \mathbf{H} als Linearkombination der Eigenzustände des ungestörten Systems darstellen:

$$|k^{(S)}\rangle = \sum_l c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle \quad (7.509)$$

Wir setzen nun die Gl. 7.509 in die Gl. 7.508 ein und erhalten

$$\sum_l (c_{kl} \cdot (\mathbf{H}^{(0)} + \lambda \cdot \mathbf{H}^{(1)}) |l^{(0)}\rangle) = \sum_l (c_{kl} \cdot E_l^{(S)} \cdot |l^{(0)}\rangle) \quad (7.510)$$

Wir greifen nun einen beliebigen Zustand $|m^{(0)}\rangle$ des ungestörten Systems heraus und bilden von beiden Seiten der Gl. 7.510 das Skalarprodukt mit diesem Zustand:

$$\left\langle m^{(0)} \left| \sum_l (c_{kl} \cdot (\mathbf{H}^{(0)} + \lambda \cdot \mathbf{H}^{(1)}) |l^{(0)}\rangle) \right. \right\rangle = \left\langle m^{(0)} \left| \sum_l (c_{kl} \cdot E_l^{(S)} \cdot |l^{(0)}\rangle) \right. \right\rangle \quad (7.511)$$

Durch Ausnutzen der Linearitätseigenschaften des Skalarprodukts und der Operatoren folgt unmittelbar

$$c_{km} \cdot (E_k^{(S)} - E_m^{(0)}) = \lambda \cdot \sum_l c_{kl} \cdot H_{lm}^{(S)} \quad (7.512)$$

Dabei haben wir die Abkürzung

$$H_{kl}^{(S)} = \langle k | \mathbf{H}^{(1)} | l \rangle \quad (7.513)$$

verwendet. In der Gl. 7.512 sind sowohl die Entwicklungskoeffizienten c_{kl} als auch die Energie-Eigenwerte $E_k^{(S)}$ unbekannt. Ohne weitere Annahmen oder Näherungen führt sie also noch nicht zu einer Lösung. Wir lösen diese Gl. iterativ, indem wir in

der jeweils höheren Näherung die Werte der vorherigen verwenden, in 1. Näherung also die Werte des ungestörten Systems. In 0-ter Näherung gilt

$$c_{kl}^{(0)} = \delta_{kl} \quad (7.514)$$

Wir bestimmen zunächst die Veränderung der Energie-Eigenwerte und setzen hierzu $k = m$ und erhalten

$$\left(E_k^{(S,1)} - E_k^{(0)} \right) = \lambda \cdot H_{kk}^{(1)} \quad (7.515)$$

Mit dem Ausdruck $E_k^{(S,1)}$ ist der k -te Energie-Eigenwerte des gestörten Systems in 1. störungstheoretischer Näherung gemeint. Die Verschiebung der Energie-Eigenwerte ergibt sich also einfach aus dem Spur-Matrixelement des Störungs-Operators bzgl. des ungestörten k -ten Zustandes.

Zur Bestimmung der neuen Eigenzustände beschränken wir uns zunächst auf den Fall $k \neq m$, verwenden die Näherung 7.514 und ersetzen zusätzlich in der Gl. 7.512 die Energie-Eigenwerte des gestörten Systems durch die des ungestörten. Dann folgt

$$c_{km} = \frac{\lambda \cdot H_{km}^{(1)}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} ; \text{ für } k \neq m \quad (7.516)$$

An dieser Stelle wird offensichtlich, weshalb es für diese Vorgehensweise notwendig war, sich auf nicht entartete Systeme zu beschränken, da anderenfalls der Nenner in der Gl. 7.516 verschwinden kann. Den noch fehlenden Wert c_{kk} bestimmen wir aus der Normierungsbedingung

$$\langle k^{(S)} | k^{(S)} \rangle = \left\langle \sum_l c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle \mid \sum_l c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle \right\rangle = 1 \quad (7.517)$$

In analoger Weise können wir auch die Ausdrücke für die Berechnung der Energie-Eigenwerte und der Entwicklungskoeffizienten in den jeweils höheren Näherungen iterativ bestimmen.

Ein einfaches anwendungsrelevantes Beispiel eines Systems, das nach dem Konzept der zeitunabhängigen Störungstheorie bearbeitet werden kann, ist XXX. (XXX: Der dieses Beispiel beschreibende Text ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Die zeitunabhängige Störung eines nicht entarteten Systems* ist noch nicht verfügbar.)

7.12.2 Die Störungstheorie eines entarteten Systems (-)

Wir lassen also nun die Einschränkung auf (ohne die Störung) nicht entartete Systeme fallen. Dann gibt es unter den Quantenzahlen k zumindest eine Untermenge $\{m ; \dots ; (m + \nu)\}$ von insgesamt ν Elementen, die alle denselben Energie-Eigenwert besitzen:

$$E_m^{(0)} = E_{m+1}^{(0)} = \dots = E_{m+\nu}^{(0)} \quad (7.518)$$

Für ein derartiges System bleibt der im Absatz 7.12.1 anfangs durchgeführte Rechengang bis hin zur Gl. 7.512 ohne Einschränkung weiterhin gültig. Die Berechnung der Energie-Eigenwerte des gestörten Systems gem. Gl. 7.515 sowie die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten c_{km} der neuen Eigenzustände gem. Gl. 7.516 müssen wir jedoch zusätzlich auf die (auch ohne Störung) nicht entarteten Zustände ($k \notin \{m; \dots; (m+v)\}$) einschränken.

Wir beschränken also nun die weitere Diskussion auf die (ohne Störung) entarteten Eigenzustände ($k \in \{m; \dots; (m+v)\}$). Wir wissen bereits (s. Abschnitt 7.4.9), dass diese ν Zustände die Basis eines Untervektorraums (UVR) innerhalb des Zustandsraums des Systems bilden. Wir können daher die Zustände $|k^{(S)}\rangle$, die aus den Zuständen $|k^{(0)}\rangle$ dieses UVRs durch die Störung entstehen, ebenfalls als Linearkombination (ausschließlich) dieser Basis des UVRs darstellen:

$$|k^{(S)}\rangle = \sum_{l=m}^{m+\nu} c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle \quad ; \quad k \in \{m; \dots; (m+v)\} \quad (7.519)$$

Für diesen Zustand gilt daher

$$(\mathbf{H}^{(0)} + \lambda \cdot \mathbf{H}^{(1)}) \cdot \sum_{l=m}^{m+\nu} c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle = E_k^{(S)} \cdot \sum_{l=m}^{m+\nu} c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle \quad (7.520)$$

Durch einige einfache Umformungen erhält diese Gl. die Form

$$\left(E_k^{(S)} - E_m^{(0)} \right) \cdot \sum_{l=m}^{m+\nu} c_{kl} \cdot |l^{(0)}\rangle = |0\rangle \quad (7.521)$$

$E_m^{(0)}$ ist der (gemeinsame) Energie-Eigenwert aller ν entarteten Zustände des ungestörten Systems. Diese Gl. 7.521 gilt für alle $k \in \{m; \dots; (m+v)\}$. Es handelt sich also um ein lineares Gleichungssystem von ν Gleichungen für die ν^2 Unbekannten c_{kl} . Diese schreiben wir als die Matrixgleichung (XXX: Schreibweise überdenken)

$$\left(\left(E_m^{(S)}; E_{m+1}^{(S)}; \dots; E_{m+\nu}^{(S)} \right) - E_m^{(0)} \cdot \delta_{km} \right) \circ \widetilde{c}_{kl} = |0\rangle \quad (7.522)$$

(XXX: Text überarbeiten, ist so wohl noch nicht richtig)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Die Störungstheorie eines entarteten Systems* ist noch nicht verfügbar.)

7.12.3 Die Theorie zeitabhängiger Störungen (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Die zeitabhängige Störungstheorie* ist noch nicht verfügbar.)

7.12.4 Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten* ist noch nicht verfügbar.)

7.12.5 Streuprozesse (-)

Wir beginnen diesen Abschnitt mit der phänomenologischen Beschreibung eines *Streuprozesses* (s. hierzu auch Abschnitt 11.2.2). Der typische experimentelle Aufbau für kernphysikalische Streuprozesse entspricht weitgehend der Anordnung, die auch Rutherford bei seinem Streuexperiment mit α -Teilchen benutzte, s. Abschnitt 7.17.1 und Abb. 18: Von einer Strahlungsquelle Q wird die Messstrahlung auf die in der Atom- und Kernphysik meist als *Target* bezeichnete Probe T gelenkt. An geeigneter Stelle hinter der Probe und in Fortsetzung der Richtung des Messstrahls wird mit einem Detektor D der von der Probe unverändert hindurch gelassene Anteil der Messstrahlung gemessen. Ergänzend oder alternativ dazu ist ein Detektor in einer bestimmten Winkelposition zur Richtung der eintreffenden Messstrahlung auf einem Kreisbogen um das Zentrum der Probe positioniert. Dieser Detektor misst dann den in diese Richtung abgelenkten Anteil der Messstrahlung.

Wir betrachten den von der Probe hindurch gelassenen Anteil der Messstrahlung. Alle Strahlungsströme charakterisieren wir durch ihre Teilchenströme $J^{(N_i)}$ (der Dimension $\frac{\text{Teilchen}}{\text{Zeit}}$). Solange die am Ort x ablaufenden Schwächungsprozesse nicht durch die davor abgelaufenen Prozesse beeinflusst werden, ergibt sich die Schwächung des am Ort x noch vorhandenen Stroms $J^{(N)}(x)$ durch die nachfolgende infinitesimale Schicht dx gemäß

$$dJ^{(N)}(x) = \kappa \cdot J^{(N)}(x) \cdot dx \Rightarrow \quad (7.523)$$

$$J^{(N)}(x) = J_0^{(N)} \cdot e^{-\kappa \cdot x} \quad (7.524)$$

Die Größe κ der Dimension $(\text{Länge})^{-1}$ bezeichnen wir als den *Schwächungskoeffizienten* dieses Streuprozesses. Er ist eine diesen Prozess charakterisierende Kenngröße und sowohl von den Eigenschaften der Messstrahlung als auch der Probe abhängig. Insbesondere in der Kernphysik ist es nun üblich, den Schwächungskoeffizienten als Produkt aus der Teilchendichte der Probe und einer neuen Kenngröße des betrachteten Streuprozesses darzustellen:

$$\kappa = \sigma \cdot n_T \quad (7.525)$$

Dahinter verbirgt sich die Erfahrung, dass für kernphysikalische Streuprozesse die überatomare Struktur der Probe (fest/flüssig etc.) von untergeordneter Bedeutung ist, und dass sich bei Mischungen bzw. chemischen Verbindungen aus verschiedenen Elementen die Streuwirkungen additiv überlagern. Diese neue elementspezifische Kenngröße σ der Dimension $\frac{(\text{Länge})^2}{\text{Teilchen}}$ wird üblicherweise als *Streuquerschnitt* bezeichnet. Eine in diesem Gebiet häufig genutzte Einheit für den Wirkungsquerschnitt ist

$$1 \cdot b = 1 \cdot 10^{-28} \cdot \frac{m^2}{\text{Teilchen}} \quad (7.526)$$

Diese (in den SI-Vereinbarungen nicht aufgeführte) Einheit *barn* wurde so gewählt, dass sie in etwa der Projektionsfläche eines Atomkerns hoher Ordnungszahl entspricht.

Der Leser findet im Kapitel 7.20 die Zahlenwerte für den Wirkungsquerschnitt einiger typischer kernphysikalischer Prozesse.

Wir haben diese fundamentale Messgröße *Streuquerschnitt* an Hand eines Streuprozesses eingeführt, eines Prozesses also, bei dem durch die Wechselwirkung der die Messstrahlung bildenden Teilchen (*a*) mit den das Probenmaterial bildenden Teilchen (*b*) die *a*-Teilchen nicht etwa vernichtet werden, sondern lediglich in eine veränderte Richtung abgelenkt. Wir können nun dieses Konstrukt ohne formale Änderung auch auf irgend einen anderen Wechselwirkungsprozess übertragen, also insbesondere

- auf die meist als *Einfang* bezeichnete Absorption eines *a*-Teilchens durch ein *b*-Teilchen;
- auf die inelastische Streuung eines *a*-Teilchens durch ein *b*-Teilchen, bei der sich außer der Richtung auch die Energie des *a*-Teilchens verändert;
- auf die Spaltung eines *b*-Teilchens infolge des Beschusses mit einem *a*-Teilchen. Wird das *b*-Teilchen hierbei in mehrere Teilchen zertrümmert, bezeichnet man diesen Vorgang oft auch als *Spallation*.

Man spricht in diesen Fällen dann oft nicht mehr von dem Streuquerschnitt dieses Prozesses, sondern z.B. von dem Einfangquerschnitt oder - weniger spezifisch - von dem *Wirkungsquerschnitt* des betrachteten Prozesses.

In vielen Lehrbüchern wird diese Messgröße *Streuquerschnitt* an Hand eines anschaulichen, klassischen Analogons eingeführt und diskutiert, nämlich des Beschusses eines makroskopischen Objektes mit einem parallel strömenden Strahl aus kleinen Partikeln. Dieser Partikelstrahl nehme die Querschnittsfläche A_1 ein. Die in die Ausbreitungsrichtung dieses Strahls projizierte Oberfläche eines einzelnen Partikels sei A_2 , die in der Strahlrichtung gemessene Ausdehnung der Probe sei l . Wir setzen nun voraus, dass

- alle auf ein Partikel auftreffenden Kugeln durch den Aufprallprozess aus dem parallelen Strahl entfernt werden, und dass
- die (volumenbezogene) Dichte $n^{(V)}$ dieser Partikel in Relation zur Probendicke l derart klein ist, dass die gegenseitige Abschattung der Partikel vernachlässigbar ist.

Dann beträgt die in eine Fläche projizierte und auf diese Fläche bezogene Dichte der Partikel

$$n^{(A)} = n^{(V)} \cdot l \quad (7.527)$$

und die relative Abschwächung des Partikelstroms

$$\frac{\Delta J^{(N)}}{J^{(N)}} = n^{(A)} \cdot \frac{A_2}{A_1} = n^{(V)} \cdot l \cdot \frac{A_2}{A_1} \quad (7.528)$$

Vergleichen wir diese Gl. 7.528 mit der Struktur der Gl. 7.523,

(XXX: Der weitere Text zu dieser Analogiebetrachtung ist noch nicht verfügbar.)

Ich halte eine derartige Überbetonung dieses Zusammenhangs zwischen dem über die Gl. 7.525 wohl definierten und für die experimentelle Kern- und Elementarteilchen-Physik zentralen Begriff des *Wirkungsquerschnitts* einerseits und dem im Bereich der makroskopischen klassischen Physik konstruierbaren Analogon aus didaktischer Sicht für bedenklich. Hierdurch kann man schnell dazu verleitet werden, einen in Bezug auf einen ganz bestimmten Prozess gemessenen Wirkungsquerschnitt wirklich für so etwas wie die geometrische Ausdehnung des reagierenden Teilchens anzusehen. Richtig ist dagegen, dass diese Messgröße immer streng mit dem ausgewählten Prozess verknüpft ist, und dass dasselbe Teilchen bzgl. unterschiedlich ausgewählter Prozesse ganz unterschiedliche Wirkungsquerschnitte haben kann.

(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Abschnitts *Streuprozesse* ist noch nicht verfügbar.)

7.13 Anwendungen der Störungstheorie (-/-)

(XXX: Der Kopftext des Kapitels *Anwendungen der Störungstheorie* ist noch nicht verfügbar.) (XXX: hier weitermachen)

7.13.1 Das Elektronensystem der Atome (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Das Elektronensystem der Atome* ist noch nicht verfügbar. Er wird auch die nachfolgende Textpassage enthalten:)

Im Ergebnis all dieser Rechnungen zeigt sich, dass auch bis zu den Atomen mit den höchsten bisher beobachteten Ordnungszahlen z das Ordnungsschema der Eigenzustände des Elektrons im Wasserstoffatom erhalten bleibt in dem Sinne, dass jedem Elektron ein Satz von Quantenzahlen (n, l, m, s) zugeordnet werden. Die Energie dieses z -Elektronensystems im Grundzustand und in seinen angeregten Zuständen lässt sich allerdings nicht mehr auf einfache Weise berechnen.

7.13.2 Quantenmechanik der chemischen Bindung (-)

Im Abschnitt 7.13.1 haben wir die Frage behandelt, in welcher Weise sich die Elektronen in einem System anordnen, das aus einem mit z positiven elektrischen Einheitsladungen belegten Zentrum (dem Kern) und einer Wolke von ebenfalls z Elektronen besteht. Jedes einzelne Atom ist ein derartiges System. Nun werden wir den Fall eines Systems diskutieren, das aus 2 oder mehreren derartigen Atomen besteht. Wir müssen erwarten, dass bei 2 Atomen, deren Kerne sich bis auf einen Abstand

$$r < \frac{D}{2}$$

einander nähern, sich die Struktur dieser Elektronenwolken verändert. Für jeden vorgegebenen Abstand r der Atomkerne, oder genauer für jede vorgegebene räumliche

Anordnung der beiden Atomkerne relativ zu einander hat die Elektronenwolke im Grundzustand des Systems eine bestimmte wohl definierte Struktur. Diese hängt von dieser räumlichen Anordnung ab und damit auch die Energie dieses Grundzustands. Wir interessieren uns nun für diejenige räumliche Anordnung der beiden Atome, die zu dem kleinsten Wert dieser Energie führt und unterscheiden hierbei 2 Fälle:

1. Die Energie des Systems wird minimal, wenn die beiden Atome beliebig weit von einander entfernt sind. Ein Beispiel für ein derartiges Verhalten sind die Edelgase mit niedriger Ordnungszahl.
2. Die Energie des Systems wird bei einer bestimmten räumlichen Konfiguration minimal, bei der die beiden Atomkerne einen endlichen Abstand von einander haben. Den Übergang des Systems in diesen Zustand nennen wir eine chemische Bindung.

(XXX: Der weitere Kopftext des Abschnitts *Quantenmechanik der chemischen Bindung* ist noch nicht verfügbar.)

Nomenklaturen zur Kennzeichnung von Molekülen (-)

Sobald man verstanden hatte, dass alle *Moleküle* aus einer jeweils ganzzahligen Anzahl von *Atomen* aufgebaut sind, von denen es überdies nur eine eng begrenzte Anzahl von unterschiedlichen Sorten gibt (nämlich die natürlich vorkommenden 92 *Elemente*, s. Abschnitt 7.17.1), war die einfachste Art der Kennzeichnung von Molekülen offensichtlich. In dieser *Summenformel* gibt man einfach die Atomanzahl eines jeden Elementes an, das in dem betrachteten Molekül als Baustein enthalten ist,

$$A_a B_b C_c \dots \quad (7.529)$$

Ich nenne einige aus dem täglichen Leben geläufige Beispiele



Die Summenformel enthält außer der Angabe der summarischen Zusammensetzung des Moleküls keinerlei Information über die räumliche Anordnung der Bausteine, die das Molekül bilden. Ein deutlich verbesserte Information über die reale räumliche Struktur des Moleküls, also die relative räumliche Anordnung der Atombausteine, erhält man durch die sog. *Strukturformel*. Bereits in ihrer einfachsten Version gibt sie sämtliche Nächste-Nachbarn-Beziehungen korrekt wieder. Die o.a. Molekül-Beispiele haben die Strukturformeln

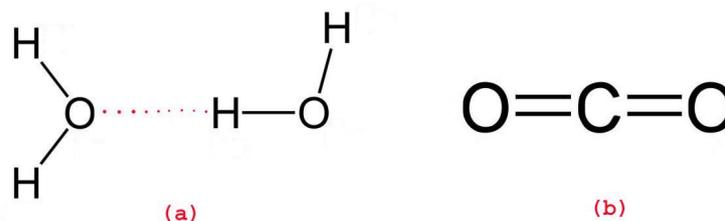


Abb. 13 Einfache Beispiele für Strukturformeln von Molekülen
(a) Wasser (b) Kohlenstoffdioxid

Beide in dieser Abb. wiedergegebenen Moleküle sind in guter Näherung in einer Ebene angeordnet, so dass ihre Strukturformel die reale Anordnung der Atome innerhalb des Moleküls einigermaßen wirklichkeitsgetreu wiedergibt. Die punktierte Linie zwischen den beiden Wasser-Molekülen in der Abb. 13 (a) kennzeichnet die sog. *Wasserstoffbrücken-Bindung*, die wir im Absatz S. 756 behandeln werden.

Diese Art der Darstellung stößt an ihre Grenzen, wenn das Molekül signifikant von der Näherung eines planaren Objektes abweicht, und wenn diese Verbiegungen in die 3. Dimension zumindest grob angedeutet werden sollen, z.B. weil sie für das betrachtete Verhalten von entscheidender Bedeutung ist. Man hilft sich mit zusätzlichen Symbolen, die die einfachen Bindungsstriche ersetzen.

(XXX: Der dieses Konzept erläuternde Text ist noch nicht verfügbar.)

Zur verbalen, aber dennoch eindeutigen Beschreibung eines Moleküls existiert eine international festgelegte Nomenklatur (s. [38] sowie dessen Fortsetzungen)(XXX: Referenz nennen). Sie verwendet primär die Erkenntnis, dass Moleküle, die aus einer größeren Anzahl von Atomen aufgebaut sind, immer eine Reihe von *Bausteinen* enthalten, die ihrerseits auch in vielen anderen Molekülen vorkommen. Ich nenne einige typische Beispiele:



Man versucht nun, die reale Struktur des betrachteten Moleküls aus einer möglichst kleinen Anzahl derartiger Bausteine zusammen zu setzen und berücksichtigt dabei nach Möglichkeit bereits auch die räumliche Anordnung dieser Bausteine. Nun greift man - mit einer gewissen Willkür - einen dieser Bausteine heraus und deutet ihn als den Kern oder das Skelett des Moleküls, an das die übrigen Bausteine *angebunden* sind, entweder unmittelbar oder als eine Untereinheit von mehreren Bausteinen, die bereits untereinander verbunden sind und dann über einen dieser Bausteine an den Kernbaustein gebunden sind. Bei der verbalen Beschreibung dieses Moleküls kann nun auch noch für alle Bindungen (oder zumindest für die wichtigsten) die Position des Atoms angegeben werden, das diese Bindung herstellt.

Ich werde an dieser Stelle nicht versuchen, diese Nomenklatur in ihrer vollen Allgemeinheit und Vollständigkeit auch nur anzudeuten, sondern beschränke mich darauf, durch einige einfache, aber typische Beispiele die innere Logik dieses Verfahrens zu erläutern.

(XXX: Der weitere Text des Unterabsatzes *Nomenklaturen zur Kennzeichnung von Molekülen* ist noch nicht verfügbar.)

Das störungstheoretische Berechnungskonzept (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Das störungstheoretische Berechnungskonzept* ist noch nicht verfügbar.)

Das Wasserstoffmolekül / die kovalente Bindung (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Das Wasserstoffmolekül* ist noch nicht verfügbar.)

Die Ionenbindung (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Die Ionenbindung* ist noch nicht verfügbar.)

Das Konzept der Molekül-Orbitale (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Das Konzept der Molekül-Orbitale* ist noch nicht verfügbar.)

Die aromatische Molekülbindung (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Die aromatische Bindung* ist noch nicht verfügbar.)

Die Wasserstoffbrücken-Bindung (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Die Wasserstoffbrücken-Bindung* ist noch nicht verfügbar. In ihm wird auch die nachfolgende Abb. 14 und deren Erläuterung aufgehen:).

Angeregte Molekülzustände (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Angeregte Molekülzustände* ist noch nicht verfügbar.)

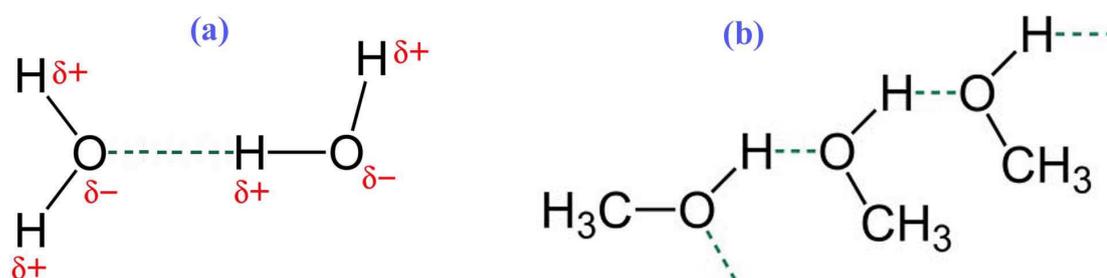


Abb. 14 Strukturformel mit Markierung der Wasserstoffbrückenbindung
(a) für Wasser (b) für Methanol

Die Zeitkonstanten chemischer Umwandlungen (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Die Zeitkonstanten chemischer Umwandlungen* ist noch nicht verfügbar.)

Historische Entwicklung der Theorie der chemischen Bindung (-/-)

(XXX: Der Text des Unterabsatzes *Historische Entwicklung der Theorie der chemischen Bindung* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Quantenmechanik der chemischen Bindung* ist noch nicht verfügbar. Er wird auch die nachfolgende Abb. 15 und deren erläuternden Text enthalten:)

7.13.3 Strahlungs-Emission und -Absorption (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Strahlungs-Emission und -Absorption* ist noch nicht verfügbar.)

7.13.4 Der Raman-Effekt (-)

phänomenologisch betrachtet ist der Raman-Effekt die inelastische Streuung von Licht an Materie: Monochromatische elektromagnetische Strahlung wird auf einen Molekülverband gelenkt und von diesem (teilweise) gestreut, d.h. in seiner Ausbreitungsrichtung verändert. Der überwiegende Anteil des gestreuten Lichtes hat dieselbe Wellenlänge wie das einfallende Licht. Diesen Effekt der **elastischen** Streuung bezeichnet man als Rayleigh-Streuung, s. Abschnitt 11.2.2. Ein im Vergleich zu diesem Streueffekt sehr geringer Anteil des einfallenden Lichtes erleidet bei dem Streuprozess auch eine Veränderung seiner Wellenlänge hin zu größeren Wellenlängen. Diese **inelastische** Streuung bezeichnet man heute als *Raman-Streuung*, benannt nach ihrem Entdecker, dem indischen Physiker *Chandrasekhar Venkata Raman* (* 1888 in Trichinopoli/Indien; † 1970 in Bangalore). Raman erhielt für diese 1928 gemachte Entdeckung (s. [29]) 1930 den Nobelpreis für Physik. Im Bild der Quantenfeldtheorie (s. Kapitel 7.14 entspricht dieser Prozess der Anregung des streuenden

Moleküls, das sich vor diesem Prozess im Grundzustand befindet, in einen virtuellen (Zwischen-)Zustand, der dann sofort wieder in einen Eigenzustand des Moleküls und ein Photon zerfällt. Ist dieser Eigenzustand mit dem Grundzustand des Moleküls identisch, so handelt es sich insgesamt um einen Vorgang der elastischen Streuung. Findet der Übergang dagegen (zunächst) in einen angeregten Zustand des Moleküls statt, hat eine inelastische Streuung stattgefunden, eben eine Raman-Streuung. Die Differenz zwischen den Energien des einfallenden und des austretenden Photons ist dann gleich der Anregungsenergie des angeregten Molekül-Zustands,

$$E_{\text{anger. Zust.}} - E_0 = h \cdot (f_{\text{ein}} - f_{\text{aus}}) \quad (7.533)$$

Wir berechnen nun die Übergangswahrscheinlichkeit für diesen Prozess und verwenden hierzu den im Abschnitt 7.12.4 entwickelten störungstheoretischen Ansatz.

(XXX: Der diese Berechnung beschreibende Text ist noch nicht verfügbar. Danach folgt:)

Diese Beziehung für die Änderung der Raman-Intensität mit der Wellenlänge der benutzten Strahlung findet man in nahezu jedem den Raman-Effekt behandelnden Lehrbuch. Überraschenderweise fehlt jedoch in den meisten Fällen der ergänzende Hinweis, dass diese (λ^{-4})-Abhängigkeit nur in den seltensten Fällen auch der experimentellen Erfahrung entspricht! Geht man z.B. bei der Raman-spektroskopischen Untersuchung einer typischen organischen Probe (z.B. eines Polymers) von einer Anregung im Bereich des sichtbaren Spektrums, z.B. bei $532 \cdot nm$ zu einer Anregung im Spektralbereich des nahen Infrarot über, z.B. bei $1024 \cdot nm$, so verringert sich die Intensität der detektierten Raman-Spektrum nicht etwa um den Faktor

$$\left(\frac{532}{1024} \right)^{-4} \approx 8 \quad (7.534)$$

sondern wesentlich stärker. Typische Messwerte für das (Bestrahlungsintensität-bereinigte) Verhältnis der Messsignale bei diesen beiden Anregungs-Wellenlängen liegen in der Größenordnung von 50. Ich gehe davon aus, dass dies mit der endlichen spektralen Nähe der Anregungswellenlänge zu einer (z.B. elektronischen) Absorptionsslinie des untersuchten Materials zusammenhängt. Schließlich ist bekannt, dass die Raman-Streuung um den Faktor $10^2 \dots 10^3$ ansteigt, wenn die Anregungs-Wellenlänge mit einer elektronischen Absorptionsslinie exakt übereinstimmt.

(XXX: Der diesen Effekt erläuternde und quantitativ abschätzende Text ist noch nicht verfügbar.)

Aus der Sicht des jeweils vorliegenden physikalischen Vorgangs eng verwandt mit der Raman-Streuung ist

- die inelastische Streuung von Licht an (akustischen) Phononen; dieser Effekt wird i.a. als *Brillouin-Streuung* bezeichnet, benannt nach dem französischen Physiker *Léon Brillouin* (* 1889 in Sèvres, Dép. Seine-et-Oise (Frankreich); † 1969 in New York);

- die inelastische Streuung von energiereicher elektromagnetischer Strahlung an freien (oder quasifreien) Elektronen; dieser Effekt wird als *Compton-Effekt* bezeichnet, benannt nach dem amerikanischen Physiker *Arthur Holly Compton* (* 1892 in Wooster/Ohio (USA); † 1962 in Berkeley/Cal.).

7.13.5 *Magnetische Resonanz (-/-)*

(XXX: Der Text des Abschnitts *Magnetische Resonanz* ist noch nicht verfügbar. In ihm wird auch die nachfolgende Abb. und der sie erläuternde Text aufgehen:)



Abb. 16 Kernspinresonanz-Aufnahme eines menschlichen Kopfes;
(Quelle: diese Abb. basiert auf dem Bild MRI_head_side aus der freien Enzyklopädie Wikipedia und unterliegt der GNU-Lizenz für freie Dokumentation Version 1.2 oder höher)

7.13.6 *Mehrphotonen-Prozesse (-/-)*

(XXX: Der Text des Abschnitts *Mehrphotonen-Prozesse* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Anwendungen der Störungstheorie* ist noch nicht verfügbar.)

7.14 *Quantenfeldtheorie (-/-)*

(XXX: Der Kopftext des Kapitels *Quantenfeldtheorie* ist noch nicht verfügbar.)

7.14.1 Quantenelektrodynamik (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Quantenelektrodynamik* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Quantenfeldtheorie* ist noch nicht verfügbar. In ihm wird auch der nachfolgende Text aufgehen:)

Die Struktur der aus dem Formalismus der Quantenfeldtheorie resultierenden Eichbosonen oder Austauscheteilchen ergibt sich aus der Struktur der Feldgleichungen, die die jeweilige Wechselwirkung beschreiben. Im Fall der elektromagnetischen Feldgleichungen erhält man das masselose Photon. Die Feldgleichungen der Quantenchromodynamik (s. Absatz S. 1166) führen auf insgesamt 8 verschiedene Eichbosonen, die den Namen *Gluonen* erhalten haben. Die Feldgleichungen der sog. schwachen Wechselwirkung haben eine besonders geringe Reichweite. Daher sind ihre Eichbosonen nicht mehr masselos. Diese Feldgleichungen führen zu insgesamt 3 verschiedenen sog. Vektorbosonen, Teilchen also mit dem Spin 1, die als W^{+-} , W^{-} und Z^0 -Boson bezeichnet werden. Ihre Ruhemasse ist von der Größenordnung

$$M_0 \approx 80 \cdot M_p$$

7.15 Makroskopische quantenmechanische Systeme (-)

In diesem Kapitel werden wir physikalische Systeme behandeln, die einerseits

- *makroskopisch* sind, also aus einer Anzahl N von *Bausteinen* (Atomen, Molekülen) aufgebaut sind, wobei sich die Zahl N in der Größenordnung von 10^{23} bewegt; die aber andererseits
- ein physikalisches Verhalten zeigen, das geprägt ist von Effekten, die nur im Rahmen der Quantenmechanik verständlich gemacht werden können.

Ich war an dieser Stelle also erneut mit einem ernsthaften Problem der sinnvollen Gliederung des Lehrbuch-Textes konfrontiert: Da es um das Verhalten makroskopischer Systemen geht, kann ich bei deren Beschreibung auf die Verwendung von thermodynamischen Begriffen und Gesetzen nicht verzichten. Andererseits bietet gerade die Behandlung dieser von mir als *makroskopische quantenmechanische Systeme* bezeichneten Objekte die Möglichkeit, einige fundamentale Gesetzmäßigkeiten der Quantenmechanik zu vertiefen und aus einer etwas anderen Perspektive zu beleuchten. Ich habe ich mich daher dazu entschlossen, diese Systeme bereits im Rahmen des Heftes *Quantenmechanik* zu behandeln, also noch **vor** der *Thermodynamik* (Heft 8). Ich bin dadurch des öfteren gezwungen, bereits eine Reihe von thermodynamischen Begriffen und Gesetzen zu verwenden, obwohl ich diese erst im Heft 8 einführen werde. Hierbei werde ich erneut auf jeden vorab angebotenen Erklärungsversuch für diese Begriffe verzichten und bitte den Leser hierfür um Nachsicht und um etwas Geduld.

Aus ähnlichen Gründen findet der Leser z.B. die Beschreibung der makroskopischen elektrostatischen Eigenschaften der Materie bereits im Heft Elektrostatik und die Beschreibung der makroskopischen magnetostatischen Eigenschaften der Materie bereits im Heft Magnetostatik, also ebenfalls vor der Thermodynamik.

7.15.1 Elementare Anregungen / Quantenkondensation (-)

Wir beginnen die Diskussion mit der Vorwegnahme einer der Kernaussagen der Thermodynamik, des sog. 3. Hauptsatzes der Thermodynamik (Abschnitt 8.4.3). Er stellt sicher, dass auch ein makroskopisches Objekt, z.B. ein Festkörper bei der Temperatur $T = 0$ in **genau einem** quantenmechanischen Zustand, dem *Grundzustand* des Systems vorliegt. Dieser ist der Zustand minimaler Energie, deren Wert wir im Folgenden mit E_0 bezeichnen wollen. Aus den Grundaussagen der Quantenmechanik folgt dann, dass für diesen Zustand genau **eine** Wellenfunktion existiert, die diesen Zustand eindeutig beschreibt. Wir entziehen uns an dieser Stelle jedoch der Schwierigkeit, diese (evtl. äußerst komplexe) Funktion aufzuspüren, und beschränken uns darauf, die **Abweichungen** des Systems von diesem Grundzustand zu betrachten. Alle Koordinaten (Variablen), die wir im Folgenden verwenden werden, sind also keine Koordinaten, die sich auf die Konfiguration dieses Grundzustands beziehen, sondern solche, die den **Unterschied** zwischen einem **anderen** quantenmechanischen Zustand (einem sog. *angeregten* Zustand mit zwangsweise höherer Energie) und diesem Grundzustand beschreiben. Dabei beschränken wir uns auf solche Zustände $|i\rangle$, deren Energie E_i nicht allzu weit oberhalb der Energie des Grundzustands liegen,

$$E_i \gtrsim E_0 \quad (7.535)$$

Für diese Zustände

$$\{|i\rangle : E_i \gtrsim E_0\}$$

suchen wir sodann eine Basis, mit deren Hilfe wir einen beliebigen Zustand aus dieser durch die Ungl. 7.535 eingegrenzten Menge von Zuständen darstellen können. Zusätzlich fordern wir, dass alle diese Basisvektoren $|b_i\rangle$ Eigenzustände des Hamilton-Operators sind,

$$\mathbf{H}|b_i\rangle = E_i \cdot |b_i\rangle \quad \forall i$$

Diese Basisvektoren nennen wir dann die *Elementaranregungen* oder auch die *Quasiteilchen* des physikalischen Systems. Jedes dieser Quasiteilchen hat eine bestimmte Energie und bestimmte Werte weiterer physikalischer Variablen, deren genaue Definition und Eigenschaften wir noch heraus finden müssen. Diese Variablen werden jedoch nicht mehr einem *einzelnen* der Bausteine zugeordnet sein, aus denen der makroskopische Körper aufgebaut ist, also einem einzelnen Atom oder Molekül oder einem einzelnen der von diesen Atomen oder Molekülen in den Körper eingebrachten Elektronen. Wie wir bereits im Abschnitt 7.2.7 gelernt haben, geht diese Individualität ja bei einem quantenmechanischen System aus identischen Teilchen i.a. vollständig verloren. Wir werden also insbesondere für die nur schwach gegenüber dem

Grundzustand angeregten Zustände Variablen erwarten, die die **Gesamtheit** aller Teilchen kollektiv beschreiben. Eine dieser Variablen wird Eigenschaften haben, die sehr eng verwandt sind mit dem Impuls eines (isolierten) mechanischen Teilchens (s. Abschnitt 7.9.1). Deshalb werden wir diese Variable auch als *Quasi-Impuls* oder einfach als *Impuls* bezeichnen.

Sofern der aktuelle Zustand des makroskopischen Körpers aus einer Überlagerung mehrerer derartiger Elementaranregungen oder Quasiteilchen besteht, ist die entscheidende Frage, ob diese Quasiteilchen kohärent oder inkohärent erzeugt worden sind. Sind sie durch unterschiedliche z.B. jeweils thermisch angeregte Einzelprozesse entstanden, dann sind sie in jedem Fall inkohärent, d.h. sie haben keinerlei feste Phasenbeziehung zu einander. Dann aber überlagern sie sich einfach in ihren Intensitäten, d.h. es besteht keinerlei gegenseitige Beeinflussung zwischen diesen Quasiteilchen, sie sind unter einander **wechselwirkungsfrei!** Eine Menge von wechselwirkungsfreien Teilchen bezeichnet man aber als ein *ideales Gas*. Wir benötigen also nur noch den Energie/Impuls-Zusammenhang $e = e(P)$ dieser Quasiteilchen, um die thermodynamischen Gibbs-Funktionen des Körpers berechnen zu können (s. Abschnitt 8.4.7) und damit z.B. seine spezifische Wärmekapazität (bei genügen tiefen Temperaturen!, s.o.).

Von diesem an dieser Stelle vorweggenommenen Konzept der elementaren Anregungen in makroskopischen Festkörpern werden wir insbesondere im Heft 9 (*Kristallphysik*) noch intensiv Gebrauch machen. In dem aktuellen Kapitel konzentrieren wir jedoch unsere Aufmerksamkeit auf die Gesetzmäßigkeiten, denen das System im **Grundzustand** gehorcht. Gelegentlich interessiert uns auch der schwach angeregte Zustand.

7.15.2 Das Bose-Einstein-Kondensat (-)

Wir setzen nun die im Kapitel 7.8.3 begonnene Diskussion des Grundzustands eines Systems aus N wechselwirkungsfreien Bose-Teilchen fort und erinnern uns daran, dass dieser Zustand durch Angabe der Zahl N (und der übrigen makroskopischen Variablen, z.B. des Volumens V) bereits eindeutig festliegt, und dass es sich um **einen einzigen stationären quantenmechanischen Zustand** handelt. Dann gilt für ihn insbesondere auch, dass er sich in der Schrödinger-Darstellung in Form einer Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i(\frac{E}{\hbar} \cdot t + \varphi_0)} \quad (7.536)$$

darstellen lässt. Die Funktion $\psi(\vec{r})$ hat im gesamten von dem System eingenommenen (bzw. ihm zur Verfügung gestellten) Volumen V einen wohl definierten Wert. Der Wert

$$\lim_{\delta V_i \rightarrow 0; \vec{r} \in V_i} \left(\frac{\delta N_i}{\delta V_i} \right) = \langle n(\vec{r}) \rangle = \sqrt{\psi^*(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r})} \quad (7.537)$$

gibt die volumenbezogene Teilchendichte (s. Unterabschnitt S. 180) an, die bei einer Ortsmessung im Mittel an der Stelle \vec{r} gemessen wird. Die in der Gl. 7.536 im

Exponenten auftretende Phase φ_0 ist i.a. ohne physikalische Relevanz, da sie ortsunabhängig ist und daher bei allen konkreten Berechnungen herausfällt. Wie wir jedoch bald sehen werden, ist sie in besonderen Fällen dennoch von entscheidender Relevanz für einige Effekte, die nur bei makroskopischen quantenmechanischen Systemen auftreten.

(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Abschnitts *Das Bose-Einstein-Kondensat* ist noch nicht verfügbar.)

7.15.3 Die Supraleitung (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Die Supraleitung* ist noch nicht verfügbar. In ihm wird auch die nachfolgende Abb. 17 und ihr erläuternder Text integriert sein:)

Der experimentelle Nachweis, dass sich diese regelmäßige Anordnung von magnetischen Flussschläuchen in einer Probe aus einem TypII-Supraleiter in der Tat bildet, sobald diese in ein äußeres Magnetfeld geeigneter Stärke gebracht wird, gelang erstmals 1967 Dr. Uwe Essmann (* 1931) und Dr. Herrmann Träuble am Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart durch Abbildung dieser Struktur in einem Elektronenmikroskop über eine Abdruck-Präparationstechnik mit Hilfe von ferromagnetischen Nanopartikeln, s. Abb. 17 und [25]. Als supraleitendes Material verwendeten sie eine Legierung aus Blei und 4 · Atom-% Indium .

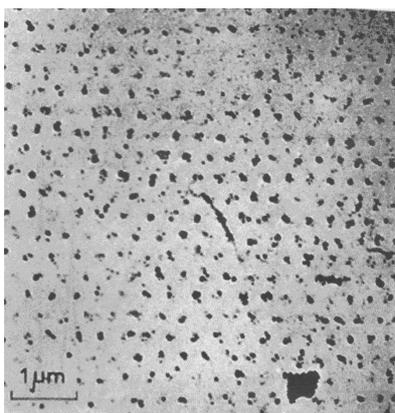


Abb. 17 Elektronenmikroskopische Aufnahme der Gitterstruktur aus magnetischen Flussschläuchen in einem TypII-Supraleiter
(Quelle: [25])

7.15.4 Die Suprafluidität (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Die Suprafluidität* ist noch nicht verfügbar.)

7.16 Offene Fragen der Quantenmechanik (-/-)

(XXX: Der Text des Kapitels *Offene Fragen der Quantenmechanik* ist noch nicht verfügbar.)

7.17 Quantenmechanik des täglichen Lebens (-)

(XXX: Der Kopftext des Kapitels *Quantenmechanik des täglichen Lebens* ist noch nicht verfügbar.)

7.17.1 Physik der Atomkerne (-)

Kaum jemand wird bezweifeln, dass die Physik der Atomkerne, also die in diesem Bereich der Physik gewonnenen Forschungsergebnisse und insbesondere die mit ihrer Hilfe möglich gewordenen **technischen Anwendungen** unser aller Leben stark beeinflusst hat. Ohne deren Auswirkungen hätte sicherlich insbesondere die Weltpolitik der letzten 65 Jahre einen anderen Weg genommen. Da die Prozesse der Kernumwandlungen andererseits ohne das Instrumentarium der Quantenmechanik nicht verständlich gemacht werden können, ist diese Thematik meiner Ansicht nach in dem Kapitel *Quantenmechanik des täglichen Lebens* gut aufgehoben. Dass für ein tieferes Verständnis der die Atomkerne zusammen haltenden Kraft, der sog. *starken Wechselwirkung*, noch nicht einmal die bisher dargestellte Quantenmechanik ausreichend ist, sondern der Erweiterung um die sog. *Quanten-Chromodynamik* bedarf, soll uns an dieser Stelle (noch) nicht stören. Ich werde mich im Gegenteil bemühen zu zeigen, dass eine ganze Reihe von Zusammenhängen bereits mit sehr einfach strukturierten Überlegungen erarbeitbar ist, für die selbst die Quantenmechanik nur an wenigen Stellen benötigt wird.

Ein großer Fortschritt bei der Erforschung der Struktur der Atome gelang dem britischen Atomphysiker *Sir (seit 1931) Ernest Rutherford, Baron of Nelson* (* 1871 in Brightwater b. Nelson/Neuseeland; † 1937 in Calmbridge/England) 1911 durch Streuexperimente von α -Teilchen (s. hierzu den Absatz *Natürliche radioaktive Strahlung* ab S. 767) an einer ca. $0,5 \cdot \mu\text{m}$ dicken Goldfolie ([36]). Diese Schichtdicke entspricht etwa 1000 Atomlagen an Gold. Der Aufbau dieses Experimentes ist in der Abb. 18 skizziert: Nach dem zu dieser Zeit akzeptierten Atommodell des britischen Physikers *Sir (seit 1908) Joseph John Thomson* (* 1856 in Cheetyham Hill b. Manchester; † 1940 in Cambridge/Engl.) sollten die Atome homogen mit Masse angefüllt sein (*plum pudding theory*). Dann aber wäre bereits eine nur 1 Atomlage dicke Materieschicht in der Lage, alle auf sie auftreffenden Teilchen zu absorbieren oder zumindest zu streuen. Rutherford stellte jedoch fest, dass der überwiegende Anteil der α -Teilchen in seinem Experiment die Goldfolie ungestört durchdrang und nur sehr wenige dieser Teilchen gestreut wurden. Der mit diesem Streuexperiment abgeschätzte Streuquerschnitt war von der Größenordnung $10^{-28} \cdot \frac{m^2}{\text{Teilchen}}$! Dieses Ergebnis zwang dazu anzunehmen, dass in einem Atom der größte Teil des von ihm eingenommenen Volumens keine Objekte enthält, die in der Lage sind, mit diesen α -Teilchen derart zu wechselwirken, dass sie in ihrer Bahn abgelenkt wurden. Lediglich das verbleibende Restvolumen, das einen Durchmesser der Größenordnung $10^{-14} \cdot m$ besitzt, war hierzu in der Lage. Die sich daran anschließenden Forschungsarbeiten von Rutherford und anderen führten dann zu dem Atommodell des elektrisch positiv geladenen Atomkerns, der den weitaus größten Teil der Atommasse trägt, und den um

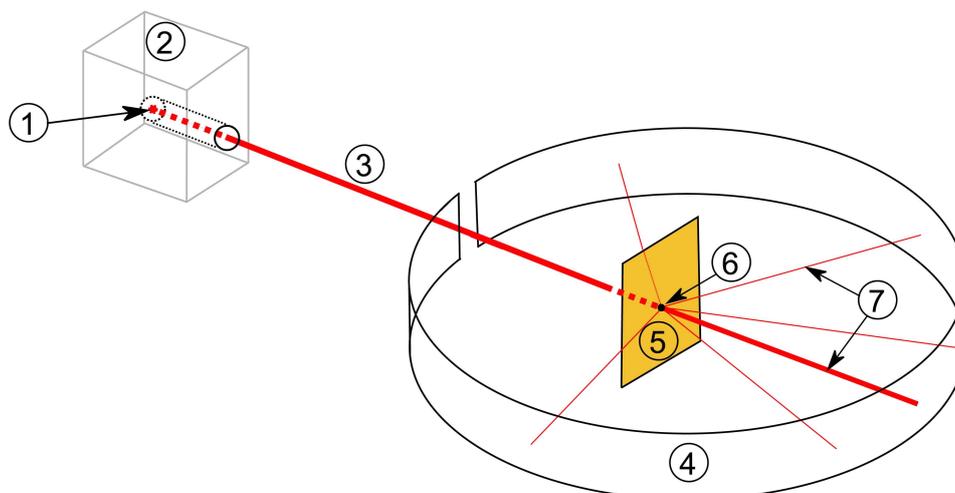


Abb. 18 Streuung von α -Teilchen an einer Goldfolie; Prinzipskizze des von Rutherford durchgeführten Experimentes;

(1) α -Strahlungsquelle (Radium); (2) Bleikörper zur Strahlfokussierung u. Strahlungsabschirmung; (3) α -Primärstrahl; (4) Leuchtschirm oder photograph. Film als Strahlungsdetektor; (5) Goldfolie; (6) Auftreffpunkt des α -Strahls; (7) Streuwinkel

(Quelle: diese Abb. basiert auf dem Bild Rutherford_Scattering.svg aus der freien Enzyklopädie Wikipedia und ist gemeinfrei; Autor des Bildes ist Raphael Sundance)

diesen Kern verteilten elektrisch negativ geladenen Elektronen, durch die das Atom als ganzes elektrisch neutral ist.

Ohne einen schwerwiegenden Fehler zu begehen, dürfen wir diesen Abschnitt mit der (etwas vereinfachenden) Aussage fortsetzen, dass die Kerne der Atome aus den Bausteinen *Proton* und *Neutron* *aufgebaut* sind, wobei die Anzahl z der in dem Kern K *enthaltenen* Protonen dessen elektrische Ladung bestimmt,

$$Q(K) = z \cdot Q_0 \quad (7.538)$$

und die Gesamtanzahl \mathcal{A} dieser zusammenfassend als *Nukleonen* bezeichneten Bausteine bestimmt die Masse des Kerns,

$$M(K) \approx \mathcal{A} \cdot M_0 \quad (7.539)$$

Diese Größe \mathcal{A} , die Gesamtanzahl von Nukleonen in dem betrachteten Atomkern, wird oft auch als Massenzahl bezeichnet. In der Massenspektrometrie (s. Absatz S. 13.2.1) wird sie meist mit dem Buchstaben m gekennzeichnet. Um Verwechslungen

mit der Massendichte zu vermeiden, werde ich ausschließlich die Kennzeichnung \mathcal{A} verwenden.

Weshalb die in der Gl. 7.539 angegebene Proportionalität nur annähernd erfüllt ist, ist Gegenstand des Absatzes *Der Massendefekt* ab S. 771. Zur Kennzeichnung eines Atomkerns hat sich die Schreibweise

$$K_z^{\mathcal{A}} : \text{Kern aus insgesamt } \mathcal{A} \text{ Nukleonen, von denen } z \text{ Protonen sind} \quad (7.540)$$

eingebürgert. Einzelne auftretende Nukleonen dagegen werden meist mit kleinen Buchstaben geschrieben:

$$n_0^1 : \text{Neutron} ; p_0^1 : \text{Proton} \quad (7.541)$$

Die Wechselwirkung, die diese Bausteine innerhalb eines Atoms zusammenhält, die sog. *starke Wechselwirkung*, werde ich an anderer Stelle (Abschnitt 10.1.3) skizzieren. In diesem Abschnitt werden wir uns darauf beschränken, die Existenz dieser anziehenden Wechselwirkung als gesichert hinzunehmen, und die wichtigsten, experimentell nachgewiesenen Fakten aufzuzählen, die aus dieser attraktiven Wechselwirkung resultieren.

Ich beginne diesen Abschnitt mit der Diskussion der experimentellen Fakten, die bei der Erforschung des Aufbaus der Atome auch historisch am Anfang standen, nämlich mit der sog. natürlichen radioaktiven Strahlung.

Natürliche radioaktive Strahlung (-)

Ihren Anfang nahm die experimentelle Erschließung der Physik der Atomkerne durch die Entdeckung und Erforschung der radioaktiven Strahlung gewisser chemischer Elemente. Diese sog. *natürliche*, weil bereits ohne den Einfluss des Menschen vorhandene *Radioaktivität* entdeckte also erster Henri Becquerel im Jahr 1896. Ihm fiel auf, dass photographische Platten geschwärzt waren, nachdem er sie im Dunkeln zusammen mit Proben von Pechblende (UO_2) gelagert hatte. *Marya (gen. Marie) Salomea Curie* (* 1867 in Warschau; † 1934 in Sancellemoz/Haute-Savoie(Frankreich)) und ihrem Ehemann *Pierre Curie* (* 1859 in Paris; †1906 ebenda) gelang dann 1898 der chemische Nachweis der Elemente *Radium* (Kennzeichnung Ra_{88}) und *Polonium* (Kennzeichnung Po_{84}) in Pechblende als Zerfallsprodukte des radioaktiven Zerfalls von Uran. Gemeinsam mit Becquerel erhielten Marie und Pierre Curie hierfür 1903 den Nobelpreis für Physik. Zusätzlich erhielt das Ehepaar Curie 1911 den Nobelpreis für Chemie.

(XXX: Der noch vorgesehene weitere Text zu deren Arbeiten ist noch nicht verfügbar.)

Bei der näheren Untersuchung der Strahlung, die an den natürlich radioaktiven Materialien auftritt, zeigte sich, dass diese Strahlung 3 unterschiedliche Strahlungsanteile enthalten kann mit substantiell unterschiedlichem Verhalten. Da deren Natur zunächst noch unbekannt war, wurden sie - pragmatisch ihrer Durchdringungsfähigkeit nach angeordnet - als α -, β - und γ -Strahlung bezeichnet:

- Die α -Strahlung ist durch eine wohl definierte, relativ kurze Reichweite ausgezeichnet. Der Zahlenwert dieser Reichweite ist durch das Ausbreitungsmedium (z.B. Luft) und durch die Anfangsenergie der α -Teilchen bestimmt. Bei Ausbreitung z.B. in Luft bleibt zunächst die Anzahl der α -Teilchen erhalten, lediglich ihre kinetische Energie nimmt mit der Ausbreitung ab. Bei einer bestimmten Restenergie, also in einer bestimmten Entfernung von der Quelle, verschwinden dann die α -Teilchen. In Luft liegt diese Reichweite in der Größenordnung einiger cm , in Festkörpern im Bereich einiger $0,01 \cdot mm$. Die biologische Gefährdung der α -Strahlung geschieht daher primär durch direkten z.B. Hautkontakt mit der Quelle der α -Strahlung oder durch Aufnahme des Strahlers selbst über die Nahrung oder die Atemluft. Dann allerdings kann das α -strahlende Material innerhalb des Körpers in dem Gewebe, in das es eingelagert wurde, gravierende Schädigungen erzeugen.

Ein typischer natürlicher α -Strahler ist das Uran-Isotop U_{92}^{238} . Es zerfällt gem. dem Reaktionsschema



Für die experimentelle Arbeit wurde anfänglich überwiegend Po_{84}^{210} genutzt. Das instabile Element Po entsteht im Zuge der Uran/Thorium-Zerfallsreihe (s. Kapitel 7.20) und kann aus der Pechblende durch chemische Verfahren extrahiert werden.

- Die β -Strahlung hat keine wohl definierte Reichweite. In einem Ausbreitungsmedium, z.B. in Luft, nimmt der Gesamt-Strahlungsstrom annähernd exponentiell mit dem Abstand von der Quelle ab. Die z.B. durch die Halbwertslänge (Abnahme der Gesamtintensität der Strahlung auf die Hälfte) charakterisierte Stärke der Absorption von β -Strahlung in einem Material ist sowohl von deren mittlerer Energie als auch von dem Material stark abhängig. Typische Werte für Luft sind $10 \cdot cm$ bis einige m .

Ein typischer natürlicher β^+ -Strahler ist das Isotop K_{19}^{40} . Dessen Zerfallsreaktion



hat eine Halbwertszeit (s.u.) von

$$t_{1/2} = 1,248 \cdot 10^9 \cdot y \quad (7.544)$$

- Die 1900 von dem französischen Chemiker und Physiker *Paul Ulrich Villard* (* 1860 in Saint-Germain-au-Mont-d'Or/Rhône (Frankreich); † 1934 in Bayonne/Dep. Pyrénées-atlantiques (Frankreich)) entdeckte γ -Strahlung hat ebenfalls keine wohl definierte Reichweite. Ihr Ausbreitungsverhalten in einem Ausbreitungsmedium ist verwandt mit dem der β -Strahlung. Allerdings ist die Halbwertslänge i.a. deutlich größer als der entsprechende Wert für β -Strahlung in demselben Material. Die Absorption von γ -Strahlung in einem Material

nimmt stark mit der Massenzahl \mathcal{A} der in diesem Material enthaltenen chemischen Elemente zu. Die Halbwertslänge liegt für schwere Elemente im Bereich $10 \dots 50 \cdot mm$.

γ -Strahlung tritt i.a. nicht alleine auf, sondern zusammen mit α - oder β -Strahlung. S. hierzu z.B. den im Absatz S. 1149 beschriebenen β -Zerfall des Kobalt-Isotops Co_{27}^{60} .

1909 gelang es dem österreichischen Physiker *Stefan Meyer* (* 1872 in Wien; † 1949 in Bad Ischl (Öster.)) und anderen, die Ablenkung dieser Strahlungsarten im Magnetfeld quantitativ zu bestimmen. Hieraus folgte eindeutig, dass es sich bei der α -Strahlung um vollständig ionisierte Heliumatome He_2^4 handelt und bei der β -Strahlung, je nach der Art der Strahlungsquelle, entweder um Elektronen oder um Positronen. Die Anfangsenergie dieser Elektronen (oder Positronen) ist kontinuierlich über einen gewissen Energiebereich verteilt. Die maximal auftretende Anfangsenergie ist ein für den jeweiligen Zerfallsprozess typische Kenngröße. Sie ist mit der bei dem Zerfallsprozess auftretenden (absoluten) Zerfallsenergie identisch. Die Teilchen der γ -Strahlung waren offensichtlich ungeladen. 1914 gelang dann Rutherford durch Beugungsexperimente an Kristallen der Nachweis, dass es sich bei der γ -Strahlung um elektromagnetische Strahlung handelt. Ihre Photonenenergien liegt im Bereich $1 \dots 100 \cdot MeV$. Für seine Arbeiten zur Klärung der Frage, woraus diese 3 verschiedenen in der Natur vorkommenden radioaktiven Strahlungen bestehen, erhielt Rutherford 1908 den Nobelpreis für Chemie.

Bereits während der 1920-er Jahre entdeckte man einen weiteren Typ von Strahlung, der allerdings nicht mehr als *natürlich* im eigentlichen Sinne anzusehen ist. Bei dem Beschuss von natürlichem Beryllium mit α -Strahlung entstand eine offensichtlich neue Art von Strahlung, die zunächst als *Beryllium-Strahlung* bezeichnet wurde. 1932 gelang dem englischen Physiker *Sir (seit 1945) James Chadwick* (* 1861 in Bollington/Cheshire (Engl.); † 1974 in Cambridge) der Nachweis, dass es sich bei dieser Strahlung um elektrisch neutrale Teilchen handelt, nämlich um die bereits als weitere Bausteine der Atomkerne postulierten Neutronen ([39]). Die Reaktionsgleichung für diesen Prozess lautet



Für diesen Nachweis erhielt Chadwick 1935 den Nobelpreis für Physik.

Bereits in einer frühen Phase dieser Entdeckungen zeigte sich, dass die Geschwindigkeit, mit der ein natürlich radioaktives Material sich durch einen derartigen Zerfallsprozess in ein anderes Material umwandelt, sich durch keinerlei äußere Einflüsse beeinflussen lässt, also z.B. weder durch die Temperatur, den Druck oder durch die Anwesenheit weiterer (nicht radioaktiver) Substanzen. Nicht einmal eine chemische Verbindung des radioaktiven Atoms mit anderen Atomen kann diesen Zerfallsprozess beeinflussen. Die Neigung, diesen Zerfallsprozess auszuführen, ist offenbar eine dem betrachteten Atom, bzw. genauer dem Atomkern intrinsisch von der Natur

aufgeprägte Eigenschaft. Sie äußert sich darin, dass bei einer Gesamtheit von N identischen Atomkernen die Zerfallsgeschwindigkeit $\frac{dN}{dt}$ immer exakt proportional ist zu der aktuell (noch) vorhandenen Anzahl $N(t)$:

$$-\frac{dN}{dt} = c \cdot N(t) \quad (7.546)$$

Die Größe c ist für einen bestimmten Atomkern eine Naturkonstante. Diese DGL lässt sich unmittelbar integrieren (s. Abschnitt 3.1.11) mit dem Ergebnis

$$N(t) = N(t=0) \cdot e^{-c \cdot t} \quad (7.547)$$

Wir berechnen die Zeit, zu der die Anzahl N auf die Hälfte ihres Ausgangswertes abgesunken ist:

$$\frac{1}{2} = e^{-c \cdot t_{1/2}} \Rightarrow t_{1/2} = \frac{\ln 2}{c} \quad (7.548)$$

Diese Zeit $t_{1/2}$ bezeichnet man als die *Halbwertszeit* eines radioaktiven Prozesses. Sie ist die am häufigsten benutzte Kenngröße zur Charakterisierung von Prozessen, die der Gl. 7.546 gehorchen. Mit ihr wird die Gl. 7.547 zu

$$N(t) = N(t=0) \cdot e^{-\frac{(\ln 2) \cdot t}{t_{1/2}}} \quad (7.549)$$

Mit Hilfe der Halbwertszeit können wir jetzt den Begriff der *natürlichen* Radioaktivität erläutern und erweitern. Hierzu verwenden wir bereits eine Erkenntnis, die wir uns erst im Abschnitt 10.2.2 erarbeiten werden. Sie besagt, dass alle schwereren Atomkerne z.B. mit einer Ordnungszahl $z > 26$ nur durch ganz besondere astrophysikalische Prozesse entstehen können, insbesondere im Zuge von sog. Supernova-Explosionen. Sie müssen also alle bereits in dem protoplanetaren Staub enthalten gewesen sein, aus dem unsere Sonne und die sie umkreisenden Planeten entstanden sind. Das Alter \mathbb{A}_{\odot} unserer Sonne ist also eine von der Natur vorgegebene Vergleichsgröße, durch die die in unserem Planetensystem (und damit auch in unserer Erde) vorhandenen radioaktiven Atomkerne in 3 Klassen eingeteilt werden:

1. Die *instabilen* Atomkerne; diesen ist ein Zerfallsprozess zugeordnet mit einer Halbwertszeit

$$t_{1/2} \ll \mathbb{A}_{\odot} \quad (7.550)$$

Falls es also diese Kerne in einer frühen Phase unseres Planetensystems gegeben hat, dann sind diese inzwischen längst zerfallen. Sie lassen sich also nur auf dem Wege kernphysikalischer Prozesse im Labor neu erzeugen und sind dann *künstlich radioaktiv*.

2. Die *metastabilen* Atomkerne; diesen ist ein Zerfallsprozess zugeordnet mit einer Halbwertszeit

$$t_{1/2} \lesssim \mathbb{A}_{\odot} \quad (7.551)$$

Ihre Halbweltzeit ist also groß genug, damit auch heute noch ein für eine Messung ausreichend großer Restanteil an noch nicht zerfallenen Kernen vorhanden ist. Wir nennen diese Atomkerne *natürlich radioaktiv*.

3. Die *stabilen* Atomkerne; bei ihnen hat jeder denkbare Zerfallsprozess eine Halbwertzeit von

$$t_{1/2} \gg \mathbb{A}_\odot \quad (7.552)$$

Der Anteil dieser Kerne an der Gesamtmasse der Erde ist also noch nahezu unverändert. Mit der Verfeinerung der kernphysikalischen Messmethoden kann es jedoch vorkommen, dass ein zunächst als absolut stabil angesehener Kern sich als ein Kern mit endlicher Halbwertzeit herausstellt. Als Beispiel nenne ich die Reaktion



Dieser sog. doppelte β -Zerfall, bei dem 2 Elektronen simultan erzeugt werden, ist als nichtlinearer Quantenprozess besonders selten, auch wenn er bei diesem Kern energetisch möglich ist. Seine Halbwertszeit beträgt

$$t_{1/2} = 7,7 \cdot 10^{24} \cdot y \quad (7.554)$$

Der Massendefekt (-)

Wir wenden uns nun dem sog. *Massendefekt* zu. Zu seiner experimentellen Bestätigung und Quantifizierung genügt es, die Masse der Ausgangsteilchen Proton und Neutron einerseits und die der Atomkerne andererseits ausreichend genau zu vermessen. Eine derartige Messung ist heute bereits mit handelsüblichen Massenspektrometern (s. Absatz S. 13.2.1) mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-4} und besser möglich. Führt man an allen verfügbaren Atomkernen eine ausreichend genaue Massenbestimmung aus, so stellt man fest, dass die Masse eines Atomkerns immer kleiner ist als die Summe der Massen der diesen Kern bildenden Bausteine,

$$M(K_z^{\mathcal{A}}) < z \cdot M_{\text{Proton}} + (\mathcal{A} - z) \cdot M_{\text{Neutron}} \quad (7.555)$$

Mit M_{Proton} und M_{Neutron} sind in dieser Ungl. die Ruhemassen des **isolierten** Protons bzw. Neutrons gemeint! Zur Orientierung zeigt die Abb. 19 für jedes chemische Element der Ordnungszahl z ., d.h. für jede Atomkern-Sorte mit der Protonenanzahl z , den relativen Massendefekt

$$\frac{\Delta M}{M} = \frac{[z \cdot M_{\text{Proton}} + (\mathcal{A} - z) \cdot M_{\text{Neutron}}] - M_{\text{Atomkern}}}{M_{\text{Atomkern}}} \quad (7.556)$$

des jeweils häufigsten in der Natur vorkommenden stabilen Isotops dieses Elementes. Bei Elementen mit ausschließlich instabilen Isotopen (z.B. Radon Rn_{86}) habe ich

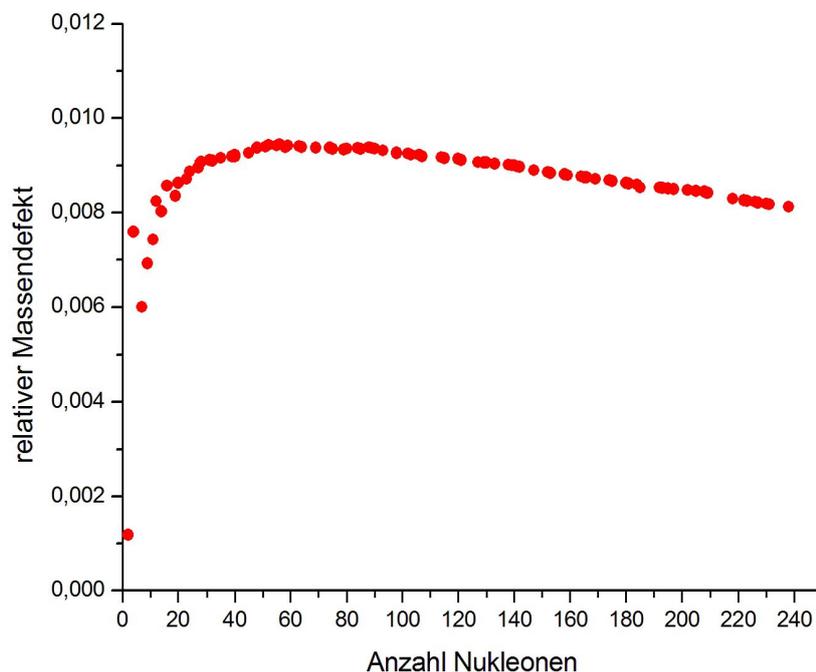


Abb. 19 Relativer Massendefekt des jeweils häufigsten Isotops als Funktion der Ordnungszahl des Atomkerns

das Isotop mit der längsten Lebensdauer ausgewählt. Zur Erstellung dieser Graphik habe ich die Messwerte für die Masse des jeweiligen **neutralen** Isotops genommen, die auch die Massen der die Atomhülle bildenden Elektronen beinhalten, und diese Werte mit der Summe der Massen der Bausteine, wieder einschließlich der Elektronen der Elektronenhülle, verglichen:

$$\frac{\Delta M}{M} = \frac{[z \cdot (M_{\text{Proton}} + M_{\text{Elektron}}) + (\mathcal{A} - z) \cdot M_{\text{Neutron}}] - M_{\text{Atom}}}{M_{\text{Atom}}} \quad (7.557)$$

Dieser Vergleich ist einerseits relativ leicht durchführbar, da alle hierfür erforderlichen Messdaten in der Literatur ([31], [1] aus Heft 15) zugänglich sind. Er ist aber sogar sinnvoller als z.B. der Vergleich auf Basis der Massen der jeweils vollständig ionisierten Atomkerne, da in deren Masse auch die Energie enthalten wäre, die zum Aufbau des elektrostatischen Feldes dieser z -fach geladenen Ionen erforderlich ist. Dieser Anteil steht aber in keinerlei logischem Zusammenhang mit den hier zur Diskussion stehenden Fragen(XXX: überdenken).

Diese Funktion $\frac{\Delta M}{M} = f(M)$ ist relativ glatt und steigt im Bereich kleiner Massenzahlen zunächst sehr steil mit der Massenzahl an. Ab der Massenzahl 20 flacht

sie dann stark ab und erreicht im Bereich um die Massenzahl 60 mit nahezu 0,01 ihre höchsten Werte. Danach nimmt der relative Massendefekt wieder leicht ab. In dieser Darstellungsart ist die Funktion $\frac{\Delta M}{M} = f(M)$ bzgl. der \mathcal{A} -Achse offensichtlich nicht äquidistant mit Messwerten belegt.

Werden nun durch einen atomphysikalischen Prozess (oder durch eine Kette von atomphysikalischen Teilprozessen) eine Anzahl von Nukleonen zu einem Atomkern vereinigt, so wird der absolute Massendefekt ΔM als *Fusionsenergie*

$$\Delta E = \Delta M \cdot c_0^2 \quad (7.558)$$

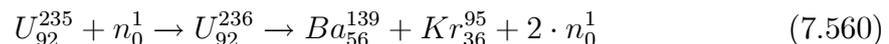
frei. Eine analoge Beziehung gilt für jeden beliebigen kernphysikalischen Prozess, bei dem ein oder mehrere Atomkerne und/oder Elementarteilchen mit einander reagieren. Der dabei auftretende Massendefekt ist - gem. Gl. 7.558 umgerechnet - nichts anderes als die mit diesem Prozess verbundene *Reaktionsenergie*. Die Struktur der dabei geltenden Teilchen- und Energiebilanzen steht in weitgehender Analogie zu den Gleichungen der chemischen Reaktionen, s. Abschnitt 8.1.12. Allerdings sind die bei den kernphysikalischen Prozessen auftretenden Reaktionsenergien um etwa den Faktor 10^7 höher als die typischen Reaktionsenergien chemischer Prozesse. Demzufolge liegt der relative Massendefekt bei chemischen Reaktionen in der Größenordnung 10^{-9} . Um diese Analogie hervorzuheben, werde ich im Zusammenhang mit kernphysikalischen Prozessen auch ganz überwiegend nicht von Massendefekten sprechen, sondern von Reaktionsenergien.

Die Vorgänge der *Kernfusion* finden z.B. im Inneren unserer Sonne statt (s. Abschnitt 10.2.2), sie bilden aber auch die Grundlage der sog. *Wasserstoff-Bombe* sowie des bisher nur in Vorstufen existierenden *Kernfusions-Reaktors*, s. Absatz S. 779. Der zur Bildung von Helium führende Fusionsprozess entspricht etwa dem Brutto-Schema

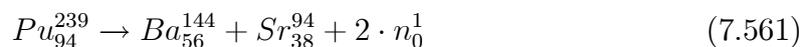


Wegen des für die elektrische Ladung geltenden Erhaltungssatzes entstehen im Laufe dieses Prozesses gemeinsam mit jedem Heliumkern auch 2 Positronen. Auf die physikalische Bedeutung und Systematik des in der Gl. 7.559 zusätzlich angeführten, mit ν_e gekennzeichneten Teilchens, dem *Elektron-Neutrino*, werde ich noch in diesem Abschnitt näher eingehen.

Der umgekehrte Prozess, die Aufspaltung eines Atomkerns in (mindestens) 2 Bruchstücke, z.B. in 2 Atomkerne entsprechend niedrigerer Massenzahl, führt nur dann zu einer **positiven** Reaktionsenergie, wenn die Massenzahl des Ausgangskerns genügend groß ist. Wissenschaftlich, aber insbesondere militärisch und kommerziell interessant ist insbesondere die Spaltung von Uran geworden, z.B. nach dem Schema



und die von Plutonium, z.B. nach dem Schema



Dieser als *Kernspaltung* (engl. *fission*; von *fissio* (lat.) die Spaltung) bezeichnete Prozess bildet die Grundlage der kontrollierten Energie-Erzeugung in einem sog. *Kernreaktor* sowie der ungebremsten spontanen Energie-Freisetzung in einer *Kernspaltungs-Bombe*. Hierauf werde ich im Absatz S. 789 näher eingehen.

Spontane Kernprozesse (-)

Wir wenden uns nun der Frage nach der *Stabilität* eines bestimmten Atomkerns K_z^A zu, insbesondere der Stabilität gegenüber einem *spontanen*, d.h. nicht von außen angestoßenen Zerfalls- oder Umwandlungsprozess:

$$K_z^A \rightarrow K_{z-\Delta z}^{A-\Delta A} + \sum_i X_{\Delta z_i}^{\Delta A_i}; \quad \sum_i \Delta A_i = \Delta A; \quad \sum_i \Delta z_i = \Delta z \quad (7.562)$$

Bei dem durch das Reaktionsschema 7.562 charakterisierten Umwandlungsprozess zerfällt der Ausgangskern K_z^A in einen Restkern $K_{z-\Delta z}^{A-\Delta A}$ veränderter Ordnungszahl und/oder Massenzahl und in ein oder mehrere Zerfallsteilchen $X_{\Delta z_i}^{\Delta A_i}$, das (oder die) die Differenzladung Δz und die Differenz-Massenzahl ΔA trägt (tragen). Dieser Ablauf ist als spontaner Prozess nur möglich, wenn die Reaktionsenergie dieses Prozesses positiv ist, so dass diese z.B. in Form von kinetischer Energie auf die durch den Reaktionsprozess erzeugten Teilchen übertragen werden kann:

$$M(K_z^A) - M(K_{z-\Delta z}^{A-\Delta A}) - \sum_i M(X_{\Delta z_i}^{\Delta A_i}) > 0 \quad (7.563)$$

Die Reaktionsenergie des betrachteten spontanen Prozesses darf sogar dem Betrage nach nicht zu klein sein! Denn nur dann haben sich die Reaktionsprodukte innerhalb der für diesen Prozess typischen Zeitkonstante so weit von einander getrennt, dass eine Umkehr des Zerfallsprozesses nicht mehr möglich ist. Diese Bedingung aber bevorzugt die Abspaltung **kleiner** Zerfallsteilchen! Des weiteren dürfen wir davon ausgehen, dass primär nur Prozesse beobachtet werden, bei denen nur wenige (zusätzliche) Zerfallsteilchen auftreten, vorzugsweise sogar nur ein einziges. Unter Berücksichtigung all dieser zusätzlichen Bedingungen sollten wir daher allein über die Kenntnis der Massen aller bekannten Atomkerne bereits in der Lage sein anzugeben, welche dieser Atomkerne stabil sind bzgl. der Abspaltung eines einzelnen kleinen Teilchens. Hierfür kommen insbesondere die Prozesse des

$$e^-, e^+, p_1^-, n_0^-, He_2^4\text{-Zerfalls} \quad (7.564)$$

in Frage. Die Abspaltung eines He_2^4 -Atomkerns, eines sog. α -Teilchens, erscheint in dieser Aufzählung, weil dieser Atomkern im Vergleich zu seinen Nachbarn, z.B. zum Li_3^6 , eine besonders hohe Bindungsenergie aufweist.

Greifen wir nun einen beliebigen zu untersuchenden Atomkern K_z^A heraus, so können wir die Tochterkerne, die durch die o.a. Zerfallsprozesse entstehen (könnten),

in einer 2-dimensionalen (\mathcal{A}, z) -Darstellung um diesen Kern herum anordnen bzw. die jeweiligen Zerfallsprozesse, die zu diesen Tochterkernen führen, s. Abb. 20. Wenn wir nun für jeden dieser Prozesse die Reaktionsenergie berechnen, erkennen

	m-2	m-1	m	m+1
z-2	alpha-Em.			
z-1		Proton-Em.	Positron-Em.	Proton-Einfang
z		Neutron-Em.	Ausgangskern	Neutron-Einfang
z+1		Antiproton-Em.	Elektron-Em.	Antiproton-Einfang

Abb. 20 Tabelle der Einteilchen-Prozesse, die einen Kern K_z^m in einen anderen Kern umwandeln

wir unmittelbar, welche dieser Prozesse möglich sind. Im nun folgenden Text werde ich die dabei auftretenden typischen Gegebenheiten diskutieren.

Die Abb. 21 zeigt exemplarisch das für den Kern K_{19}^{40} (ein Kalium-Isotop) resultierende Ergebnis. Der im Zentrum dieser Tabelle blau eingetragene Wert ist die

-2,005511			
	-0,008142	0,001616	0,006228
	-0,008375	39,964000	0,010833
	-0,013446	0,001411	0,009545

Abb. 21 Reaktionsenergie in MeV für den spontanen Zerfall von K_{19}^{40} über die in der Abb. 20 angegebenen spontanen Prozesse.

Masse des betrachteten Ausgangs-Isotops K_{19}^{40} . Allein auf Basis der Energiebetrachtung folgt, dass (neben den Einfangprozessen, die wir hier noch nicht betrachten wollen) lediglich die Prozesse des e^- - und des e^+ -Zerfalls möglich sind. Nach unserer Rechnung sind diese Zerfallsprozesse mit einer Reaktionsenergie von

$$\Delta E_{e^+-Zerfall} = 0,001616 \cdot 931,49 \cdot MeV = 1,5053 \cdot MeV \quad (7.565)$$

$$\Delta E_{e^- - Zerfall} = 0,001411 \cdot 931,49 \cdot MeV = 1,3143 \cdot MeV \quad (7.566)$$

verbunden. Diese beiden Zerfallsprozesse sind in der Tat literatur-bekannt mit den Werten

$$K_{19}^{40} \rightarrow Ar_{18}^{40} + e^+ + 1,5049 \cdot MeV \quad (7.567)$$

$$\rightarrow Ca_{20}^{40} + e^- + 1,31109 \cdot MeV \quad (7.568)$$

In diesem Beispiel waren wir also in der Lage, die Zerfallsenergie der energetisch möglichen Zerfallsprozesse bis auf einen Fehler der Größenordnung

$$|\delta(\Delta E_{Zerfall})| < 5 \cdot keV \quad (7.569)$$

anzugeben.

(XXX: Die Fortsetzung dieser Textpassage, die eine Vielzahl von derartigen Prozessen beschreiben wird, ist noch nicht verfügbar. Danach folgt:)

Das Ergebnis der Berechnung der Reaktionsenergie dieser Prozesse steht also in voller Übereinstimmung mit der experimentellen Erfahrung:

- Ein spontaner Zerfallsprozess ist nur möglich, wenn die Reaktionsenergie für diesen Prozess positiv ist.
- Spontane Zerfälle unter Emission eines Protons oder eines Neutrons sind nicht möglich, da ihre Reaktionsenergie immer negativ ist. Die Menge der möglichen spontanen Zerfallsprozesse unter Aussendung leichter Teilchen reduziert sich also auf den

$$e^{-}, e^{+}, He_2^4\text{-Zerfall} \quad (7.570)$$

- Umgekehrt sind daher Elektron-, Proton- oder Neutron-**Einfang**prozesse immer möglich. Diese Prozesse lassen sich vorzugsweise durch geeignete Stoßprozesse auslösen. Von Bedeutung ist insbesondere der Neutron-Einfang, da das Neutron die Coulomb-Barriere der Elektronenhülle des Zielatoms problemlos durchdringt.
- Bei genügend massereichen Zerfallsteilchen existiert überdies offensichtlich - wie vorhergesagt - ein Schwellwert für die kinetische Energie, die das Zerfallsteilchen besitzen muss, damit der Prozess mit endlicher Wahrscheinlichkeit auftritt. Hieraus lässt sich die Größenordnung des Produktes von Zeitkonstante und Reichweite der starken Wechselwirkung abschätzen.
- Bei genügend großer Reaktionsenergie reicht diese Energie aus, um den erzeugten Kern zusätzlich auch noch anzuregen. Die Energien dieser angeregten Zustände des Kerns sind offenbar diskret (und nicht etwa kontinuierlich) verteilt. Dann wird nur die verbleibende Energie als kinetische Energie auf die Reaktionspartner aufgeteilt. Der angeregte Kern strahlt dann mit i.a. sehr kurzer Verzögerung seine Überschussenergie als γ -Teilchen ab.

Bei einer wichtigen Variante des Elektronen-Einfangs ist das reagierende Elektron nicht Teil eines (externen) Elektronenstrahls im Rahmen eines Streuexperimentes sondern ist identisch mit einem Elektron aus der den Atomkern umgebenden Elektronenhülle. Zur Verdeutlichung sollte man diesen Effekt eigentlich als einen **inneren** Elektronen-Einfang bezeichnen. Er tritt insbesondere bei Elementen mit höherer Ordnungszahl auf. Denn das innerste Elektron eines Atoms hat im Zentrum der Elektronenhülle, also im Volumen des Atomkerns, immer eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Der über dieses Volumen integrierte Wert dieser Wahrscheinlichkeitsdichte nimmt mit der Ordnungszahl stark zu.

(XXX: Die an dieser Stelle noch vorgesehene weitere Textpassage des Absatzes *Spontane Kernprozesse* ist noch nicht verfügbar. Danach folgt:)

Die Gesamtheit dieser Umwandlungsprozesse, die an den auf unserer Erde aktuell vorhandenen Isotopen von Elementen spontan, d.h. ohne Beteiligung weiterer Teilchen auftreten, wird als *natürliche Radioaktivität* bezeichnet. Diese haben wir bereits im Absatz ab S. 767 behandelt.

In dem Absatz ab S. 777 werden wir uns den Prozessen zuwenden, die auf der Erde erst durch den Einfluss des Menschen in kernphysikalischen Labors, in Reaktoren usw. auftreten. An anderen Stellen des Universums, z.B. im Inneren von Sternen insbesondere während bestimmter Umwandlungsprozesse dieser Sterne, treten diese stoß-induzierten Prozesse ebenfalls auf.

Stoß-induzierte Kernprozesse (-)

Eine wichtige Möglichkeit, eine Atomkern-Umwandlung von außen anzustoßen, ist der Stoß des betrachteten Atomkerns mit geeigneten Teilchen geeigneter Energie. In der Formulierung der Quantenmechanik handelt es sich hierbei um einen *Streuprozess*, s. Abschnitt 7.12.5. Die historisch erste experimentell durchgeführte Kernumwandlung gelang Rutherford 1919 mit Hilfe eines α -Strahlungsexperimentes in einer Nebelkammer (s. Absatz S. 1407). Er beobachtete die Bahnen der an dem Prozess



beteiligten Stoßpartner und konnte auf Grund der beobachteten Bahnen in dem angelegten Magnetfeld eindeutig nachweisen, dass es sich bei ihnen um die in der Gl. 7.571 angegebenen Atomkerne handelte.

Für die Durchführung stoß-induzierter Kernprozesse eignen sich insbesondere Neutronen, da diese problemlos die sog. Coulomb-Barriere der Elektronenhülle durchdringen und mit dem Atomkern wechselwirken. Die typische experimentelle Anordnung zur Untersuchung derartiger Prozesse besteht aus einer i.a. ausreichend dünnen Folie des zu untersuchenden Elementes (z.B. Blei oder Gold), einer Quelle für einen gerichteten Strahl der ausgewählten Teilchensorte, z.B. Neutronen, und einem Detektor für eines der Teilchen, die bei der zu untersuchenden Reaktion auftreten bzw. erwartet werden, z.B. γ -Strahlung.

Unter Laborbedingungen sind nur sog. *s-Prozesse* (von *slow* (engl.) langsam) auslösende Neutronen-Streuexperimente möglich. Bei diesen Prozessen ist die mittlere Zeit zwischen 2 Stößen desselben Atomkerns mit einem Neutron groß gegen die typische Zerfallszeit eines instabilen Kerns. Daher ist der schrittweise Aufbau schwererer Kerne durch Neutronenbeschuss nur über bestimmte Wege möglich, über Wege nämlich, die nur aus stabilen Kernen oder zumindest aus instabilen Kernen mit ausreichend langer Halbwertszeit bestehen. Selbst im Inneren von Sternen reichen während der sich stationär einstellenden Fusionsprozesse die Neutronenstromdichten nicht aus, um andere als diese sog. s-Prozesse auszulösen.

Nur während einer sog. Supernova-Explosion (s. Absatz S. 1218) treten Neutronenströme auf mit einer Stromdichte, die zu mittleren Zeiten zwischen 2 Stößen desselben Atomkerns führt, die in die Nähe der Zerfallszeit selbst von hoch-instabilen Kernen kommt. Jetzt treten Ketten von Neutronen-Einfangprozessen auf, durch die Atomkerne nahezu beliebiger Massenzahl gebildet werden, die sich danach über eine Serie von Zerfallsprozessen wieder umwandeln, bis ein stabiler Kern erreicht ist. Diese primären Neutronen-Einfangprozesse werden als *r-Prozesse* (von *rapid* (engl.) schnell) bezeichnet. Einzige Bedingung für ihr Auftreten (neben einer ausreichenden Neutronenstromdichte) ist eine positive Reaktionsenergie des Prozesses

$$K_z^{\mathcal{A}} + n_0^1 \rightarrow K_z^{\mathcal{A}+1} + \Delta E \quad (7.572)$$

Der Massendefekt dieser Prozesse liegt für Kerne mit niedriger Massenzahl durchgängig im Bereich von

$$\frac{\Delta M}{M_{ref}} = +0,01 \quad (7.573)$$

entsprechend einer Reaktionsenergie von

$$\Delta E_{n\text{-Einfang}} = 9,4 \cdot MeV \quad (7.574)$$

Der Neutroneneinfang ist für diese Kerne also immer möglich.

(XXX: Der weitere Text des Absatzes *Stoß-induzierte Umwandlung von Atomkernen* ist noch nicht verfügbar.)

Das Schalenmodell des Atomkerns (-/-)

Als Grundannahme für das in diesem Absatz geschilderte quantenmechanische Modell des Atomkerns formulieren wir folgende Aussagen:

1. Jeder Atomkern $K_z^{\mathcal{A}}$ ist aus genau z Protonen und $\mathcal{A} - z$ Neutronen aufgebaut.
2. Jedem dieser Nukleonen sind zusätzlich zu der Unterscheidung Proton/Neutron die physikalischen Größen Impuls, Drehimpuls und Spin zugeordnet.
3. Die Protonen und ebenso die Neutronen sind - für sich genommen - ununterscheidbar.

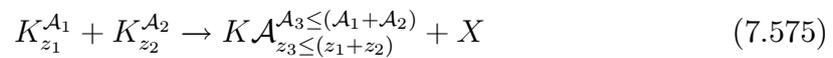
(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Absatzes *Das Schalenmodell des Atomkerns* ist noch nicht verfügbar. In ihm wird auch die nachfolgende Textpassage aufgehen:)

Im Ergebnis folgt aus allen diesen Näherungsrechnungen, dass alle Elemente mit einer Ordnungszahl $z > 92$ nur noch instabile Isotope besitzen, für die also immer mindestens 1 Zerfallsprozess existiert mit einer Halbwertszeit, die klein ist gegen das Alter \mathcal{A}_{\odot} unserer Sonne. Durch geeignete Experimente im Labor lassen sich derartige

Atomkerne jedoch durchaus herstellen. Dies sind insbesondere Stoßprozesse zwischen 2 ausreichend schweren Atomkernen. Auf diese Weise ist es bis heute (2016) gelungen, alle Elemente bis zur Ordnungszahl 112 nachzuweisen. Letzteres wird wahrscheinlich den Namen *Copernicium* erhalten. Das bisher schwerste nachgewiesene Element hat die Ordnungszahl 118.

7.17.2 Physik der H-Bombe u. des Fusions-Reaktors (-)

In diesem Abschnitt werden wir die physikalischen Voraussetzungen für die technische Nutzung der bei der Kernfusion frei werdenden Energie diskutieren. Die Bedingungen, unter denen diese Prozesse **ohne** den Einfluss des Menschen in der Natur ablaufen, nämlich im Inneren der Sterne, werden wir im Absatz S. 1185 behandeln. Der zu betrachtende Prozess besteht aus der Vereinigung von mindestens 2 Atomkernen niedriger Massenzahl zu einem Atomkern entsprechend höherer Massenzahl und evtl. weiteren Reaktionspartnern, etwa gemäß dem Schema



Auf der Suche nach Reaktionen, die für eine technische Anwendung günstig sein könnten, orientieren wir uns an den in der Abb. 22 dargestellten Fakten. Ähnlich

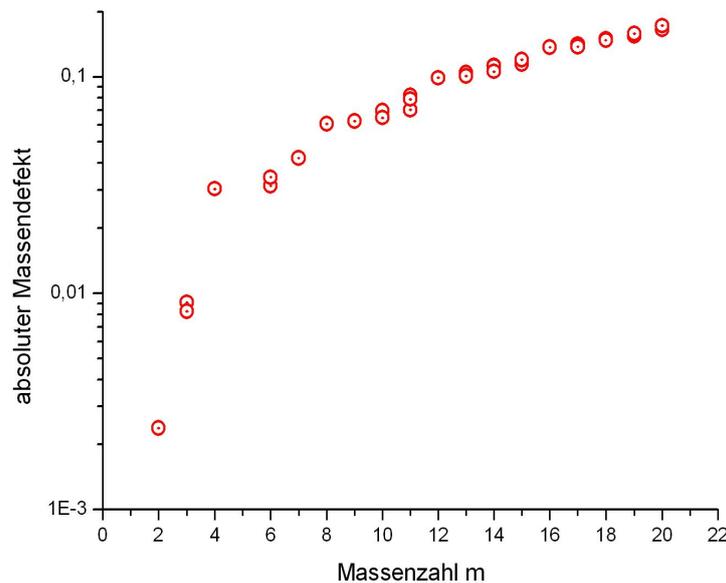


Abb. 22 Absoluter Massendefekt $M(K_z^m) - z \cdot M_{\text{Proton}} - (m - z) \cdot M_{\text{Neutron}}$ als Funktion der Massenzahl m

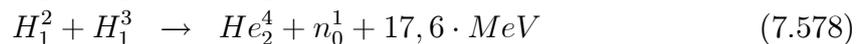
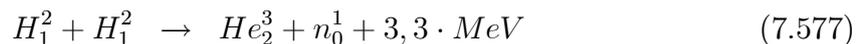
wie die Abb. 19 zeigt diese Abb. erneut den bei der Bildung der Atomkerne aus den

Bausteinen Proton und Neutron auftretenden Massendefekt, diesmal begrenzt auf Kerne niedriger Massenzahl ($\mathcal{A} \leq 20$), dafür aber für alle bekannten Isotope, auch für diejenigen, die sich über spontane Prozesse in andere Kerne umwandeln. Zum anderen ist diesmal der absolute Massendefekt in Einheiten der Protonmasse angegeben. In diesem Bereich der Massenzahlen steigt dieser Wert steil an, wobei sich dieser Anstieg aber bereits ab Werten $\mathcal{A} > 4$ deutlich abflacht. In 1. Näherung ist offensichtlich allein die Massenzahl \mathcal{A} für den Massendefekt ausschlaggebend. Kerne mit gleicher Massenzahl, aber unterschiedlicher Ordnungszahl z unterscheiden sich nur geringfügig.

Aus diesen Fakten folgt unmittelbar, dass die Fusionsreaktion zur Erzeugung eines Kerns He_2^4 der bevorzugte Prozess ist. Da generell Mehrteilchenprozesse mit geringerer Wahrscheinlichkeit ablaufen als 2-Teilchenprozesse, entscheiden wir uns also für einen Prozess



Wenn wir nun noch auf Hilfsprozesse, die die erforderlichen Ausgangskerne während des Reaktionsablaufs erst noch erzeugen müssen, verzichten wollen, haben wir nur noch die Wahl zwischen den Prozessen



Die ebenfalls 2 erzeugten Ergebniskernen sind erforderlich, um bei diesem Prozess die Impulserhaltung zu gewährleisten.

Nun wird aber ein derartiger Kernumwandlungsprozess durch die zwischen den Kernbausteinen wirkende sog. *starke Wechselwirkung* (s. Abschnitt 10.1.7) bewirkt. Diese besitzt jedoch nur eine extrem kurze Reichweite von der Größenordnung des Proton-Durchmessers, also ca. $1 \cdot fm$. 2 Atomkerne, die sich in Folge eines Stoßprozesses und auf Grund der starken Wechselwirkung in einen neuen Atomkern umwandeln, müssen sich daher während dieses Stoßprozesses bis auf einen Abstand der Größenordnung $1 \cdot fm$ einander genähert haben. Anderenfalls wirkt auf sie nur die (abstoßende) elektromagnetische Wechselwirkung. Soll nun dieser Stoß thermisch erfolgen, d.h. auf Grund einer ausreichend hohen Temperatur des Reaktionsmaterials, ist hierfür eine Temperatur der Größenordnung

$$T_{He-Fusion} \geq 1 \cdot 10^7 \cdot K \quad (7.579)$$

erforderlich. Eine thermodynamisch und elektrochemisch korrekte Abschätzung dieser Temperatur werde ich nachholen, wenn wir uns die hierfür erforderlichen Kenntnisse erarbeitet haben, also im Anschluss an das Heft 8 (*Thermodynamik*) im Absatz ab S. 1185.

Die Kernfusions-Bombe (-)

Will man diese Technik für den Bau einer militärischen Bombe einsetzen, muss das Reaktionsmaterial außer der zur Zündung der Reaktion erforderlichen hohen Tem-

peratur (s. Gl. 7.579) auch noch eine ausreichend hohe Dichte besitzen, damit es innerhalb einer möglichst kurzen Zeit möglichst vollständig durchreagieren kann. Unter diesen Bedingungen liegt das Reaktionsmaterial als Plasma (s. Abschnitt 8.3.8) vor. Die Zündung einer derartigen Bombe besteht dann darin, das Reaktionsmaterial von seinem Ausgangszustand (moderate Dichte n und niedrige Temperatur) in möglichst kurzer Zeit auf die für das Fusionsbrennen erforderlichen Werte ($T_{\text{H-Fusion}}$; n) zu bringen. Die bis heute vermutlich ausschließlich eingesetzte Lösung besteht in der Zündung einer kleinen Kernspaltungsbombe (s. Abschnitt 7.17.3).

(XXX: Der weitere Text über die physikalischen Grundlagen der Kernfusions-Bombe ist noch nicht verfügbar. Er wird auch die Abb. 23 enthalten und diskutieren.)

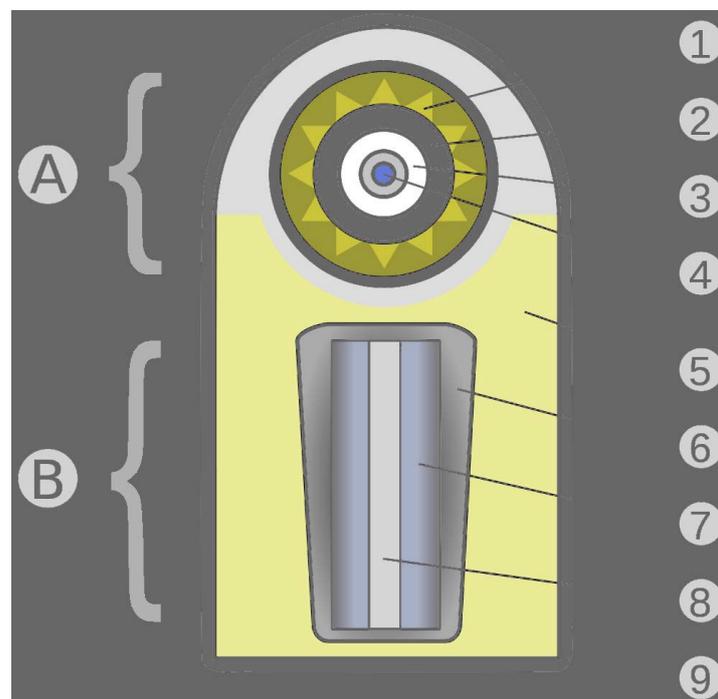


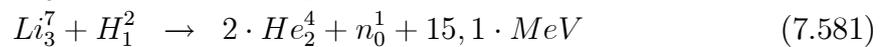
Abb. 23 Prinzipskizze des sog. Teller-Ulam-Designs einer H-Bombe

Hierin bedeuten: (1) chemischer Zünder (2) Mantel aus U^{238} (3) Hohlraum (4) in Pu oder U - Metallkugel eingeschlossenes H_1^3 (5) Polystyrolschaum (6) Mantel aus U^{238} (7) $Li^6H_1^2$ (8) Stab aus Pu (9) reflektierender Mantel

(Quelle: diese Abb. basiert auf dem Bild Teller-ulam-multilang.svg aus der freien Enzyklopädie Wikipedia und unterliegt der GNU-Lizenz für freie Dokumentation Version 1.2; der Autor ist Dake

In der Abb. 23 entspricht dem Teil (A) die Kernspaltungseinheit, die zur Zündung der Kernfusionsbombe (B) dient.

Die Fusionsreaktion entspricht den Bruttoschemata



Die erste Realisierung der Kernfusion in Form eines **ungeregelten** Prozesses mit dem Ziel der militärischen Anwendung gelang den USA. Das US Department of Defense zündete am 31.12.1952 auf dem zu den Marshallinseln im Südpazifik gehörenden Eniwetok-Atoll unter dem Code-Namen *Ivy Mike* die 1. sog. *Wasserstoff-Bombe*. Im Jahr 1954 folgte dann eine Serie von Testexplosionen mit H-Bomben unterschiedlicher physikalisch-technischer Konzeption und Zusammensetzung des Fusionsmaterials und damit auch sehr unterschiedlicher Explosionsstärke. Die bis heute stärkste von den USA durchgeführte H-Bomben-Explosion wurde am 01.03.1954 gezündet. Sie erhielt den Code-Namen *Castle Bravo*. Sie war nach dem oben erläuterten Teller-Ulam-Design aufgebaut.

Die Abb. 24 zeigt den von der Bombe *Castle Romeo* erzeugten sog. *Atompilz*. Diese Bombe wurde am 27.03.1954 nahe dem Bikini-Atoll von einem Schiff aus gezündet. Der Atompilz hatte nach etwa 6 · min eine Höhe von 40 · km erreicht und sich auf einen Durchmesser von ca. 100 · km ausgedehnt.

Zur Quantifizierung der Explosionsstärke einer Bombe wird überwiegend der Begriff *TNT – äquivalent* verwendet, und zwar nicht nur in der militärischen Literatur, sondern auch in der allgemeinen Berichterstattung. Er gibt die bei der Explosion freigesetzte Energie an, und zwar in Einheiten des für den (sog. konventionellen) chemischen Sprengstoff TNT (= **T**ritrotoluol; korrekte Bezeichnung nach den IUPAC-Vorschriften Dimethyl-Trinitrobenzol) geltenden Wertes

$$\Delta E(\text{TNT}) = 4,184 \cdot 10^{12} \cdot \frac{J}{10^3 \cdot kg} \quad (7.582)$$

Bei einer für militärische Zwecke entwickelten Bombe gibt diese Größe nicht unbedingt die real auftretende Sprengkraft im Sinne einer Quantifizierung des maximal anrichtbaren Schadens an. Hierfür spielen weitere Kenngrößen eine wichtige Rolle, insbesondere die Dauer des Explosionsvorgangs und die Aufteilung der insgesamt freigesetzten Energie auf die bei diesem Gesamtvorgang auftretenden Energieströme: atmosphärische Druckwellen, elektromagnetische Strahlung, radioaktive Korpuskularstrahlung u.a. . Bereits die 1. von den USA gezündete H-Bombe hatte eine Explosionskraft von 10 · MT. Um eine zumindest vage Vorstellung von der im Grunde unvorstellbaren Steigerung an militärischer Zerstörungskraft zu vermitteln, die durch diese Entwicklung erreicht wurde, habe ich in der nachfolgenden Tabelle einige Zahlenwerte von Explosionsstärken (jeweils in *Tonnen TNT – äquivalent*) militärischer Objekte bzw. Aktivitäten zusammengestellt:

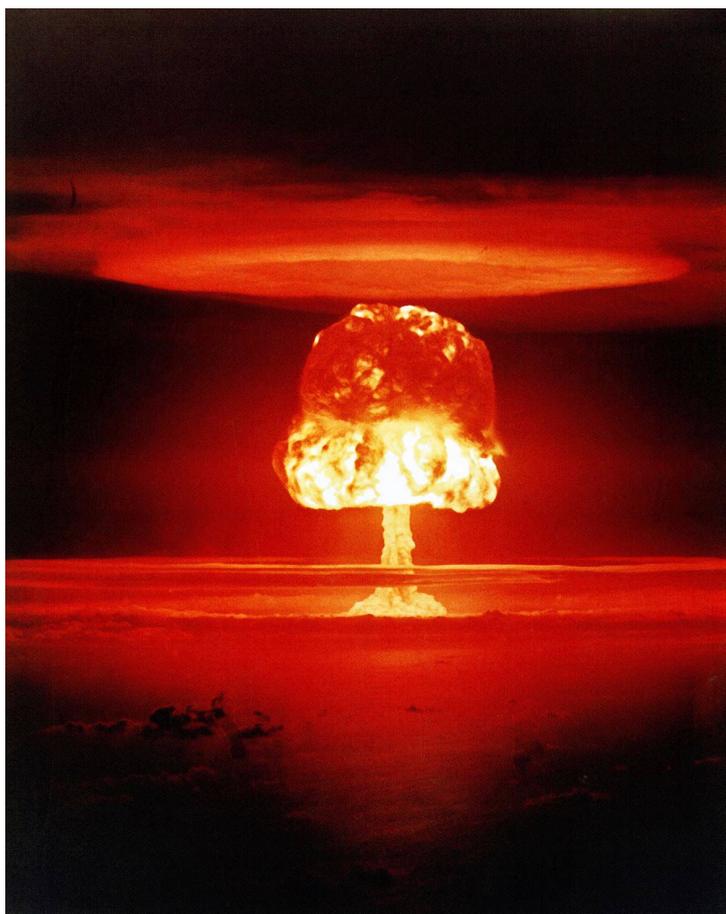


Abb. 24 H-Bombenexplosion am 27.03.1954 nahe dem Bikini-Atoll
(Quelle: www.nv.doe.gov)

Objekt / Aktivität	Explosionsstärke
typ. im 2. Weltkrieg eingesetzte Bombe der US Air Force	$0,8 \cdot T$
Summe d. i. 2. Weltkrieg a. Städte abgeworfenen Bomben	$2 \cdot MT$
größte konventionelle Bombe der US Air Force: MOAB	$11 \cdot T$
1945 auf Hiroshima abgeworfene Kernspaltungsbombe	$15 \cdot kT$
größte von den USA getestete H-Bombe	$15 \cdot MT$
typ. heutiger Gefechtskopf einer Interkontinentalrakete	$0,1 \dots 1,2 \cdot MT$

Ich widerstehe an dieser Stelle der Versuchung, diese Zahlen zu kommentieren, verweise den Leser lediglich auf das allgemein bekannte Ausmaß an Zerstörung, das die auf Hiroshima abgeworfene Bombe von "nur" $15 \cdot kT$ angerichtet hat, und auf das Martyrium der (zunächst) Überlebenden von Hiroshima, das bei einigen der Opfer bis heute andauert. Die Anzahl der in den Waffenlagern der sog. Atommächte USA, Russland, Großbritannien, Frankreich, VR China und einigen weiteren Ländern ein-

satzbereit gelagerten atomaren Gefechtsköpfe schätzt man aktuell (2011) auf etwa 8170.

Das Verhältnis von Sprengkraft und radioaktivem Fallout ist bei der H-Bombe deutlich größer als bei der Kernspaltungsbombe. Dennoch ist es völlig abwegig, diesen Typ von nuklearer Bombe als *saubere* Waffe zu bezeichnen, wie es anfänglich versucht wurde.

Der Kernfusions-Reaktor (-)

Will man das Prinzip der Kernfusion nicht-militärisch für die Energieerzeugung nutzen, benötigt man eine technische Anlage, die ebenfalls in der Lage ist, das Reaktionsmaterial auf die oben erläuterte Mindest-Temperatur $T_{\text{He-Fusion}}$ aufzuheizen, und zwar ohne dass die technische Anlage dabei Schaden nimmt. Die Reaktionsgeschwindigkeit, d.h. der aktuelle Wert des erzeugten Energiestroms lässt sich dann einfach über die Zudosierung des Reaktionsmaterials in die Reaktionskammer regeln.

Das heute am intensivsten untersuchte Konzept ist der sog. *Tokamak*-Reaktor, eine Anlage, in der das als Plasma vorliegende Reaktionsmaterial auf die unterschiedlichste Weise, z.B. induktiv auf die erforderliche Temperatur aufgeheizt wird, während es durch eine geschickte Anordnung von Magneten in einem torus-förmigen Raum derart eingeschlossen ist, dass es die Toruswände nicht berühren kann. Dieses Konzept wurde bereits 1952 von *Andrej Dmitrijewitsch Sacharow* (* 1921 in Moskau; † 1989 ebenda) und *Igor Jewgenewitsch Tamm* (* 1895 in Wladiwostok/Russland; † 1971 in Moskau) am Kurtschatow-Institut in Moskau theoretisch entwickelt und bis zu einem funktionsfähigen Prototyp aufgebaut. Auf sie geht auch die Bezeichnung *Tokamak* zurück, eine aus der Abkürzung der russischen Formulierung für *Toroidale Kammer in Magnetspulen* entstandene Wortschöpfung. Die Struktur des im Inneren des Tokamak-Torus erzeugten Magnetfeldes ist spiralförmig. Hierdurch wird eine zu starke Verwirbelung der Plasmaströme verhindert. Die Spulen zur Erzeugung der Magnetfelder sind heute aus supraleitendem Material.

Eine Alternative zur Tokamak-Anordnung ist der sog. *Stellarator*. Es handelt sich ebenfalls um eine toroidale Kammer, in der ein Plasma eingeschlossen wird. Der Torus ist jedoch nicht mehr rotationssymmetrisch sondern in sich verdreht, etwa wie ein zu einer 8 verdrehter Schlauch. Er ist konstruktiv komplizierter als der Tokamak, benötigt aber zusätzlich zu den von außen angelegten Magnetfeldern keinen im Plasma fließenden elektrischen Strom zu dessen Stabilisierung. Hierdurch wird eine bestimmte Klasse von möglichen Instabilitäten, die bei einem Tokamak auftreten kann, sicher vermieden. Seit 2005 wird eine nach diesem Prinzip arbeitende Versuchsanlage mit dem Namen *Wendelstein 7X* in Greifswald aufgebaut. Die Montagearbeiten waren im Mai 2014 abgeschlossen. Ende 2015 erhielt die Anlage ihre Betriebslaubnis. Seit Anfang 2016 wurde schrittweise der Forschungsbetrieb aufgenommen mit dem Ziel, die Funktionsfähigkeit dieses Konzeptes zu beweisen.

(XXX: Der weitere Text zu den physikalischen Grundlagen eines Kernfusions-Reaktors ist noch nicht verfügbar. Er wird auch den nachfolgenden Text enthalten:)

Da es sich bei dem genutzten Prozess im Sinne der Reaktionschemie um einen Prozess 2. Ordnung handelt (s. Abschnitt XXX), gilt für die Reaktionsgeschwindigkeit annähernd

$$\frac{dn}{dt} \sim n^2 \quad (7.583)$$

Als Mindest-Teilchendichte zur Aufrechterhaltung der Fusion hat sich der Wert

$$n \approx 1 \dots 2 \cdot 10^{20} \cdot \frac{\text{Teilchen}}{m^3} \quad (7.584)$$

herausgestellt. Dies ist ein eher kleiner Wert verglichen z.B. mit der Teilchendichte von Luft unter NB

$$n_{\text{Luft}}(0^\circ C; 1,01325 \cdot 10^5 \cdot Pa) = \frac{1}{22,41} \cdot \frac{kmol}{m^3} = 2,687 \cdot 10^{25} \cdot \frac{\text{Teilchen}}{m^3} \quad (7.585)$$

In einem Tokamak-Torus ist es jedoch bereits eine extreme technologische Herausforderung, ein Plasma der Dichte gem. Gl. 7.584 sicher einzuschließen. Wegen der Gl. 7.583 besteht eine einfache Möglichkeit zur Regelung der Reaktionsgeschwindigkeit in der Dosierung des Reaktionsmaterials und/oder der Beimischung einer reaktionsinerten Komponente.

Im Rahmen von Vorstudien zum Konzept des magnetischen Einschlusses gelang am **JET** (**J**oint **E**uropean **T**orus) in Culham/England am 09.11.1991 die weltweit 1. **kontrollierte Kernfusion**: Für die Dauer von $2 \cdot s$ erzeugte der Torus eine durch Kernfusion generierte Leistung von $1,8 \cdot MW$. Allerdings benötigte er hierfür eine zugeführte Leistung von $16 \cdot MW$. Im Zuge der Optimierung des Prozesses gelang es, diese Daten auf (1997) $16 \cdot MW$ für eine Dauer von $21 \cdot s$ erzeugte Leistung bei einer zugeführten Leistung von $24 \cdot MW$ zu verbessern. Der Energie-Wirkungsgrad blieb aber mit

$$\eta = 0,67 \quad (7.586)$$

immer noch deutlich unter dem wirtschaftlich relevanten Schwellwert 1,0.

Eine Vorstellung von den typischen Abmessungen dieser Anlage liefert die Abb. 25. Sie zeigt das Innere des Torus während Wartungsarbeiten im Jahr 1989.

Seit einigen Jahren sind die Forschungsaktivitäten zur Entwicklung eines Fusions-Reaktors nahezu weltweit koordiniert. Das Projekt **ITER** (**I**nternational **T**hermonuclear **E**xperimental **R**eactor; aber auch *iter* (lat.) der Weg) wurde 1985 im Rahmen von Gesprächen zwischen Michael Gorbatschow, Ronald Reagan und François Mitterrand zur atomaren Abrüstung und zu weiteren vertrauensfördernden globalen Maßnahmen als von den USA, der Sowjetunion (damals, heute Russland), Japan und der Europäischen Union (denen sich später Canada anschloss) gemeinsam geführtes und finanziertes Projekt vereinbart und im organisatorischen Rahmen des **E**uropean



Abb. 25 Torus des Kernfusions-Versuchsreaktors JET in Culham/Engl.
(Quelle: Photo cp89j der Website des EFDA-JET www.jet.efda.org)

Fusion Development Agreement EFDA gestartet. Die USA zogen sich 1998 aus innenpolitischen Gründen wieder zurück. Dafür schlossen sich im Laufe der folgenden Jahre China und Süd-Korea (2003) sowie Indien (2005) dieser Kooperation an. Der 1. praxisnahe ITER-Reaktor befindet sich seit 2007 in Cadarache/Commune de Saint-Paul-les-Durance nahe Aix-en-Provence (Département Bouche du Rhône in Frankreich) im Aufbau. Seine Baukosten bis zur Inbetriebnahme wurden ursprünglich mit $5 \cdot 10^9 \cdot \text{Euros}$ angegeben. Diese Kostenschätzung erwies sich jedoch rasch als nicht haltbar. Direkt nach dem Baubeginn kam das Projekt wegen der ständig steigenden Schätzungen der Gesamtkosten in politische Schwierigkeiten der Finanzierung, so dass nach mehreren Jahren Bauzeit zunächst nur das ITER-Verwaltungsgebäude fertiggestellt war. Aktuell (2016) schreitet dagegen der Bau zügig voran, s. auch Abb. 26, das Tokamak-Gebäude ist im Bau, die Kosten werden auf $20 \cdot 10^9 \cdot \text{€}$ geschätzt, und als voraussichtliche Fertigstellung gilt das Jahr 2025. Nach Fertigstellung und (positivem) Abschluss der Erprobung und Optimierung soll der Reaktor eine Abgabeleistung der Größenordnung $500 \cdot \text{MW}$ bei einem Bedarf an zugeführter Leistung von $50 \cdot \text{MW}$ erreichen ([30]).

Das von dieser Anlage erzeugte Plasma soll auf eine Temperatur von

$$T > 1 \cdot 10^8 \cdot K \quad (7.587)$$

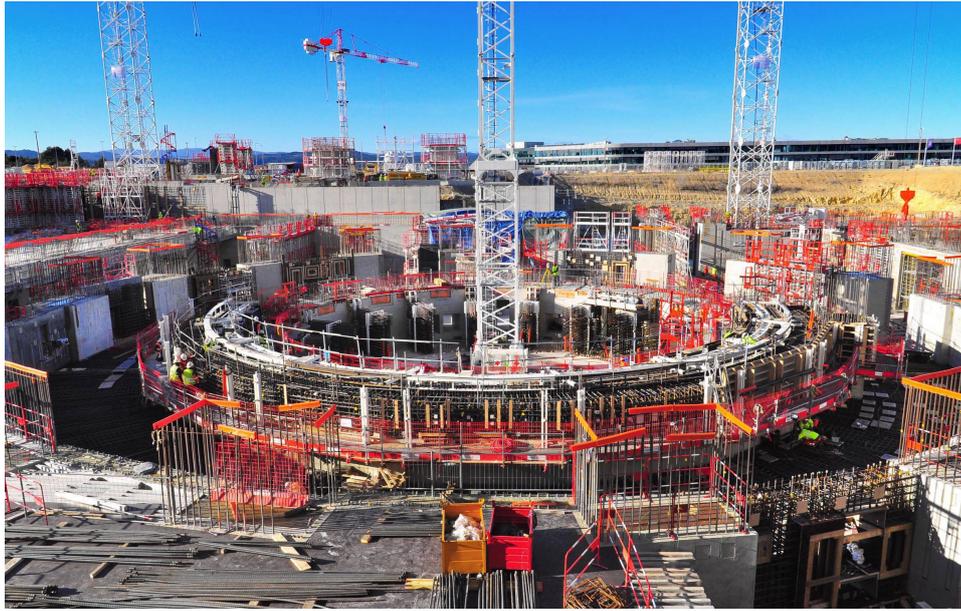


Abb. 26 Baustelle der ITER-Anlage, Stand März (copyright: ITER organization)

aufgeheizt werden können bei einem Druck von

$$p \sim XXX \cdot Pa$$

Der Satz von suprleitenden Hochfeldmagnetspulen wird im Zentrum des Toroids eine magnetische Feldstärke von

$$5,3 \cdot T$$

erhalten. Um die in der mechanischen Halterung dieser Spulen auftretenden Wirbelstromverluste zu minimieren, besteht diese Halterung aus einem glasfaserverstärktem Polymermaterial.

1. Der erforderliche Brennstoff in seiner Ausgangsform *Wasser* ist im Vergleich zu den für die Fusionsreaktion erforderlichen Mengen auf Dauer unbegrenzt und kostenlos verfügbar.
2. Der bei der Reaktion entstehende Abfall (Helium und geringe Menge an diversen Isotopen ebenfalls leichter Elemente) enthält keine Anteile an sog. LRE-Elementen (s. Abschnitt 7.17.4). Seine Radioaktivität fällt also relativ rasch ab, so dass eine Aufarbeitung wohl nicht nötig sein wird.

Inwieweit diese Bewertung der nur relativ kurze Zeit andauernden Radioaktivität auch für den Reaktor als ganzes gelten wird, kann noch nicht abschließend bewertet werden. Bestandteil der von der EFDA formulierten Forschungspolitik ist eine Materialauswahl für das Innere des Reaktors, die keine LRE-Elemente enthält oder

im Betrieb erzeugt. Ein späterer kommerzieller Fusions-Reaktor könnte dann nach Ablauf seiner Betriebsdauer zunächst für eine akzeptable Abklingdauer von 50 bis 100 Jahren lediglich versiegelt sich selbst überlassen bleiben. Danach wäre ein Abriss ohne Gefährdung des Personals und der Umwelt möglich. Es bleibt abzuwarten, ob dieses Konzept auch umsetzbar sein wird, ohne die Funktionsfähigkeit und die Rentabilität des Gesamtkonzeptes zu gefährden.

Eine ebenfalls weltweit, wenn auch mit geringeren finanziellen Mitteln untersuchte Methode zur kommerziellen Nutzung der Kernfusion ist die sog. *Laser-Fusion*. Hier wird ein Bündel von hochenergetischen Impuls-Laserstrahlen auf ein gemeinsames Target gelenkt. Dieses ist z.B. eine nur wenige *mm* große Kapsel, in der ein (H_1^2/H_1^3)-Gemisch eingeschlossen ist. Durch genügend viele Laserstrahlen ausreichend hoher Pulsenergie hofft man, in dieser Kapsel Bedingungen (T, p) zu erreichen, die für die Zündung der Kernfusion ausreichen. Die für das Zünden der Fusion erforderliche Mindest-Temperatur ist wieder von der in der Gl. 7.579 angegebenen Größenordnung. Auf Grund von Modellrechnungen erwartet man aber einen während dieses Prozesses sich aufbauenden Druck der Größenordnung

$$p_{\max}(\text{Laserfusion}) \sim XXX \cdot Pa$$

Dies entspricht etwa dem Zehnfachen des im Zentrum der Sonne während des *H*-Brennens herrschenden Drucks. Das Ergebnis wäre ein diskontinuierlicher Fusionsprozess, der sich in seiner mittleren Energieproduktionsrate einfach über die Frequenz der Laserpulse einstellen ließe. In welcher Weise bei diesem Reaktor die erzeugte Energie aus dem Reaktorkern entnommen und einer konventionellen Wärmekraftmaschine zugeführt werden könnte, ist mir bisher (2011) nicht bekannt.

Eine nach diesem Prinzip arbeitende, große Experimentieranlage mit dem Namen **Laser Megajoule** (LMJ) ist seit 2002 in Barp/Dep. Gironde (Frankreich) im Aufbau ([33]). Sie wird 176 Laserkanäle enthalten mit einer Gesamtenergie von

$$E_{Puls} \approx 1,8 \cdot ML \quad (7.588)$$

und einer Pulsdauer von

$$\delta t = 20 \cdot ns \quad (7.589)$$

Im Inneren der Kapsel mit einem Durchmesser von $2,4 \cdot mm$ soll durch den Laserpuls ein Plasma mit

$$T \approx 1 \dots 2 \cdot 10^8 \cdot K \quad (7.590)$$

$$p \approx 1 \cdot Tbar = 1 \cdot 10^{17} \cdot Pa \quad (7.591)$$

erzeugt werden.

Bei diesem Reaktorprinzip ähneln die thermodynamischen Bedingungen während jedes einzelnen Fusionsprozesses dem Prozess in einer Fusionsbombe. Daher

können Modelle und Konzepte zur Berechnung dieses Prozesses, die mit Messergebnissen an realen Fusionsexperimenten an einer Laserfusionsanlage abgeglichen worden sind, in einem nachfolgenden Schritt auch für Simulationsrechnungen des in Fusionsbomben ablaufenden Prozesses genutzt werden. Hierin ist das militärische Interesse an der Forschung zur Laserfusion begründet.

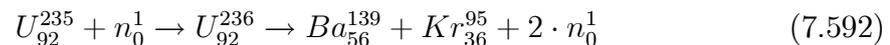
2015 wurde das 1. der aus jeweils 8 Einzelstrahlen bestehende Laserstrahl-Bündel in Betrieb genommen. Diesem sollen jeweils 2 Laserbündel pro Jahr folgen, so dass die Anlage ca. 2025 vollständig bestückt sein wird.

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Physik des Kernfusions-Reaktors und der H-Bombe* ist noch nicht verfügbar.)

7.17.3 Physik der Kernspaltungs-Bombe u. des Spaltungs-Reaktors (-)

Wir wenden uns nun der technischen Realisierung von **Kernspaltungs**prozessen zu. Diese standen historisch betrachtet am Anfang der technischen Kernphysik, da dieser Prozess technisch wesentlich leichter realisierbar ist als der Prozess der Kernfusion. Ich habe bei der Darstellung in diesem Buch die umgekehrte Reihenfolge gewählt, weil nach meiner Einschätzung die physikalischen Grundlagen der Kernfusion etwas leichter verständlich sind als die der Kernspaltung.

Als Ausgangspunkt unserer Überlegungen zum Konzept der technischen Umsetzung einer Kernspaltung wählen wir den bereits als Gl. 7.560 angegebenen Prozess



Das Uran-Isotop U_{92}^{235} ist also nicht nur ein natürlicher α -Strahler,



mit einer Halbwertszeit von

$$\tau_{1/2} = 7 \cdot 10^8 \cdot y \quad (7.594)$$

Durch Beschuss mit Neutronen wird es auch zu einer Kernspaltung vom Typ der Gl. 7.592 angeregt. Dabei ist diese Reaktionsgleichung nur als **ein** typischer Vertreter einer ganzen Klasse von Zerfallsprozessen anzusehen, bei denen immer 2 Kerne mittlerer Massenzahl erzeugt werden und zusätzlich einige Neutronen. Über alle auftretenden Prozesse gemittelt werden pro Spaltungsprozess etwa 2,3 Neutronen erzeugt. Wegen der Impulserhaltung wird die bei diesem Prozess frei werdende Reaktionsenergie von ca. $210 \cdot MeV$ überwiegend auf die beiden Zerfallskerne übertragen. Die bei diesem Prozess erzeugten Neutronen haben eine breite Energieverteilung, der Mittelwert ihrer kinetischen Energie liegt bei ca. $2 \cdot MeV$. Diese Neutronen können ihrerseits wieder einen Kernspaltungsprozess vom Typ der Gl. 7.592 auslösen. U_{92}^{235} beinhaltet also das Potenzial einer Kettenreaktion: Unter geeigneten geometrischen und physikalischen Bedingungen führt ein einzelner Startprozess vom Typ der Gl. 7.592 zu einer exponentiell ansteigenden Anzahl von Folgeprozessen, die alle den Neutronenstrom innerhalb der Uranprobe ihrerseits weiter ansteigen lassen. Wenn

im Zuge dieses Ablaufs nicht andere Vorgänge einsetzen, die in der Lage sind, diesen Ablauf ausreichend schnell wieder abubrechen, kommt dieser Prozess erst zum Stillstand, wenn das vorhandene Material an U_{92}^{235} nahezu vollständig umgesetzt ist. Das ist der Ablauf einer Kernspaltungs-Explosion.

Damit diese Kettenreaktion ablaufen kann, müssen jeweils 2, 3 erzeugte Neutronen im Mittel mindestens 1 neuen Spaltungsprozess ausgelöst haben, bevor sie die Uranprobe verlassen konnten (s. hierzu auch Abschnitt 7.18.3). Diese Uranprobe muss daher offenbar eine gewisse Mindestgröße haben. Diese Überlegung führt zu der Definition der kritischen Masse M_{krit} eines spaltfähigen Materials. Dieser Wert ist insbesondere von Einzelheiten des dominierenden Spaltungsprozesses abhängig und zusätzlich außer von der Geometrie des Probekörpers insbesondere von seiner chemischen und Isotopen-Zusammensetzung. Isotopen-reines U_{92}^{235} in Kugelform hat eine kritische Masse von ca.

$$M_{krit}(U_{92}^{235}) \approx 49 \cdot kg \quad (7.595)$$

entsprechend einem Kugeldurchmesser von

$$D(M = 49 \cdot kg) = \sqrt[3]{\frac{M}{m} \cdot \frac{6}{\pi}} = 17 \cdot cm \quad (7.596)$$

Dieser Wert lässt sich durch ergänzende konstruktive Maßnahmen stark beeinflussen. Eine Ummantelung des Probekörpers mit einer Neutronen reflektierenden Schicht erniedrigt z.B. die kritische Masse deutlich. Durch eine Ummantelung der Urankugel mit einer $30 \cdot cm$ dicken Stahlschicht sinkt die kritische Masse auf

$$M_{krit}(U_{92}^{235}; 30 \cdot cm \text{ Stahl}) \approx 17 \cdot kg \quad (7.597)$$

In wässriger Lösung lässt sich dieser Wert bis auf

$$M_{krit}(U_{92}^{235}; \text{wässr. Lösg.}) \geq 0,6 \cdot kg \quad (7.598)$$

reduzieren.

Der Spaltungsquerschnitt σ (s. Absatz S. 751) für die Uranspaltung durch Neutronen hängt stark von der Energie der Neutronen ab. Für thermische Neutronen beträgt er

$$\sigma_{Spaltung} \{U_{92}^{235}; E_{kin}(n_0^1) \approx 25 \cdot meV\} = 582 \cdot barn \quad (7.599)$$

und für schnelle Neutronen kurz nach ihrer Entstehung durch die Uran-Spaltung

$$\sigma_{Spaltung} \{U_{92}^{235}; E_{kin}(n_0^1) \approx 2 \cdot MeV\} \approx 1,2 \cdot barn \quad (7.600)$$

Wir schätzen die bei diesen beiden Situationen relevanten Zeitkonstanten ab durch eine grobe Näherungsrechnung. Hierzu berechnen wir zunächst die mittlere Geschwindigkeit dieser Neutronen. Ihre kinetische Energie ist in beiden Fällen noch klein

gegen die Ruheenergie von $939,6 \cdot \text{MeV}$, so dass wir die Näherung der Newtonschen Mechanik verwenden dürfen,

$$v(n_0^1) \approx \sqrt{\frac{2 \cdot E_{kin}}{M}} \quad (7.601)$$

Die mittlere Zeit, während der sich ein erzeugtes Neutron innerhalb der Urankugel aufhält, ist demnach von der Größenordnung

$$\Delta t \sim R \cdot \sqrt{\frac{M}{2 \cdot E_{kin}}} = \frac{R}{c_0} \cdot \sqrt{\frac{939,6}{2 \cdot E_{kin}}} \quad (7.602)$$

$$= 4,3 \cdot 10^{-9} \cdot s \quad \text{f. } E_{kin} = 2 \cdot \text{MeV} \quad (7.603)$$

$$= 39 \cdot 10^{-6} \cdot s \quad \text{f. } E_{kin} = 25 \cdot \text{meV} \quad (7.604)$$

Die für die Kernspaltung durch schnelle Neutronen geltende Zeitkonstante von einigen *ns* ist um viele Größenordnungen kleiner als jeder thermisch gesteuerte Prozess des Energietransportes. Es kommt also zu einer quasi-spontanen weitgehend vollständigen Spaltung des zu einer überkritischen Masse vereinigten Urans. Die dabei frei werdende Reaktionsenergie der Größenordnung also zu einer Explosion. Die für die Kernspaltung durch thermische Neutronen geltende Zeitkonstante von einigen -zig μs unterbindet nicht mehr vollständig jede Art von thermischen Ausgleichströmungen. Sie ermöglicht jedoch noch nicht technische Eingriffe zur Beeinflussung des integralen Kernspaltungsprozesses. Er gelingt erst auf dem Umweg über den nun erläuterten zusätzlichen Neutronenstrom:

Die durch die Kernspaltung entstehenden Kerne mittlerer Ordnungszahl haben alle einen deutlichen Neutronenüberschuss und sind daher radioaktiv. Sie bauen diesen Überschuss meist über β^- -Zerfälle ab, also nach dem Schema



Dabei entsteht gelegentlich ein derart hoch angeregter Kern, dass er spontan ein Neutron emittiert. Bezogen auf den Kernspaltungsprozess, der diese Reaktionskette angestoßen hat, ist dieser Vorgang der Neutronenemission im Mittel um die Halbwertszeit des β^- -Zerfalls verzögert. Der Beitrag dieser *verzögerten Neutronen* zum gesamten Neutronenstrom beträgt knapp 1%. Da hierbei viele unterschiedliche Zwischenkerne beteiligt sind, ist die Verzögerungszeit sehr breit verteilt. Die Gruppe von Kernen, die den grössten Beitrag zu diesem Neutronenstrom leistet, hat eine Halbwertszeit nahe $2 \cdot s$. Diese Zeitkonstante ist für technische Eingriffe zugänglich.

Die Kernspaltungsbombe (-)

Eine Kernspaltungsbombe z.B. auf der Basis von U_{92}^{235} enthält eine Menge an spaltbarem Material, die deutlich größer ist als die für den Einfang von schnellen Neutronen geltende kritische Masse. Diese Menge an Uran ist zunächst in eine ausreichende Anzahl von Einzel-Elementen aufgeteilt und räumlich von einander getrennt. Die Bombe wird gezündet, indem durch eine konventionelle (chemische)

Sprengladung diese Einzel-Elemente synchron auf einander schießt. Hierfür existieren unterschiedliche konstruktive Konzepte.

Bei der Materialauswahl und anderen Entscheidungen strebt man folgende Teilziele an:

- eine möglichst kleine kritische Masse M_{krit} ; hierdurch wird die konstruktive Ausführung vereinfacht;
- eine möglichst große Halbwertszeit $\tau_{1/2}$ für den spontanen Zerfall des spaltfähigen Materials; dieser Prozess schränkt die zulässige Lagerungsdauer der fertigen Bombe ein;
- eine ausreichend kleine Zeitkonstante des exponentiellen Anstiegs des Neutronenstroms in der Bombe und damit der Energiefreisetzung; hierdurch erhöht sich die Sprengwirkung der Bombe. Ein typischer Wert dieser Größe ist

$$\tau_{\text{Anstieg}} \approx 10^{-8} \cdot s \quad (7.606)$$

Um nun die Sprengkraft einer Kernspaltungsbombe weiter zu steigern, muss man:

1. Das Uran möglichst lange zusammenhalten, z.B. für die Dauer von $0,5 \cdot \mu s$. Dies lässt sich durch die konzeptionelle Nutzung der Druckwelle der konventionellen Auslöse-Sprengung erreichen.
2. Die Kettenreaktion mit einem möglichst hohem Neutronenstrom beginnen. Hierzu schaltet man im Moment der Zündung eine zusätzliche Neutronenquelle ein z.B. durch folgende konstruktive Ergänzung: Von den einzelnen Teilen des Bombenmaterials, die jedes für sich genommen eine unterkritische Masse besitzen und durch die Zündung mit konventionellem Sprengstoff auf einander geschossen werden, ist im Kontaktbereich 2-er dieser Teile jeweils das eine Teil Polonium-beschichtet und das andere Beryllium-beschichtet. Über die in der Polonium-Schicht spontan ablaufende Reaktion



wird so im Moment des mechanischen Kontaktes ein Strom von α -Teilchen auf die Berylliumschicht gelenkt und in dieser die Reaktion



ausgelöst. Dies entspricht dem spontanen Einschalten einer starken Neutronenquelle.

Die 1. Realisierung einer *Kernspaltungsexplosion* gelang den USA im Verlauf ihrer als *Manhattan-Projekt* bezeichneten Anstrengungen, noch während des 2. Weltkrieges die Kernspaltungsbombe bis zu ihrem konkreten Einsatz zu entwickeln. Am 16.07.1945 zündeten sie die mit dem Code-Namen *Trinity* bezeichnete Bombe auf dem Versuchsgelände nahe Alamogordo in New Mexico. Es war eine Plutonium-Bombe und entwickelte eine Sprengkraft von $20 \cdot kT$. Das hierfür eingesetzte Plutonium war in Forschungsreaktoren erbrütet worden, die im Rahmen dieses Manhattan-Projektes für die Bestimmung kernphysikalischer Kenndaten aufgebaut und über Jahre hinweg betrieben worden waren, insbesondere auf der sog. *Hanford Site* im Staat Washington (s. hierzu auch Abschnitt 7.17.4). Der konstruktive Aufbau dieser Bombe entsprach der 3 Wochen danach über Nagasaki/Japan abgeworfenen, als *Fat Man* bezeichneten Bombe.

Der reale militärische Einsatz dieser Waffe erfolgte noch im selben Jahr, nämlich am 06.08.1945 auf Hiroshima und am 09.08.1945 auf Nagasaki (s. Abb. 27), beides mittelgroße Städte in Japan mit damals ca. 250.000 Einwohnern. Durch jede dieser beiden Bomben wurden jeweils 70.000 bis 80.000 Menschen sofort getötet. Weitere 160.000 erlagen bis Ende 1946 unter schrecklichen Qualen ihren Verunstaltungen. Eine nicht genau dokumentierte Zahl von Menschen starb in den darauf folgenden Jahren und Jahrzehnten an den Spätfolgen der starken Strahlenbelastung.

Die schrecklichen Verwüstungen, die durch diese beiden Bomben verursacht wurden, führten nicht nur zur baldigen Kapitulation des Staates Japan. Sie waren auch eine (bis heute erfolgreiche) Warnung an die späteren sog. Atommächte (USA, UdSSR, Großbritannien, Frankreich, VR China und weitere), die in ihren Waffenslagern vorhandenen Atombomben nicht wirklich einzusetzen.

Die Abb. 28 dokumentiert, mit welchem Zynismus die Militärführung der Atommächte im Zuge ihrer Atomwaffen-Tests das Leben und die Gesundheit ihrer Soldaten massiv gefährdeten. Es zeigt eine Kompanie der US Army, wie sie während eines Manövers in der Wüste Nevada am 01.11.1951 eine Atombomben-Explosion aus einer Entfernung von $11 \cdot km$ beobachtet. Das Photo wurde $8 \cdot min$ nach Zündung der Bombe aufgenommen.

Der Kernspaltungs-Reaktor (-)

Ist das angestrebte Ziel die Entwicklung einer Kernspaltungsreaktors zur Erzeugung von elektrischer Energie, so steht die Beherrschbarkeit des Kernspaltungsprozesses im Vordergrund der Bemühungen. Anstelle eines Explosionsverlaufs wird nun ein Prozess benötigt,

- der sich kontrolliert von der Leistung 0 auf eine in weiten Grenzen vorgebbare Nennleistung hochfahren lässt;
- der in diesem Betriebszustand eine sichere Regelung der abgegebenen Leistung auch bei starken Änderungen von anlagen-externen Umgebungsbedingungen

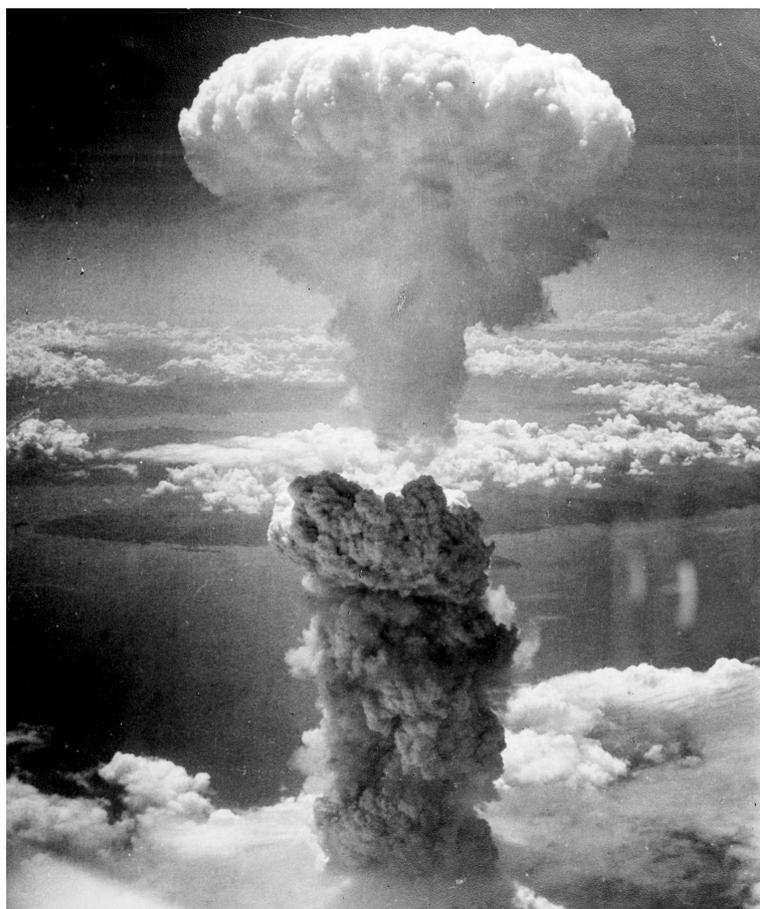


Abb. 27 Explosion der am 09.08.1945 über Nagasaki abgeworfenen Kernspaltungsbombe, aufgenommen aus einer der am Angriff beteiligten B-29-Bomber (Quelle: Dieses Bild wurde von einem Angestellten der U.S. Military oder des Department of Defense aufgenommen. Es ist daher Bestandteil der *public domain*.)

(extreme Wetterbedingungen, extreme Wasserstände der benachbarten Flüsse und Meere etc.) sicherstellt;

- der sich jederzeit auch wieder aus diesem Betriebszustand ohne Beeinträchtigung der Funktionsfähigkeit der Anlage in den Zustand der Leistung 0 herunterfahren lässt;
- der sich im Gefahrenfall möglichst umgehend abschalten lässt. In diesem Fall wird in Kauf genommen, dass danach ein Wiederanfahren evtl. erst nach gewissen Instandsetzungsarbeiten möglich ist.

Nicht nur auf Grund dieser Sicherheitslage, sondern auch um die erforderlichen Neutronenflüsse zu reduzieren, wird bei Kernspaltungs-Reaktoren auf die sog.



Abb. 28 Soldaten der US Army beobachten aus 11 km Entfernung die Explosion der Atombombe Buster Dog-Jangle
(Quelle: http://www.archives.gov/exhibits/picturing_the_century/images/postwar_078_v121.jpg)

Moderation der durch Spaltung erzeugten Neutronen nicht verzichtet. Ziel dieses zwischen 2 Spaltungsprozesse eingeschalteten Prozesses ist es, die kinetische Energie der Neutronen um mehrere Größenordnungen zu reduzieren, ohne hierbei allzu viele Neutronen durch Einfangprozesse zu verlieren. Dieses Vorgehen hat eine Reihe von Vorteilen:

1. Der Wirkungsquerschnitt von $10^2 \cdot \text{barn}$ bis $10^3 \cdot \text{barn}$ für die Kernspaltung durch thermische Neutronen ist etwa um den Faktor 10^2 bis 10^3 größer als der von Neutronen einer kinetischen Energie im Bereich von $100 \cdot \text{MeV}$. Hierdurch wird die kritische Masse stark reduziert.
2. Die für das Regelverhalten des Reaktors entscheidende Kenngröße ist nun die sich bei einer spontanen Änderung der sonstigen Bedingungen des Reaktors ergebende Anstiegszeit für den Strom an thermischen Neutronen im Reaktor. Wegen der nun zwischengeschalteten Kaskade von Streuprozessen ist diese mit

$$\tau \sim 10^{-4} \cdot s \quad (7.609)$$

stark verlängert. Allerdings ist diese Zeitkonstante immer um mehrere Größenordnungen kleiner als die technisch erreichbare Zeitkonstante eines mechanischen Stellgliedes innerhalb eines Regelkreises.

Als Moderatormaterial eignen sich Elemente mit niedriger Massenzahl, da dann wegen der nicht allzu großen Massenunterschiede zwischen den beiden Stoßpartnern bei jedem Stoß auch ein signifikanter Energieübertrag stattfindet. Der Einfang-Wirkungsquerschnitt für Neutronen lässt sich dadurch reduzieren, dass man Isotope einsetzt, die bereits relativ viele Neutronen enthalten. Im Ergebnis ist sog. *schweres Wasser* als Moderator besonders gut geeignet, Wasser also aus normalem Sauerstoff O_8^{16} und dem als Deuterium bezeichneten Wasserstoff-Isotop H_1^2 . Aus Kostengründen arbeiten nahezu alle heute eingesetzten Kernspaltungs-Reaktoren jedoch mit normalem Wasser als Moderator. Man bezeichnet sie daher auch als *Leichtwasser-Reaktoren*.

Als Uran-Brennmaterial kommt nicht etwa reines U_{92}^{235} zum Einsatz, sondern - primär aus Kostengründen - auf einen Anteil von ca. 4% an U_{92}^{235} angereichertes natürliches Uran, chemisch gebunden als Urandioxid UO_2 . Dieses wird in Form von kleinen Tabletten von ca. $4 \cdot \text{mm}$ Durchmesser, sog. *Pellets*, in mehrere m lange Rohre aus einem Metall mit möglichst kleinem Absorptionsquerschnitt für Neutronen (meist eine Zirkon-reiche Legierung) gefüllt. Anschließend werden zur Verbesserung der Wärmeleitung zwischen den Pellets und der Rohrwandung die Rohre mit Helium-Gas gefüllt und gasdicht verschlossen. Dieses sind die sog. *Brennstäbe* des Reaktors. Das Brennmaterial liegt also nicht in Form einer einzigen kompakten Masse vor, sondern räumlich verteilt auf eine große Zahl von i.a. mehreren 100 Brennstäben.

Die entscheidende Kenngröße des Kernspaltungsprozesses ist nun die *Neutronen-Reproduktionsrate* k_n . Zu ihrer Definition betrachten wir ein Neutron, kurz bevor

es einen Kernspaltungsprozess auslöst. Danach verfolgen wir das Schicksal der bei diesem Prozess erzeugten im Mittel 2,3 Neutronen beim Durchgang durch den Reaktor. Die Anzahl dieser Neutronen, die schließlich wieder einen Kernspaltungsprozess auslösen, ist - über das Ensemble aller Neutronen gemittelt - mit der Reproduktionsrate k_n identisch. Wir unterscheiden folgende Zustände des Reaktors:

$$k_n < 1,0 ; \text{ der Zustand des Reaktors ist unterkritisch} \quad (7.610)$$

$$k_n = 1,0 ; \text{ der Zustand des Reaktors ist stationär} \quad (7.611)$$

$$k_n > 1,0 ; \text{ der Zustand des Reaktors ist überkritisch} \quad (7.612)$$

Ein Reaktor in einem unterkritischen Zustand wird erlöschen, d.h. in den Zustand ohne jede Spaltungsreaktion übergehen, sofern nicht durch äußere Maßnahmen der Wert von k_n erhöht wird. Ein Reaktor in einem überkritischen Zustand wird durchbrennen, d.h. die erzeugte Energie wird sehr stark anwachsen, sofern nicht durch äußere Maßnahmen der Wert von k_n erniedrigt wird. Da für eine derartige Regelung auch Anlagenteile mechanisch bewegt werden müssen, ist ein Prozess mit einer internen Einstellzeit von der in der Gl. 7.606 angegebenen Größenordnung für diese Anwendung völlig ungeeignet. In der Tat ist das spaltfähige Material U_{92}^{235} nur deshalb auch als Brennmaterial für einen Kernspaltungs-Reaktor tauglich, weil dieser Atomkern außer der auf den Stoßprozess nahezu unverzögert erfolgenden Kernspaltungsreaktion gem. Gl. 7.592 auch einen Spaltungsprozess ausführt, der in der Gesamtbilanz mit dem Prozess nach Gl. 7.592 identisch ist, aber relativ zum auslösenden Stoßprozess um eine Zeit δ verzögert ist, für die gilt:

$$\delta(\text{verzögerte Spaltung}) = 10^{-3} \cdot s \dots 1 \cdot \text{min} \quad (7.613)$$

$$\langle \delta_{\text{verz.}} \rangle \sim 1 \cdot s \quad (7.614)$$

Bei U^{235} resultieren etwa 0,75% des Neutronenflusses aus verzögerten Prozessen. Solange es also gelingt, den Reaktor in einem Arbeitsfenster zu halten, in dem er ohne die verzögerten Prozesse deutlich unterkritisch ist, kann die Feinregelung mit Steuerungselementen erfolgen, die eine Einstell-Zeitkonstante im Bereich $\lesssim 1 \cdot s$ haben. Diesen Arbeitsbereich bezeichnet man als *prompt unterkritisch*.

Zur Regelung des Neutronenflusses auf einen Wert, der der Bedingung

$$k_n = 1 \quad (7.615)$$

entspricht, werden Stäbe aus Neutronen absorbierendem Material (meist geeignete Verbindung von Bor, Indium, Silber oder Cadmium) unterschiedlich weit in das Reaktorbecken eingefahren. Zusätzlich enthält der Reaktor noch eine Reihe von sog. Sicherheitsstäben aus ebenfalls Neutronen absorbierendem Material. Diese sind im Normalbetrieb aus dem Reaktor herausgefahren und dienen als Möglichkeit der Schnellabschaltung im Sicherheitsfall.

Die aus diesen Teilkonzepten resultierende Gesamtkonzeption eines Kernspaltungskraftwerks ist in der Abb. 29 stark vereinfacht dargestellt: Der Reaktorkern enthält

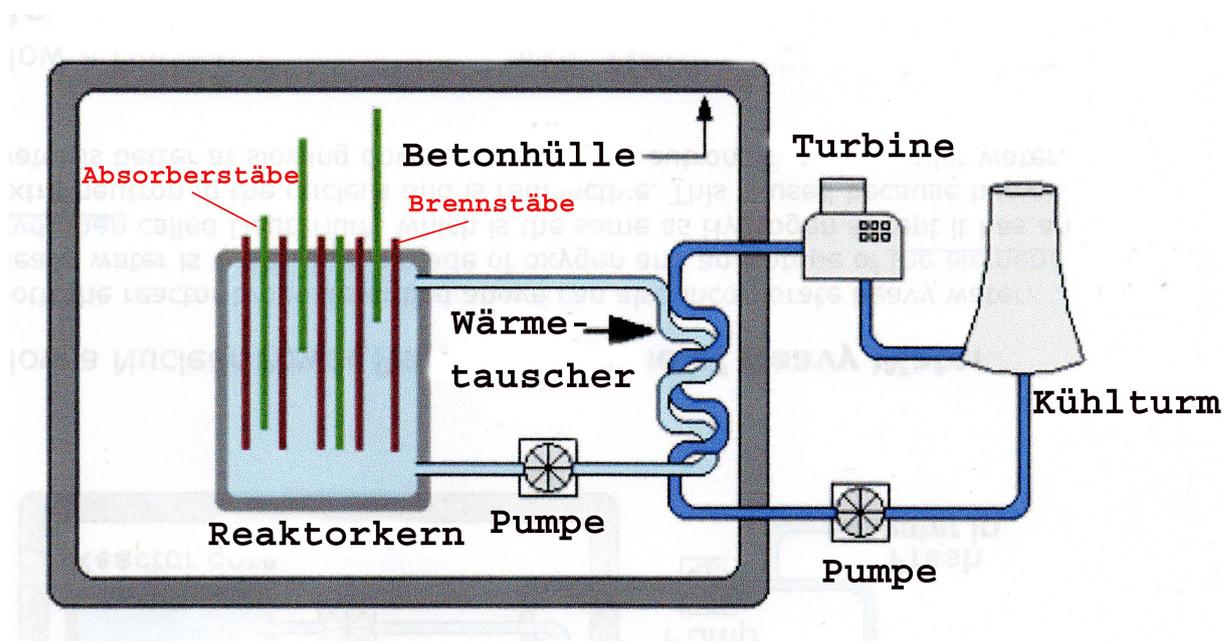


Abb. 29 Funktionsprinzip eines Kernspaltungsreaktors

den flüssigen Moderator *Wasser*, in den in regelmäßiger Anordnung die Brennstäbe eingetaucht sind. Zwischen diesen befinden sich die zur Regelung der Spaltungsrate des Reaktors dienenden Absorberstäbe. Die zur Notabschaltung des Reaktors dienenden Absorberstäbe sind herausgefahren. Die von der Kernspaltung erzeugte Energie heizt das Moderator-Wasser auf, das diese Wärmeenergie über den Wärmetauscher an den externen Wasserkreislauf abgibt. Ein typischer Arbeitspunkt in einem sog. **Leichtwasser-Siedereaktor (LWSR)** ist

$$p \approx 70 \cdot \text{bar} ; T \approx 290^\circ \text{C} \quad (7.616)$$

Dieser Wasserdampf treibt die Turbine an, die mechanisch an einen Generator zur Erzeugung von elektrischem Strom gekoppelt ist. Die im Wasser des externen Kreislaufes verbliebene Wärmeenergie wird (ungenutzt) über einen Kühlturm an die Umgebung abgegeben.

Die den Reaktorkern umschließende Hülle aus druckfestem Beton dient insbesondere als Strahlungs-Abschirmung der Außenwelt, aber auch als Sicherheitselement im Fall eines Reaktorunfalls mit unkontrolliertem Temperatur- und Druckanstieg im inneren Kreislauf des Reaktors.

Die 1. kontrollierte Kernspaltungsreaktion gelang im Rahmen des Manhattan-Projektes (s. o.) 1942 in Chicago mit dem als *Chicago Pile 1* bezeichneten Forschungsreaktor. Er benutzte natürliches Uran als Brennstoff, Graphit als Moderator und Cadmium-Stäbe als Steuerungselemente. Der 1. zur Erzeugung von

elektrischem Strom installierte kommerzielle Kernspaltungsreaktor nahm im Juni 1954 in Obrinsk nahe Moskau seinen Betrieb auf. Er hatte eine elektrische Anschlussleistung von $5 \cdot MW$. Die in West-Europa zum Zweck der Erzeugung von elektrischen Energieströmen installierten Kernspaltungs-Reactoren sind ausschließlich vom Typ des Leichtwasser-Reaktors. Die typische reale Anordnung einer derartigen sog. Kernkraftwerks der Größenordnung $1 \cdot GW$ elektrischer Leistung, bestehend aus dem eigentlichen Kernspaltungs-Reaktor, dem Wärmetauscher zur Erzeugung des Heißdampfes, der Turbinenanlage und dem elektrischen Generator, ist in der Abb. 30 wiedergegeben. In dieser Luftaufnahme verbirgt sich der eigentliche



Abb. 30 Das Kernkraftwerk Lingen/Ems

Kernreaktor unter der in der unteren Bildmitte positionierten, mit (a) markierten halbkugelförmigen Betonkuppel. Direkt dahinter liegt die Turbinen- und Generator-Halle. Der überwiegende Teil der am Ausgang der Turbinen anfallenden Abwärme in Form von Niederdruck-Wasserdampf im Temperaturbereich $\gtrsim 100 \cdot ^\circ C$ kann aus technischen/kommerziellen Gründen nicht weiter genutzt werden. Dieser Wärmestrom wird daher nach Passieren eines Kühlkreislaufs zur weitgehenden Rückgewin-

nung des Wassers als Feuchtluftströmung über den die Abb. 29 dominierenden, mit (b) markierten Kühlturm an die Atmosphäre abgegeben.

Das in der Abb. 29 vorne links nur noch z.T. wiedergegebene Gebäude ist das Zwischenlager für die im Kraftwerk verbrauchten Brennelemente. Den Auflagen der Genehmigungsbehörde entsprechend ist dieses Gebäude in der Lage, die während einer Betriebs-Laufzeit von $40 \cdot y$ anfallenden abgebrannten Brennelemente aufzunehmen.

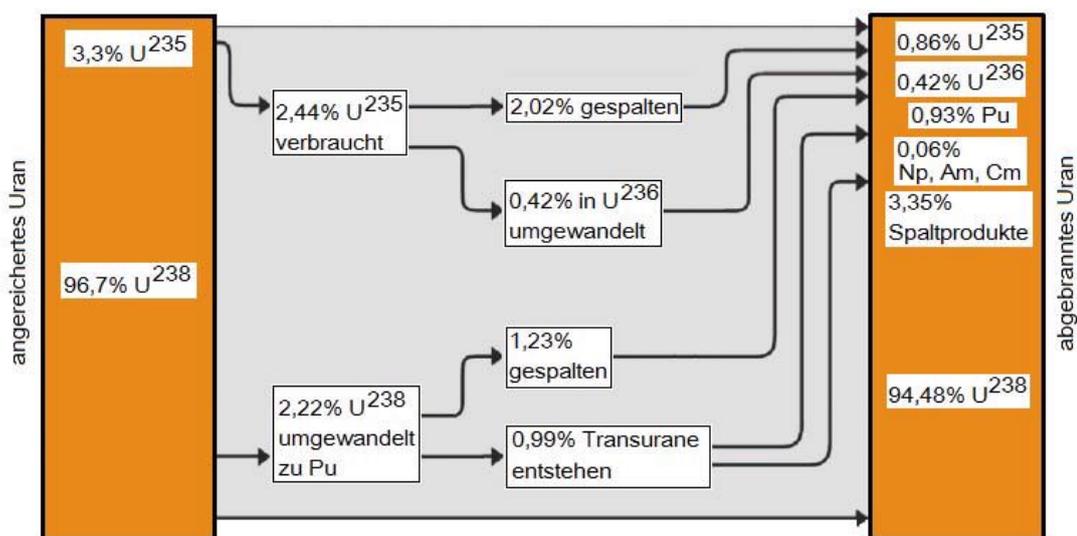


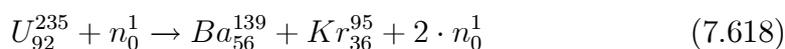
Abb. 31 Atomare Zusammensetzung eines frischen (links) und einer abgebrannten Brennstabes (Angaben in Massen-%)

Welche kernphysikalischen Prozesse in einem Kernreaktor in der technischen Realität zu welchen relativen Anteilen wirklich ablaufen, erkennt man recht detailliert durch die Betrachtung der Veränderungen in der atomaren Zusammensetzung, die an einem typischen sog. Brennstab im Zuge seines Einsatzes in einem Kernreaktor auftreten. Diese sind in der Abb. 31 dargestellt. Der Kernbereich eines frischen Brennstabs besteht in seinem Anlieferungszustand nahezu aus reinem Uranoxid mit einem auf

$$\frac{N(U^{235})}{N(U)} = 0,033 \quad (7.617)$$

angereichertem Anteil an dem spaltfähigen Isotop U^{235} . Während des Betriebs des Kernreaktors treten an diesem Material insbesondere die in der Abb. 31 genannten Prozesse auf:

1. Der primär gewünschte Spaltungsprozess von U^{235} erzeugt 2 meist deutlich unterschiedlich große Spaltkerne und mehrere Neutronen, z.B.



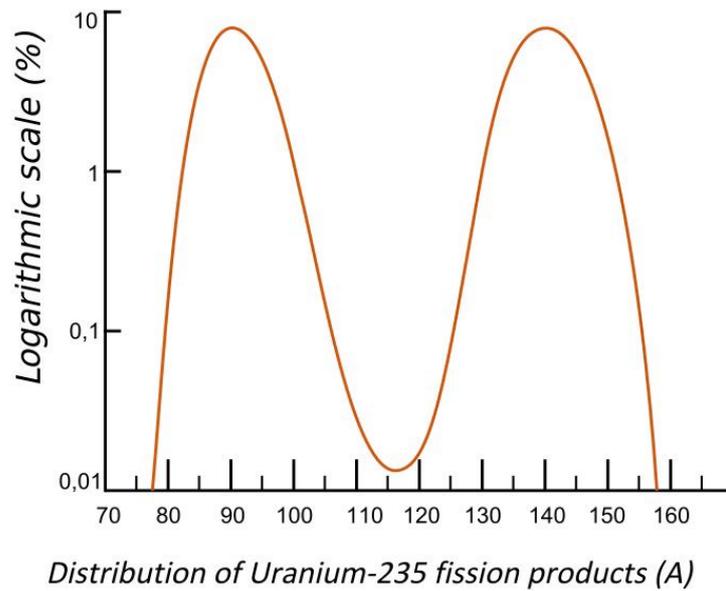


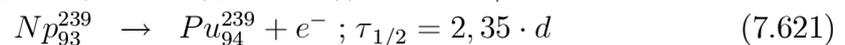
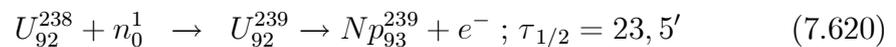
Abb. 32 Massenzahlverteilung der Spaltprodukte bei der Uranspaltung (Quelle: Wikimedia-Commons; das Bild unterliegt der License CC BY-SA 3.0; der Autor ist Mubs)

Hierbei entstehen die unterschiedlichsten Spaltprodukte, insbesondere Isotope mit einer Massenzahl in der Nähe der Massenzahlen 90 und 140, s. Abb. ???. Die Verteilung zeigt ein deutliches Minimum nahe der Massenzahl 118. Zur Form dieser Verteilung s. auch die Aufgabe 15.

2. Ein nicht unwesentlicher Anteil des U^{235} wird in das langzeit-radioaktive Isotop U^{236} umgewandelt und steht daher als Brennstoff nicht mehr zur Verfügung:

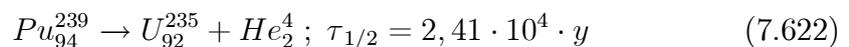


3. Andererseits wird während dieser Brenndauer etwa die gleiche Anzahl von U^{238} -Atomkernen in Plutonium Pu_{94}^{239} umgewandelt, wie U_{92}^{235} -Kerne gespalten werden:



Die beiden spontanen β -Zerfälle in dieser Kette haben relativ kleine Halbwertszeiten.

4. Pu_{94}^{239} zerfällt spontan, aber mit einer sehr langen Halbwertszeit:



Die übrigen Pu_{94}^{239} -Kernen sind entweder noch als solche in dem abgebrannten Brennstab vorhanden oder sie sind bereits in andere Transurane umgewandelt worden.

(XXX: Der weitere diese Abb. erläuternde Text ist noch nicht verfügbar.)

Risiken des Kernspaltungsreaktors (-/-)

(XXX: Der Text des Absatzes *Risiken des Kernspaltungsreaktors* ist noch nicht verfügbar.)

7.17.4 Die Lagerung radioaktiver Abfälle (-)

Jede kernphysikalische Aktivität erzeugt radioaktiven Abfall: Jedes Experiment in einem kernphysikalischen Labor, jeder Einsatz einer kernphysikalischen Methode der medizinischen Diagnostik oder Therapie, jede Forschungstätigkeit zur Entwicklung neuer Technologien zur kommerziellen oder militärischen Nutzung der Kernenergie. Von der Menge an anfallendem radioaktiven Abfall primär relevant ist aber der **Betrieb** der bereits im technischen Einsatz befindlichen Kernkraftwerke (s. Abschnitt 7.17.3), aber genau so die bergmännische Gewinnung von uranhaltigen Erzen sowie deren Aufarbeitung zu ausreichend reinem Uran und dessen Weiterverarbeitung zu den sog. *Brennstäben*. Insbesondere die zuletzt genannten kernphysikalischen Prozesse erzeugen in den für sie entwickelten Apparaturen ständig neues radioaktives Material. Außerdem verändern die radioaktiven Bestrahlungen das Arbeitsmaterial des Prozesses in einer Weise, dass es ständig oder zumindest im Zuge einer regelmäßigen Wartung aus der Apparatur entfernt werden muss, um die typgemäße Funktion der Apparatur wieder gewährleisten zu können. Alle diese Abfälle sind i.a. hoch-radioaktiv. Außerdem muss die Umwelt auf Dauer verlässlich gegenüber der in dieser Apparatur auftretenden radioaktiven Strahlung abgeschirmt werden. Diese die gesamte Apparatur umschließende Abschirmhülle ist während des gesamten Betriebs der Apparatur dieser radioaktiven Strahlung ausgesetzt und wird daher, zumindest in ihrer innersten Schicht, im Laufe der Betriebszeit zunehmend selbst radioaktiv. Bei jeder Stilllegung und bei jedem darauf folgenden Abriss fällt also ebenfalls radioaktiver Abfall an. Dieser aus der kontrollierten Stilllegung von Anlagen herrührende Abfall ist i.a. nur mäßig radioaktiv. Schließlich existiert aktuell weltweit eine nicht unerhebliche Menge von radioaktivem Abfall, der durch verschiedene Sünden der Vergangenheit entstanden ist und wohl auch in der Gegenwart neu entsteht und in der nahen Zukunft weiter entstehen wird:

- Radioaktiv verseuchte Böden auf dem Gelände früherer kernphysikalischer Forschungs- und Produktionsstätten. Als ein typisches Beispiel nenne ich die sog. *Hanford Site* im Staat Washington (USA), ein Gelände von ca. $1,5 \cdot 10^3 \cdot km^2$. Dort wurde ab 1943 Plutonium zur Herstellung von Kernspaltungsbomben produziert. Seit einigen Jahren ist ein Konsortium privater Firmen damit beauftragt, das Gelände soweit zu sanieren, dass es wieder zur allgemeinen Nutzung

freigegeben werden kann. Diese Einzelmaßnahme kostet z.Zt. ca. $2 \cdot 10^9 \cdot \text{US\$}/y$. In welcher Form die dabei entstehenden radioaktiven Abfälle gelagert/entsorgt werden, ist mir nicht bekannt.

- Radioaktiv verseuchte Böden und Pflanzen auf dem Gelände früherer Atomwaffen-Tests. Als typisches Beispiel nenne ich das Mururoa-Atoll, eine zu Französisch-Polynesien gehörende unbewohnte ca. $300 \cdot \text{km}^2$ große Insel im Süd-Pazifik. Frankreich führte hier in der Zeit von 1966 bis 1996 insgesamt 188 Kernwaffen-Tests durch, davon 41 in der Atmosphäre. Die Insel ist bis heute Sperrgebiet, eine Sanierung ist b.a.w. nicht vorgesehen. Überdies lagern in unterirdischen Schächten dieser Insel wahrscheinlich große Mengen an radioaktiven Abfällen.
- Radioaktiv verseuchte Abraumhalden neben den Bergbaugeländen zur Gewinnung von Uran-haltigen Erzen. Als ein typisches Beispiel nenne ich das Gelände der früheren *SDAG* (Sowjetisch-Deutsche Aktiengesellschaft) *Wismut* im südlichen Sachsen und Thüringen. Während des von 1945 bis 1990 andauernden Betriebes einer Vielzahl von Förderstellen und Aufbereitungsanlagen wurden insgesamt ca. $2,3 \cdot 10^5 \cdot t$ Uran dargestellt und dabei $3,1 \cdot 10^8 \cdot m^3$ Abraum und $1,5 \cdot 10^8 \cdot m^3$ Aufbereitungsrückstände erzeugt. Das hiervon betroffene Gelände umfasst ca. $37 \cdot \text{km}^2$. Seit 1990 wird das Gelände durch die staatliche Wismut GmbH saniert. Die hierfür bisher (2010) aufgelaufenen Kosten betragen $6,2 \cdot 10^9 \cdot \text{Euro}$.
- Unsachgemäße Lagerung von radioaktiven Alt-Abfällen. Als ein typisches Beispiel nenne ich das stillgelegte Salzbergwerk Asse II nahe Wolfenbüttel (Niedersachsen). Dieses wurde in den Jahren 1967 bis 1978 zur Einlagerung von (angeblich) schwach bis mittel-radioaktiven Abfällen eingesetzt. Heute ist bekannt, dass insgesamt etwa 16.100 Stahlfässer von jeweils $0,2 \cdot m^3$ unter z.T. chaotischen Umständen (s. Abb. 33) in diese Schachtanlage eingelagert wurden. Die Mehrzahl dieser Fässer wurde nicht ordnungsgemäß erfasst, so dass ihr genauer Inhalt nicht bekannt ist. Den Inhalt an Plutonium in diesen Fässern schätzt man auf insgesamt ca. $28 \cdot \text{kg}$. Heute wird an einem Rückholungskonzept für diese Abfälle gearbeitet. Die Behörden veranschlagen die dafür erforderlichen Kosten auf $2 \cdot 10^9 \cdot \text{Euro}$, andere Experten veranschlagen bis zu $6 \cdot 10^9 \cdot \text{Euro}$.
- Der Verbleib sämtlicher bisher verschrotteter atomarer Waffen, insbesondere der Raketen-Sprengköpfe, ist der Öffentlichkeit weitgehend unbekannt. Dies gilt sowohl für die im Zuge einer Modernisierung **ausgemusterten** Waffen als auch für die auf Grund von Abrüstungs-Abkommen **verschrotteten** Waffen. Es gibt gute Gründe anzunehmen, dass der daraus entstandene hochradioaktive Abfall immer noch in Zwischenlagern versteckt ist, deren Ort und Umfang der Öffentlichkeit nicht bekannt ist.



Abb. 33 Lagerung von Stahlfässern mit radioaktiven Abfällen in das Salzbergwerk Asse II (Wolfenbüttel/Niedersachsen)

- Es gibt berechtigte Zweifel, ob die derzeit in Betrieb befindlichen Anlagen zur Wiederaufbereitung abgebrannter Brennstäbe von Kernspaltungs-Reaktoren alle während dieses Betriebes anfallenden mehr oder weniger stark radioaktiven Abfälle einer ordnungsgemäßen, auf unbegrenzte Dauer angelegten Lagerung zuführen und in Zukunft zuführen werden. Es handelt sich insbesondere um die Anlagen in La Hague in der Normandie (Frankreich), Sellafield an der irischen See (England) und Majak und Tomsk (Russland). Z.B. ist sowohl von Sellafield wie von La Hague bekannt, dass die dortigen Betreiber in erheblichem Umfang radioaktiv verseuchte Flüssigkeiten in das Meer ablassen.
- Schließlich ist in vielen Fällen nicht klar, wo und unter welchen Bedingungen die (noch) nicht einer Wiederaufbereitung zugeführten abgebrannten Brennstäbe von Kernspaltungs-Reaktoren gelagert werden. Dieser Aspekt ist sehr ernst zu nehmen, zumal in den meisten Ländern keine Wiederaufarbeitungsanlage (mehr) betrieben wird. So wurde 2009 bekannt, dass der Betreiber der französischen Kernspaltungs-Reaktoren, die Fa. EDF (**E**lectricité **d**e **F**rance) einen signifikanten Anteil (ca. 13%) seiner abgebrannten, nicht aufgearbeiteten Brennstäbe nach Russland versandt hat. Dort lagern sie z.Zt. ungesichert unter freiem Himmel im Zentrum der sibirischen Stadt Sewersk (früher Tomsk 7) ([32]).

Kernphysikalische Prozesse laufen auf einer Energieskala $\geq 1 \cdot \text{MeV}$ ab, während die typischen Energien chemischer Umwandlungen im Bereich $10 \cdot \text{eV}$ und die mit konventionellen verfahrenstechnischen Methoden verfügbaren Energien im Bereich

$0,05 \cdot eV$ liegen. Es ist daher nicht überraschend, dass bis heute keine Möglichkeit gefunden wurde, die radioaktiven Zerfallsprozesse in radioaktiven Abfällen durch derartige konventionelle Techniken auch nur geringfügig zu beeinflussen. Die einzige heute verfügbare Technik der sog. *Entsorgung* besteht also darin, diese Abfälle kontrolliert zu lagern und gegenüber der vor einer radioaktiven Kontaminierung zu schützenden Umwelt ausreichend abzuschirmen. Mit dem Wort *kontrolliert* meine ich an dieser Stelle, dass

- die genaue Zusammensetzung einer jeden eingelagerten Verpackungseinheit dokumentiert ist;
- der genaue Ort der Einlagerung einer jeden dieser Einheiten ebenfalls dokumentiert ist;
- insbesondere jede dieser Einheiten gezielt wieder aus diesem Lager entnommen werden kann, z.B. um deren schadhaft gewordene Umhüllung zu erneuern.

Diese Vorgehensweise ist jedoch gerade **keine** Entsorgung, sondern lediglich eine Verschiebung der Problemlösung in die (ferne) Zukunft. Überdies werden diese 3 Voraussetzungen, die aus meiner Sicht unverzichtbar sind für eine als kontrolliert qualifizierbare Langzeitlagerung, von den aktuell benutzten oder auch nur diskutierten Lagerstätten **nicht erfüllt**. Die Mindestdauer, über die diese Abfälle auf diese Weise kontrolliert gelagert werden müssen, ergibt sich aus der Zusammensetzung und den relativen Anteilen der in diesen radioaktiven Abfällen jeweils vorhandenen radioaktiven Isotope. Diese Daten hängen stark von der Art der Apparatur ab, die diesen Abfall erzeugt hat. So enthalten die Abfälle, die bei der medizinischen Anwendung kernphysikalischer Techniken entstehen, meist ausschließlich kurzlebige radioaktive Isotope. Abfälle, die beim Betrieb von Kernreaktoren entstehen, enthalten dagegen immer die ganze Breite der möglichen Quellen für radioaktive Strahlung. Allerdings lässt sich durch eine geschickte Wahl der eingesetzten Materialien in gewissen Grenzen Einfluss nehmen auf die relativen Anteile der jeweils vorhandenen radioaktiven Isotope. Man hat also grundsätzlich die Möglichkeit, Abfälle, die ausschließlich kurzlebige radioaktive Isotope enthalten, auszusortieren und getrennt zu lagern. Für sie ist dann z.B. eine Dauer der kontrollierten Lagerung von $20 \cdot y$ ausreichend.

Die übrigen Abfälle, die auch radioaktive Isotope mit einer Lebensdauer von $10^2 \dots 10^9 \cdot y$ enthalten, müssen auf **unbegrenzte Dauer** kontrolliert und gegenüber der Umwelt abgeschirmt gelagert werden. Die derzeit immer noch diskutierten Konzepte, diese Abfälle in dafür geeigneten geologischen Schichten ausreichend tief unterhalb der Erdoberfläche zu **deponieren**, halte ich persönlich für **unverantwortlich**. Denn es handelt sich hierbei um eine **unkontrollierte, unumkehrbare** Lagerung. Und ich bezweifle, dass die genaue geologische Entwicklung eines bestimmten ausgewählten Bereichs der Erdkruste bis in eine Zeit der Größenordnung von (z.B.) $10^5 \cdot y$ verlässlich vorhergesagt werden kann.

Das Problem der Entsorgung oder Endlagerung radioaktiver Abfälle ist also weiterhin ungelöst. Und dies trotz der bereits ca. $60 \cdot y$ technischer und kommerzieller Nutzung der Kernenergie. Die USA planten ein Endlager für radioaktive Abfälle in den Yucca Mountains/Nevada. Als voraussichtliche Gesamtkosten für dieses Projekt wurden $58 \cdot 10^9 \cdot US\$$ veranschlagt. U.a. wegen massiver Widerstände des Gouverneurs und der Bevölkerung des Staates Nevada wurde dieses Projekt 2011 durch Beschluss der Bundesregierung gestoppt. Aktuell lagern die abgebrannten Kernbrennstoffmaterialien überwiegend in den Anlagen der Kernreaktoren der USA. Ihre Menge schätzt man aktuell (2012) auf $6,8 \cdot 10^4 \cdot t$. Dieser Wert steigt jährlich um etwa $2 \cdot 10^3 \cdot t$.

Eine der wenigen zumindest denkbaren Alternativen zum Konzept der andauernden kontrollierten Lagerung ist die sog. *Transmutation*. Dieses über lange Zeit nur als Gedankenexperiment diskutierte Konzept baut auf der Erkenntnis auf, dass es (zum Glück) nur wenige Elemente gibt, für die ein langlebiges radioaktives Isotop existiert, also mit einer Halbwertszeit von (z.B.) $> 40 \cdot y$. S. hierzu die Tab. auf S. 824 im Kapitel 7.20. Auffällig ist, dass - bis auf ganz wenige Ausnahmen - alle diese Elemente **Metalle** sind. Ich sehe mich z.Zt. nicht in der Lage, hierfür eine plausible Erklärung anzubieten. Vermutlich hängt dies damit zusammen, dass das Prinzip des konstruktiven Aufbaus der Elektronenhülle der Atome einerseits und das der Atomkerne andererseits verwandten Regeln gehorcht. Für die nachfolgend diskutierte Abtrennung dieser Elemente dürfte sich diese Tatsache jedoch bzgl. einer technischen Umsetzung als sehr hilfreich erweisen.

Für die weitere Diskussion werde ich diese Elemente als LRE (**L**angzeit-**r**adioaktive **E**lemente) bezeichnen. Es ist daher folgende Sequenz von Schritten zur Aufarbeitung radioaktiver Abfälle denkbar:

1. Zwischenlagerung der Primär-Abfälle für eine Abklingzeit von (z.B.) $10 \cdot y$. Dieser Schritt dient primär dem Schutz des Bedienungspersonals für die Anlagen, die zur Durchführung der nachfolgenden Schritte erforderlich sind.
2. Chemische Trennung der Abfälle in den LRE-freien Anteil und in den LRE-haltigen Rest. Hier kann man vermutlich auf chemisch-verfahrenstechnische Prozesse zurückgreifen, die aus der Metallurgie bekannt sind.
3. Zwischenlagerung des LRE-freien Anteils der Primär-Abfälle für eine weitere Abklingzeit von (z.B.) $30 \cdot y$. Danach können diese Abfälle ohne Risiko wiederverwendet oder deponiert werden.
4. Bestrahlung des LRE-haltigen Anteils mit einem Neutronenstrahl geeigneter Neutronen-Energie und Strahl-Intensität, z.B. in einem speziell hierfür konzipierten Kernreaktor. Hierdurch werden (auch) die LRE-Elemente überwiegend in andere Elemente umgewandelt, also überwiegend in Nicht-LRE-Elemente.
5. Wiederaufnahme dieses derart bestrahlten Materials in das Zwischenlager für Primär-Abfälle.

Ein *Endlager* im eigentlichen Sinne ist in diesem Konzept nicht mehr vorgesehen.

Dieses Konzept hat inzwischen den Status des Gedankenexperimentes verlassen. Es gibt heute (2010) 2 große Forschungsprojekte, die sich mit diesem Konzept befassen:

1. das Projekt EUROTRANS (**E**uropean **R**esearch **P**rogramme for the **T**ransmutation of High-Level-**N**uclear **W**aste) am KIT (**K**arlsruhe **I**nstitut of **T**echnology);
2. das Projekt MYRRHA (**m**ulti-**p**urpose-**h**ybrid **r**esearch **r**eactor for **h**igh-**t**ech **a**pplications) am SCK/CEN (**s**tudie **c**entrum voor **k**eernenergie / **c**entre d'études de l'énergie **n**ucleaire) in Mol/Belgien ([34]). ^{‡‡}

Es bleibt abzuwarten, ob und mit welchem Kostenaufwand dieses Konzept in die technische Realität umsetzbar ist, insbesondere in den erforderlichen großtechnischen Maßstab. Dabei könnte es sich als sinnvoll herausstellen, als Vorstufe zur Lösung dieser Aufgabe zunächst die Abtrennung der LRE-haltigen Abfallanteile zu erforschen. Sobald wenigstens dieser Arbeitsschritt sicher beherrscht wird, wäre man wenigstens schon in der Lage, die Menge des auf Dauer zu lagernden Abfalls deutlich zu reduzieren.

Für die Zeit bis zur erfolgreichen technischen Anwendung dieses Konzeptes (oder eines anderen) sehe ich als verantwortbare (Zwischen-)Lösung des Problems der sicheren Lagerung radioaktiver Abfälle an:

- b.a.w. unbefristete Lagerung der Abfälle in vorzugsweise oberirdisch errichteten Zwischenlagerstätten.
- Das Sicherheitskonzept dieser Zwischenlager könnte sich weitgehend an den schon jetzt z.B. in Deutschland für abgebrannte Kernreaktor-Brennelemente für die ersten 40 Jahren nach dem Ende ihres technischen Einsatzes vorgeschriebenen Lagerstätten orientieren.
- Die Kosten für diese **auf Dauer** konzipierte Lagerung sollte der Kernkraftwerksbetreiber tragen.

Ich vermute, dass bereits allein durch diese Maßnahme der aus KKW's erzeugte elektrische Energiestrom auf dem Markt nicht mehr konkurrenzfähig wäre.

Zur Problematik der Endlagerung radioaktiver Abfälle s. auch die Aufgabe 17.

^{‡‡}Myrrha ist aber auch eine Figur aus der griechischen Mythologie: Myrrha war die Mutter des Adonis, der aber durch Myrrhas Vater gezeugt wurde. Wegen der Verführung ihres eigenen Vaters wurde Myrrha von den Göttern bitter bestraft.

Ist dieser Mythos wirklich ein guter Omen für ein ehrgeiziges Forschungsprojekt (und für die beteiligten Forscher)? Das Kind wird einmal allseits bewundert werden, aber deren Erzeuger werden bitter bestraft!?

7.17.5 *Nuklearmedizin (-/-)*

(XXX: Der Kopftext des Abschnitts *Nuklearmedizin* ist noch nicht verfügbar.)

Nuklearmedizinische Diagnostik (-/-)

(XXX: Der Kopftext des Absatzes Nuklearmedizinische Diagnostik ist noch nicht verfügbar.)

HDP-Scintigraphie (-/-) (XXX: Der Text des Unterabsatzes *HDP-Scintigraphie* ist noch nicht verfügbar. Er wird auch die nachfolgende Abb. 34 und den sie erläuternden Text enthalten.) Das jeweils linke Bild ist eine Aufnahme der Frontseite

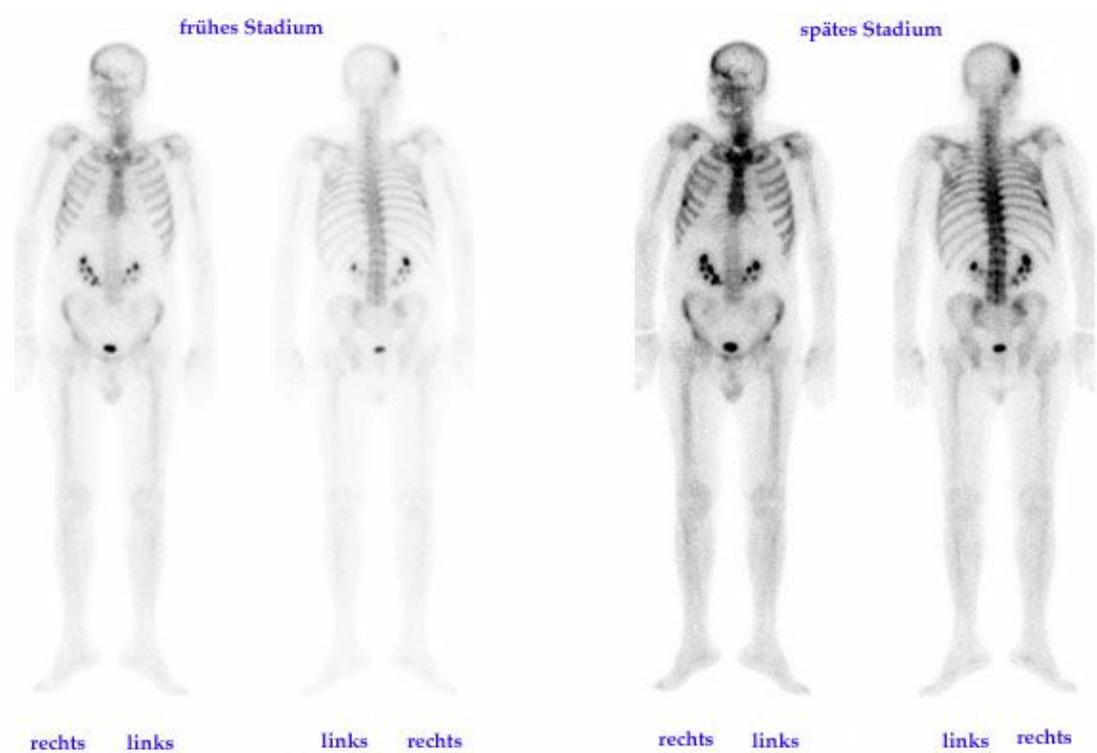
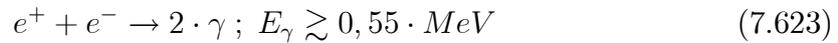


Abb. 34 Tc_{43}^{99} -Scintigraphie-Aufnahmen eines Prostatakrebs-Patienten
(a) in einer frühen Phase der Erkrankung (b) in einer späteren Phase

und das rechte eine Aufnahme mit Blick auf die Rückseite des Patienten.

Positronen-Emissions-Tomographie (-/-) Das nuklearphysikalische Prinzip der Bilderzeugung von Teilen des menschlichen Körpers mit Hilfe der **Positron-Emissions-Tomographie (PET)** beruht auf dem Einsatz eines Markers, der ein radioaktives Atom enthält, das unter Emission eines Positron e^+ zerfällt. Dieses Positron wechselwirkt

sodann direkt nach seiner Entstehung mit der Umgebung, indem es sich von einem der hierin enthaltenen Elektronen einfangen lässt und sodann gemeinsam mit ihm zerstrahlt:



Solange die kinetische Energie des erzeugten Positrons klein ist gegen die Ruheenergie des Elektrons, gilt in der Gl. 7.623 in guter Näherung das Gleichheitszeichen. Dann haben aber auch die beiden erzeugten γ -Quanten den Gesamtimpuls 0, d.h. sie breiten sich in entgegengesetzter Richtung aus. Das Auftreten eines derartigen Doppelereignisses lässt sich durch ein Koinzidenz-Verfahren sehr empfindlich und selektiv nachweisen. Es gibt praktisch kein störendes Untergrundsignal.

Damit ein radioaktives Atom bei dieser Methode zum Einsatz kommen kann, muss die Halbwertszeit seines Zerfalls in einem geeigneten Zeitfenster liegen: Diese Zeitkonstante darf einerseits nicht zu klein sein, weil sonst die radiochemische Herstellung des Markers nicht mehr gelingen kann. Schließlich darf in der Zeit vom Abschluss des Herstellungsprozesses bis zum Einsatz in den PET-Gerät nicht schon der überwiegende Teil des radioaktiven Elementes bereits wieder zerfallen sein:

$$\tau_{1/2} > \Delta t_{\text{Herstellg}} \quad (7.624)$$

Andererseits wird man versuchen, die zur Sicherstellung der erforderlichen Messgenauigkeit erforderliche Messzeit in für den Patienten zumutbaren Grenzen zu halten.

Für die technische Synthese der Markersubstanz wurde eine typische Reaktionskette entwickelt, die ich am Beispiel des Markeratoms F_9^{18} erläutern werde:

F_9^{18} lässt sich z.B. durch folgende Kernreaktion erzeugen:



Das stabile Isotop O_8^{18} ist in natürlichem O_2 in einem Anteil von 0,2 % enthalten. Üblicherweise arbeitet man an dieser Stelle mit Wasser, in dem der Sauerstoff mit dem Isotop O_8^{18} angereichert ist. Bestrahlt man nun dieses Wasser mit einem in einem Zyklotron erzeugten hochenergetischen Protonenstrahl, kommt es in merklichem Umfang zu der Kernreaktion gem Gl. 7.625 und es entsteht das Fluorid H_2OF . Dieses zerfällt in seine Ionen und kann leicht über einen Ionenaustauscher abgetrennt werden. Sodann lässt man es mit einem Precursor z.B. zu 2-FDG reagieren.

Bestrahlt man also ein Produkt, z.B. Desoxyglucose

(XXX: Der weitere Text des Absatzes *Positronen-Emissions-Tomographie* ist noch nicht verfügbar.)

Nuklearmedizinische Therapie (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Nuklearmedizinische Therapie* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts Radio-Medizin ist noch nicht verfügbar.)

7.17.6 Einheiten für die Messung radioaktiver Strahlung (-)

Schon sehr bald nach der Entdeckung der natürlichen Radioaktivität wurde die Gefährdung des Menschen durch die von ihr ausgehende Strahlung erkannt. Damit stellte sich auch die Aufgabe, neben der rein physikalisch orientierten Quantifizierung dieser Strahlung auch das Ausmaß der Gefährdung zu quantifizieren, das entsteht, wenn ein Mensch in bestimmter Weise dieser Strahlung ausgesetzt wird. Die für diese Aufgabenstellung entwickelten Messgrößen werden wir nun behandeln.

Ich beginne mit der als *Aktivität* bezeichneten Größe: Sie gibt die absolute Anzahl der in einer i.a. makroskopischen Probe pro Zeiteinheit auftretenden radioaktiven Ereignisse an:

$$A = \frac{\text{Anzahl radioaktiver Ereignisse}}{\text{Zeiteinheit}} \quad (7.626)$$

Sie differenziert also nicht nach der Art und Anzahl der bei jedem einzelnen dieser Ereignisse emittierten Strahlungs-Teilchen und auch nicht nach deren Energie. Die SI-Einheit der Aktivität

$$\frac{1 \cdot \text{Ereignis}}{1 \cdot s} = 1 \cdot Bq \quad (7.627)$$

wird als *1 · Becquerel* bezeichnet und meist mit *Bq* abgekürzt. Die früher meist benutzte Einheit

$$1 \cdot \text{Curie} = 3,7 \cdot 10^{10} \cdot Bq \quad (7.628)$$

basierte auf einer makroskopischen Probe als Arbeitsstandard, nämlich einer Probe, die *1 · g* des radioaktiven Isotops Ra_{88}^{226} enthält. Dieser Probe wurde dann die Aktivität *1 · Curie* zugewiesen.

Die Basisgröße für die von einem makroskopischen Objekt **absorbierte** Menge an radioaktiver Strahlung ist die *Energiedosis*

$$D = \frac{\text{absorbierte Energie}}{\text{Masse des absorbierenden Körpers}} \quad (7.629)$$

Als relevante Größe wird also nicht die **Anzahl** der absorbierten Strahlungs-Teilchen genommen, sondern deren (Gesamt-)**Energie**. Da diese Größe *Energiedosis* - ebenso wie alle weiteren, daraus abgeleiteten Größen - die primäre Aufgabe hat, die **Wirkung** der von einem Körper absorbierten radioaktiven Strahlung auf diesen Körper zu quantifizieren, beinhaltet die Definition gem. Gl. 7.629 2 Annahmen:

1. Die Wirkung (Schädigung) von radioaktiver Strahlung auf einen Körper ist primär von der Energie dieser Strahlung abhängig und annähernd zu ihr proportional.
2. Die spezifische Auswirkung *D* ist annähernd umgekehrt proportional zur Masse der Körpers, über die diese Bestrahlung als annähernd gleichmäßig verteilt vorausgesetzt wird.

Die Einheit

$$1 \cdot \frac{J}{kg} = 1 \cdot Gy \quad (7.630)$$

hat zu Ehren des britischen Physikers und Radiologen *Harold Gray* (* 1905 in London; † 1965 in Northwood) die Kennzeichnung *Gray* erhalten mit der Abkürzung *Gy*. Wird die Energiedosis noch auf die Bestrahlungszeit bezogen,

$$\frac{D}{\Delta t} = \frac{\text{Energiedosis}}{\text{Zeit}} \quad (7.631)$$

bezeichnet man diese Größe als die *Dosisleistung* einer radioaktiven Bestrahlung

Nun sind aber die Auswirkungen radioaktiver Strahlung insbesondere auf biologische Objekte für die verschiedenen Strahlungsarten (α -/ β -/ γ -Strahlung) derart unterschiedlich, dass die Größe Energiedosis selbst noch nicht geeignet ist, die eingangs gestellte Aufgabenstellung zu erfüllen, nämlich die Wirkung der von einem Körper absorbierten radioaktiven Strahlung auf diesen Körper zu quantifizieren. Man hat daher die Ausgangsdefinition (Gl. 7.629) um die sog. *Strahlungswichtungsfaktoren*, auch *Faktoren der relativen biologischen Wirksamkeit* genannt, ergänzt,

$$AD = D \cdot w_R(\text{Strahlungsart; Objekt}) \quad (7.632)$$

und bezeichnet die so erhaltene Größe *AD* als die *Aequivalentdosis* der radioaktiven Bestrahlung. Die für diese Größe geltende internationale Einheit ist $1 \cdot \text{Sievert}$ mit der Abkürzung *Sv*, benannt nach dem schwedischen Mediziner und Physiker *Rolf Sievert* (* 1896 in Stockholm † 1966 ebenda) Zwischen ihr und der früher benutzten Größe **radium-emanation** (*rem*) (von *emanation* (engl.) die Ausstrahlung) besteht der Zusammenhang

$$1 \cdot rem = 0,01 \cdot Sv \quad (7.633)$$

Die biologische Wirkung von radioaktiver γ -Strahlung ist in guter Näherung proportional zur Photonenenergie. Daher lag es nahe und wurde auch so festgelegt, den Strahlungswichtungsfaktor von γ -Strahlung gleich 1 zu setzen. Damit lag automatisch auch der Absolutwert der Werteskala für die Aequivalentdosis fest. Die nachfolgende Tabelle nennt einige typische Wert von Strahlungswichtungsfaktoren:

Strahlungsart	Energie	w_R
γ -Strahlung		1,0
	$< 10 \cdot keV$	5
n_1^0	$0,1 \dots 2 \cdot MeV$	20
n_1^0	$> 20 \cdot MeV$	5

Strahlungswichtungsfaktoren w_R einiger Strahlungsarten

Man hat sich darauf geeinigt, den Strahlungswichtungsfaktoren keine eigene Dimension zu geben, sondern sie als dimensionslose Angleichfaktoren zu behandeln.

Daher hat die Aequivalentdosis ebenfalls die Dimension $\frac{\text{Energie}}{\text{Masse}}$. Zur sicheren Unterscheidung zwischen den ungewichteten und den gewichteten Werten der Energiedosis hat man sich darauf geeinigt, jeden nach welchen Kriterien auch immer gewichteten Energiedosiswert immer mit der Einheit *Sievert* zu benennen. Ich halte diese Entscheidung für zumindest didaktisch ungeschickt. Sie führt ohne Grund einen Stolperstein in diese Serie von Begriffen ein, der nur zu Missverständnissen führen kann. Nach meiner Einschätzung hätte man diesen Strahlungsgewichtsfaktoren die Dimension

$$\dim(w_R) = \frac{\text{Sievert}}{\text{Gray}}$$

geben sollen.

Durch Bezug auf die Bestrahlungszeit erhält man die Größe *Aequivalent-Dosisleistung*

$$\widetilde{AD} = \frac{AD}{\text{Zeit}} \quad (7.634)$$

(XXX: Der weitere Text des Absatzes *Einheiten für die Messung radioaktiver Strahlung* ist noch nicht verfügbar.)

7.17.7 Wechselwirkung zw. Kommunikations-Strahlung u. Materie (-)

Die Zeit etwa ab der 2. Hälfte des 20. Jahrhunderts ist u.a. durch einen extremen Anstieg der technischen Möglichkeiten der Kommunikation (Radio, Fernsehen, Mobilfunk, Internet, etc. , s. Kapitel 14.8) gekennzeichnet. Damit einher geht ein extremer Anstieg der Anzahl an technischen Installationen der zugehörigen Sender und Empfänger. Damit aber stellte sich verstärkt die Frage nach den Möglichkeiten einer schädigenden Wirkung der für die Kommunikation eingesetzten elektromagnetischen Strahlungsströme. Wir wollen hierbei strikt zwischen den beiden nachfolgend beschriebenen Fragestellungen unterscheiden:

1. Welche Grenzwerte sind für die unterschiedlichen Sendertypen verbindlich vorzuschreiben, damit es nicht zu einer störenden Beeinflussung der unterschiedlichen Kommunikationssysteme kommt? Dies ist eine primär technisch-elektronische Fragestellung, die von der Kommunikationstechnik zu beantworten ist. Heute gibt es einschlägige Normen und Vorschriften, die das Problem der EMI (electromagnetic interference) regeln und die jeweiligen, nicht zu überschreitenden Grenzwerte festlegen.
2. Ist eine Schädigung von biologischem Material, insbesondere des Menschen durch elektromagnetische Strahlung möglich, die von Sendern der Kommunikationstechnik abgestrahlt wird? Ist es also gefährlich, in der Nähe von Hochspannungsmasten, Umspannwerken, Rundfunk- und Fernseh-Sendestationen, Relais-Stationen der Mobilfunktechnik etc. zu wohnen oder gar nur sich gelegentlich aufzuhalten? Diese unter dem Stichwort *Elektrosmog* bekannt gewordene Frage,

die einen immer größeren Teil der Bevölkerung nicht nur in Deutschland ernsthaft Sorgen bereitet, werden wir in diesem Abschnitt mit Hilfe der quantenmechanischen Störungstheorie näher untersuchen.

Der von der Kommunikationstechnik eingesetzte Wellenlängenbereich der elektromagnetischen Strahlung beträgt etwa

$$1 \cdot 10^3 \cdot m > \lambda > 0,16 \cdot m \quad (7.635)$$

Dies entspricht einer Photonen-Energie von

$$1,3 \cdot 10^{-9} \cdot eV < \delta E < 7,9 \cdot 10^{-6} \cdot eV \quad (7.636)$$

Wird also das von einem Kommunikations-Sender ausgehende Strahlungsfeld beim Durchgang durch Materie, z.B. durch einen menschlichen Körper, abgeschwächt, so entspricht der hierfür verantwortliche elementare quantenmechanische Absorptionsprozess der Absorption eines Photons dieser Strahlung in dem biologischen Material. Die durch die Gl. 7.636 angegebene Energie ist jedoch nicht in der Lage, in irgend einem Material auch nur die geringste strukturelle (chemische) Veränderung zu bewirken. Hierzu würde es eines Multiphotonenprozesses (s. Abschnitt 7.13.6) bedürfen. Um z.B. in einem Protein eine Wasserstoffbrückenbindung, deren Bindungsenergie etwa $0,18 \cdot eV$ beträgt, durch ein Strahlungsfeld der Mobilfunk-Installationen zu verändern, würde ein 23000-Photonen-Prozess benötigt. Wie wir im Abschnitt 7.13.6 gezeigt haben, hat dieser eine Übergangswahrscheinlichkeit, die um derart viele Größenordnungen unterhalb der für die Realität relevanten Werte liegt, dass wir diese Möglichkeit ohne Bedenken aus unserer Diskussion streichen dürfen.

Die in jedem Material möglichen Festkörperschwingungen (Phononen (Kapitel 9.2), Plasmonen (Kapitel 9.3) etc.) enthalten z.T. in ihrem Energie/Impulsspektrum $E = E(P)$ auch sog. *akustische Zweige*, die dadurch gekennzeichnet sind, dass sie bei der Energie 0 beginnen,

$$E(P = 0) = 0 \quad \text{z.B. für akustische Phononen} \quad (7.637)$$

Die Anregung derartiger akustischer Phononen ist daher grundsätzlich auch mit Photonen extrem niedriger Energie möglich. Im Ergebnis entspricht dies einer **Erwärmung** des Festkörpers. Nach Vorgabe einer maximal zulässigen Temperaturerhöhung des betrachteten Materials lässt sich daher über diesen Mechanismus eine maximal zulässige lokale Strahlungsstromdichte definieren.

(XXX: Der Text zu den hieraus resultierenden Daten und aktuellen Vorschriften ist noch nicht verfügbar).

Als weitere Möglichkeit einer Schädigung von biologischem Material durch den betrachteten Typ von elektromagnetischer Strahlung verbleibt meiner Einschätzung nach nur noch der nachfolgend skizzierte makroskopische Ablauf:

Das Material hat eine heterogene Struktur, die auch zu einer heterogenen Strukturierung der elektrischen und/oder magnetischen Materialparameter führt. Diese generieren gewisse Nebenbedingungen für die Ausbildung der elektromagnetischen Felder innerhalb des Materials. Sie erzwingen z.B. örtlich fixierte Knoten des elektromagnetischen Strahlungsfeldes. Wegen der extrem hohen Kohärenz der Strahlung führt dies in der Umgebung dieser ausgezeichneten Linien oder Flächen zu stehenden Wellen und damit zur Ausbildung örtlich fixierter elektrischer und magnetischer Wechselfelder. Bei entsprechend hoher lokaler Intensität der Strahlung führt dies zu relativ hohen Zahlenwerten für diese Felder. An dieser Stelle sehe ich nicht das Argument, durch das eine Beeinflussung organischen Funktionsgewebes, z.B. von Nervenzellen, über diesen Mechanismus von vorn herein und mit Sicherheit ausgeschlossen werden kann. Es bleibt jedoch festzuhalten, dass - zumindest nach meiner Kenntnis - eine experimentelle Bestätigung eines derartigen Mechanismus bis heute nicht gelungen ist.

Der von mir skizzierte Mechanismus wird durch **niedrige** Frequenzen der elektromagnetischen Strahlung bevorzugt. Denn die hypothetisch angenommene Veränderung des biologischen Verhaltens z.B. einer Nervenzelle muss dieser Frequenz folgen können. Anderenfalls wirkt sich nur der zeitliche Mittelwert der Felder aus, und der ist in jedem Fall gleich Null. Experimente in dieser Richtung wären also eher unter Hochspannungsmasten oder in der Nähe leistungsstarker Langwellensender durchzuführen als in der Nachbarschaft von Relaisstationen des Mobilfunks. (S. hierzu auch Abschnitt 14.8.4)

Befreien wir uns nun am Ende dieses Abschnitts von der Beschränkung auf die in der Kommunikationstechnik (bisher) eingesetzten Frequenzen, so können wir als Anleitung zum generellen Vorgehen bei der Diskussion der vorliegenden Fragestellung festhalten:

Befindet sich organisches Gewebe eines Lebewesens eine länger andauernde Zeit in einem elektromagnetischen Strahlungsfeld, dann sind für die Abschätzung der möglichen Bestrahlungsschäden des Gewebes insbesondere 2 Parameter dieses Strahlungsfeldes entscheidend:

1. die Energie **eines** Photons der als monochromatisch angenommenen Strahlung; diese ist ausschließlich durch deren Frequenz bzw. Wellenlänge bestimmt. Diese Größe hat die Dimension $\frac{\text{Energie}}{\text{Teilchen}}$.
2. die flächenbezogene Energiestromdichte der Strahlung am Ort des organischen Gewebes; diese ergibt sich z.B. aus der integralen Sendeleistung des betrachteten Senders und den geometrischen Gegebenheiten von Sender und Gewebe. Diese Größe hat die Dimension $\frac{\text{Energie}}{\text{Fläche} \cdot \text{Zeit}}$.

Durch den erstgenannten Parameter ist vorgegeben, welche mikroskopischen, d.h. auf atomarer oder molekularer Skala ablaufenden Prozesse als Schädigungsmechanismen möglich sind. Sobald diese Energie ausreicht, um z.B. an einer Stelle

eines Proteins die Struktur der chemischen Bindung zu verändern, dann ist dieser Typ von Schädigungsprozess durch elektromagnetische Strahlung dieser Frequenz **immer** möglich, auch wenn deren makroskopische Energiestromdichte am Ort des Lebewesens beliebig klein ist. Diese Energiestromdichte bestimmt dann *nur noch* die Bestrahlungsdauer, die erforderlich ist, um ein bestimmtes Ausmaß an Schädigung zu erreichen. Diese auf molekularer Ebene ablaufenden Schädigungsprozesse sind i.a. irreversibel, so dass es auch keinen echten Schwellwert für die Energiedichte gibt, unterhalb der **keine** Schädigung mehr auftritt. Die Angabe von zulässigen, d.h. als unbedenklich eingeordneten Grenzwerten basiert dann immer auf statistischen Überlegungen.

Reicht dagegen die Energie eines Photons nicht aus, um überhaupt irgendeine relevante Veränderung auf molekularer Basis zu bewirken, so kann man diese Schädigung auch durch Steigerung der lokalen Energiedichte nicht erzwingen. Als mögliche Schädigungsprozesse verbleiben nun makroskopische Effekte, z.B. :

- Die integrale Erwärmung des Gewebes durch Wechselwirkung zwischen dem Strahlungsfeld und gewissen kollektiven Anregungen des Gewebes als ganzem.
- Die quasi-statische Schädigung des Gewebes durch lokal auftretende hohe elektrische oder magnetische Feldstärken.

Für diesen Typ von Schädigung ist jedoch eine gewisse **Mindest-Energiestromdichte** erforderlich. Solange dieser Schwellwert nicht überschritten wird, ist auch eine sehr lange Exposition **unbedenklich**.

Die Frage der von Hochspannungsmasten und -leitungen erzeugten elektromagnetischen Streufelder und deren Akzeptanz durch die Öffentlichkeit wird heute von der elektrotechnischen Industrie durchaus ernst genommen. Eine technische Alternative zu den bisherigen Installationen, die diese Streufelder durch konstruktive Maßnahmen reduziert und räumlich begrenzt, sind die Hochspannungsmasten der Fa. Wintrack aus den Niederlanden, s. Abb. 35. Bei dieser auch optisch deutlich verbesserten Konstruktion verlaufen die Hochspannungsleitungen innerhalb der jeweiligen Mastenpaare und sind so angeordnet, dass sich die von ihnen erzeugten Streufelder im Außenbereich bereits ab kleinen Abstandswerten möglichst gut kompensieren. Auf diese Weise bleibt der Bereich mit einem signifikanten Streufeld auf das Gebiet innerhalb der Maste begrenzt.

7.18 Tipps, Tricks und Spezialitäten (-)

(XXX: Der Kopftext zum Kapitel *Tipps, Tricks und Spezialitäten* ist noch nicht verfügbar.)

7.18.1 Der Thorium-Reaktor (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Der Thorium-Reaktor* ist noch nicht verfügbar.)

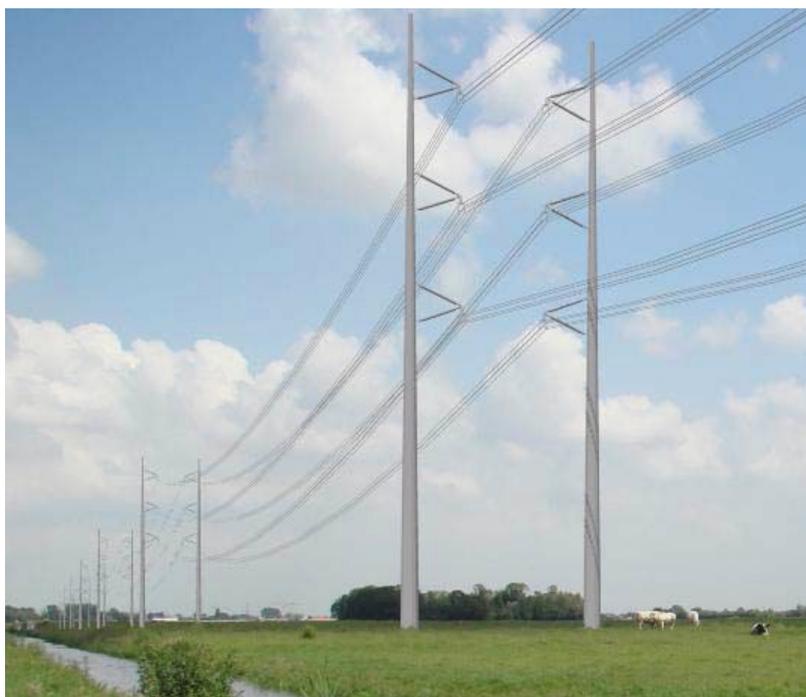


Abb. 35 Streufeldarme Hochspannungsleitungen der Fa. Wintrack/NL

7.18.2 Der Umgang mit Wahrscheinlichkeitsgrößen (-)

Bereits in der Einleitung zum Abschnitt 7.4.10 habe ich auf die in nahezu allen Bereichen der Physik auftretenden Größen mit Wahrscheinlichkeitscharakter hingewiesen. Der Leser wird vielleicht schon selbst festgestellt haben, dass diese in der Literatur oft mit vergleichsweise schwammigen Formulierungen eingeführt werden, z.B. mit folgendem Wortlaut:

$g(v)$ ist gleich der Wahrscheinlichkeit, dass die Geschwindigkeit des betrachteten Teilchens zwischen v und $v + dv$ liegt.

Eine derartige Formulierung ist nicht nur wenig präzise, sie ist zumindest irreführend, konsequent betrachtet ist sie sogar falsch. Wie wir nämlich im Absatz *Zufallsgrößen / Verteilungsfunktion / Wahrscheinlichkeitsdichten* (S. 7.4.10) gelernt haben, ist die mit einer derartigen Formulierung gemeinte Wahrscheinlichkeitsdichte der Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages eines Teilchens gar keine Wahrscheinlichkeit. Für sie gelten also die Gesetze für das Rechnen mit Wahrscheinlichkeiten **nicht!**

Ich empfehle daher, bei konkreten Berechnungen so lange als irgend möglich mit der jeweiligen **Verteilungsfunktion** zu rechnen. Diese ist **wirklich** eine Wahrscheinlichkeit, sie ist dimensionslos und unserer Anschauung i.a. viel leichter zugänglich. Transformationen in andere Koordinatensysteme erzeugen bzgl. der Verteilungsfunktionen ebenfalls i.a. keinerlei Schwierigkeiten.

7.18.3 Abschätzungen mit Hilfe von Mittelwerten (-)

Bei einer Vielzahl physikalischer Problemstellungen treten *Mittelwerte* auf, sei es als thermodynamische Mittelwerte oder auch als auf andere Art gewichtete oder ungewichtete Mittelwerte. Sobald es nun primär um eine mehr oder weniger grobe Abschätzung des Ergebnisses geht, liegt die Versuchung nahe, von vorn herein mit Mittelwerten auch der primären physikalischen Größen zu rechnen, diese Mittelwerte in die Beziehung für die gesuchte Größe einzusetzen und darauf zu vertrauen, dass das Ergebnis in etwa dem wahren Ergebnis entspricht. Nun muss aber bei jeder Mittelwertbildung nicht nur darauf geachtet werden, dass die jeweils korrekte Gewichtung verwendet wird, die aber nicht für alle auftretenden Größen die gleiche sein muss. Es muss auch zusätzlich noch die richtige Reihenfolge beachtet werden. Denn i.a. ist keinesfalls der Mittelwert der Funktionswerte gleich dem Funktionswert der gemittelten Ausgangswerte,

$$\langle f(x, y) \rangle \neq f(\langle x \rangle, \langle y \rangle) \quad (7.638)$$

Bekanntlich gilt diese Beziehung bereits für die Bildung des Quadrates nicht,

$$\langle x^2 \rangle \neq \langle x \rangle^2 \quad (7.639)$$

Denn die Differenz dieser beiden Größen bestimmt gerade die Varianz von x , s. Gl. 7.270. Lediglich in besonders einfach strukturierten Fällen darf der Mittelwert der Funktionswerte durch den Funktionswert der gemittelten Ausgangswerte ersetzt werden. Ist z.B. die Funktion $f(x, y)$ einfach das Produkt der beiden Ausgangsgrößen,

$$f(x, y) = x \cdot y$$

dann dürfen die beiden Operationen \cdot und $\langle \rangle$ mit einander vertauscht werden, allerdings nur, wenn die beiden Größen x und y im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie **unabhängig** von einander sind, s. definition 7.250. Obwohl diese Zusammenhänge allgemein bekannt sind, wird immer wieder dagegen verstoßen und relativ großzügig mit der Reihenfolge der jeweils benutzten Mittelwertbildungen umgegangen.

Als warnendes wissenschaftshistorisch reales Beispiel nenne ich das Problem der sog. *kritischen Masse* an U_{92}^{235} für den spontanen Einsatz der Kettenreaktion (s. Abschnitt 7.17.3). Um zu einem Schätzwert für diesen Schwellwert zu gelangen, schätzte Heisenberg (wie anfangs wohl auch andere Physiker) die Masse einer Kugel aus U_{92}^{235} ab, bei der ein durch spontanen Zerfall entstandenes (schnelles) Neutron gerade mit einer Wahrscheinlichkeit von $\frac{1}{2,3}$ wieder eine Spaltungsreaktion auslöst, die bekanntermaßen ihrerseits pro Reaktion im Mittel 2,3 schnelle Neutronen freisetzt. Insgesamt entsteht dann im Mittel gerade wieder 1 schnelles Neutron. Heisenberg kam auf diese Weise auf eine kritische Masse an U_{92}^{235} von $13 \cdot t!$ Er berechnete also den mittleren Diffusionsweg eines Neutrons von der Entstehung bis zur Auslösung einer Kernreaktion und hielt die auf diese Weise berechnete Kugelmasse für eine brauchbare Abschätzung der kritischen Masse. *Sir* (seit 1968) *Rudolf Ernst Peierls* (* 1907 in

Berlin; † 1995 in Oxford(England)) dagegen schätzte 1940 im Exil in England zusammen mit *Otto Frisch* (* 1904 in Wien; † 1979 in Cambridge(England)) ab, ab welcher Mindestmasse die mittlere **Reproduktionsrate** einer sehr großen Zahl von spontan entstandenen Neutronen den Wert 1 überschreitet. D.h. er berechnete unmittelbar die eigentlich gefragte Größe, nämlich den Mittelwert der Anzahl an schnellen Neutronen, die ein (anfangs ebenfalls) schnelles Neutron im Laufe seines Verweilens in der Uranmasse insgesamt erzeugt. Das Ergebnis seiner Abschätzung war eine kritische Masse von knapp $1 \cdot kg$, also ein um 4 Größenordnungen kleinerer Wert ([26])! Der heute akzeptierte Literaturwert beträgt $49 \cdot kg$. Bei der von Heisenberg geforderten Situation erreicht die Reproduktionsrate bereits den Wert von 3. Diese durch Peierls gelieferte Information führte zum sofortigen Start des Manhattan-Projektes in den USA. Heisenberg dagegen vertraute fest auf seine persönliche Abschätzung, bis er am 06.08.1945 - bereits in britischer Internierung - von der Atombomben-Explosion über Hiroshima erfuhr.

7.18.4 Testverfahren (-)

In einigen Bereichen der Experimentalphysik, insbesondere in der Elementarteilchenphysik, fällt während eines Experimentes eine riesige Anzahl von Daten an, die nur noch mit Hilfe weitgehend selbständig ablaufender Computerprogramme ausgewertet werden können. Diese Datenmenge besteht i.a. aus einer (großen) Anzahl von jeweils gleich strukturierten Datensätzen, nämlich den zu einem Ereignis gehörenden Satz von Messwerten. Ziel des Gesamt-Experimentes ist es i.a., den funktionellen Zusammenhang zwischen diesen Größen zu bestimmen.

In einem ersten Schritt müssen die für das durchgeführte Experiment relevanten Ereignisse von den in diesem Sinne irrelevanten Ereignissen separiert werden. Wenn es z.B. um die Bestimmung der Energie- und Impulsverteilung der bei einem bestimmten, evtl. seltenen Zerfallsprozess entstehenden Teilchen geht, gilt es, die zu anderen Zerfallsprozessen gehörenden Datensätze zu verwerfen.

Danach erfolgt i.a. der Schritt der *Daten-Kompression*: Man nimmt einen bestimmten funktionellen Zusammenhang zwischen den Messgrößen an und bestimmt nach einem bestimmten mathematischen Verfahren die in diesem funktionellen Zusammenhang auftretenden Parameter, die *am besten* zu der Menge von Messdatensätzen passen. Dieses Vorgehen bezeichnet man im Labor-Jargon meist als *FIT-Prozess*. Man *fittet* die Messwerte an die vorgegebenen Funktionen an. Verwendet man hierfür ausreichend *gutartige* Algorithmen, so erhält man in nahezu jedem Fall ein Ergebnis, also eine Folge von Zahlenwerten für die gesuchten Parameter. Damit ist jedoch noch nicht die Frage beantwortet, ob überhaupt die Messdaten mit dem angenommenen funktionellen Zusammenhang zwischen den gemessenen physikalischen Größen verträglich sind. Oder ob im Gegenteil diese Messdaten starke Hinweise darauf enthalten, dass in diesem Fall ein ganz anderer funktioneller Zusammenhang zwischen den Messgrößen vorgelegen hat. Ziel der in diesem Absatz beschriebenen sog. statistischen Testverfahren ist es, Hinweise auf die wahrscheinlichste Antwort auf diesen Typ von Fragestellungen zu geben.

(XXX: Der weitere, eigentliche Text des Absatzes *Testverfahren* ist noch nicht verfügbar.)

7.18.5 Natürliche Kernspaltungs-Reaktoren (-)

Wir stellen nun die Frage, ob es jemals auf der Erde (und damit vielleicht auch an anderen Stellen im Kosmos) eine natürliche, also nicht vom Menschen initiierte Kernspaltungsreaktion gegeben hat, die dann auch noch eine längere Zeit angedauert hat. Diese Frage wurde erstmals 1956 von dem japanischen Physiker *Paul K. Kuroda* (* 1917 in Fukuoda (Japan); † 2001 als em. Prof. der University of Arkansas in Las Vegas, Nev (USA)) diskutiert. Die überraschende Antwort auf diese Frage lautet heute "ja". Denn es gibt inzwischen geologische Befunde, die verlässlich zeigen, dass an zumindest 15 Stellen in Zentralafrika im Südosten des heutigen Gabun in einem frühen Stadium der erdgeschichtlichen Entwicklung Uran-Kernspaltungsprozesse abgelaufen sein müssen. Denn die an diesen Stellen geschürften Uran-haltigen Erze zeigen ein signifikant untypisches Uran-Isotopen-Verhältnis. Während sonst überall auf der Erde - und sogar auf dem Mond - ein Verhältnis

$$\left\langle \frac{U^{235}}{U} \right\rangle = 7,202 \cdot 10^{-3} \quad \text{weltweit} \quad (7.640)$$

gemessen wird, beträgt dieses Verhältnis an dem Erz aus den o.a. Schürfstellen in Gabun

$$\left\langle \frac{U^{235}}{U} \right\rangle = 7,171 \cdot 10^{-3} \quad \text{an den Schürfstellen in Gabun} \quad (7.641)$$

Auch das Element Neodym zeigt ein auffällig verändertes Isotopenverhältnis

$$\left\langle \frac{Nd^{142}}{Nd} \right\rangle = 0,27 \quad \text{weltweit} \quad (7.642)$$

$$= 0,06 \quad \text{an den Schürfstellen in Gabun} \quad (7.643)$$

Bei einer Uran-Kernspaltung entsteht im Mittel eine große Anzahl unterschiedlicher Elemente von mittlerer Ordnungszahl, u.a. auch Neodym. Die Besonderheit des Elementes Neodym besteht nun darin, dass es eine ganze Reihe von stabilen Isotopen besitzt, die bis auf das Isotop Nd^{142} alle bei dieser Spaltung entstehen können. Der um mehr als das 4-fache kleinere Anteil von Nd^{142} in diesen Erzen ist also ein besonders starker Hinweis darauf, dass tatsächlich eine Uran-Kernspaltung stattgefunden hat.

Die Zeit, an der diese Ereignisse auftraten, konnte auf den Wert

$$t \approx -1,7 \cdot 10^9 \cdot y \quad (7.644)$$

fixiert werden, also innerhalb der als das Proterozoikum (s. Absatz S. 1003) bezeichneten erdgeschichtlichen Periode und lange Zeit bevor die ersten Homoniden begannen, die Erde zu bevölkern. Der erste Fundort für diese geologischen Befunde

lag auf dem Gelände einer Uran-Förderungs-Mine mit dem Namen *Oklo*. Deswegen hat dieser Vorgang die Bezeichnung *Oklo-Phänomen* erhalten.

Zu dieser Zeit lag das natürliche Isotopenverhältnis von Uran noch wesentlich höher als heute (s. Gl. 7.640), nämlich bei

$$\frac{N(U^{235})}{N(U)} = 0,035 ; t = -1,7 \cdot 10^9 \cdot y \quad (7.645)$$

Dieser Wert entspricht etwa dem Uran, das heute in sog. Leichtwasser-Reaktoren üblicherweise als Brennstoff eingesetzt wird. Ein Mechanismus, der eine weitere Anreicherung des Urans bewirkte, war also nicht erforderlich. Um eine Uran-Kernspaltung in Gang zu setzen, bedurfte es noch

1. einer Anreicherung des Urans in dem reaktionsfähigen Volumen;
2. einer Moderation, also einer Durchmischung des reaktionsfähigen Volumens mit einem Material, das schnelle Neutronen auf das Energieniveau von thermischen Neutronen abbremst;
3. einer genügend niedrigen Konzentration im reaktionsfähigen Volumen an Materialien mit einem hohen Einfang-Querschnitt für Neutronen, also z.B. Cadmium und Bor.

Wie hier die 1. Bedingung erfüllt wurde, werden wir sogleich noch ausführlich diskutieren.

Als Moderator diente in den Oklo-Reaktoren natürliches Wasser, das als Grundwasser in die Gesteinshöhlen eindrang, in denen sich das reaktionsfähige Uran-haltige Gemenge gebildet hatte. Sobald sich nun Bedingungen eingestellt hatten, die eine Kettenreaktion ermöglichten, setzte diese unter starker Wärmeentwicklung (der Größenordnung $100 \cdot kW$) ein und verdampfte in kurzer Zeit das gesamte eingedrungene Wasser. Dadurch kam die Kettenreaktion zum Erliegen und setzte erneut ein, sobald wieder eine ausreichende Menge an Wasser nachgeströmt war. Man schätzt die Zykluszeit, mit der sich dieser Vorgang wiederholte, auf

$$\Delta t_{\text{Reaktion}} \approx 2 \cdot h \quad (7.646)$$

Die 3. Bedingung war wohl durch die zeitlichen und lokalen geologischen Gegebenheiten erfüllt.

Insgesamt traten diese Prozesse während eines Zeitraums von ca. $2 \cdot 10^6 \cdot y$ auf. Danach war der natürliche Gehalt an U^{235} soweit abgesunken, dass dieser Reaktortyp nicht mehr kritisch werden konnte.

(XXX: Der weitere Text des Abschnitts *Natürliche Kernspaltungs-Reaktoren* ist noch nicht verfügbar.)

7.18.6 Die kalte Fusion (-/-)

(XXX: Der Text des Abschnitts *Die kalte Fusion* ist noch nicht verfügbar.)

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Tipps, Tricks und Spezialitäten* ist noch nicht verfügbar.)

7.19 Aufgaben (-)

1. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)
2. Bestimme näherungsweise die Bindungsenergie des Wasserstoff-Atoms durch Berechnung des Minimums der Gesamtenergie des Systems. Setze hierfür die Summe an aus der elektrostatischen Feldenergie und der aus der Unschärfere-lation abgeschätzten Lokalisationsenergie des Elektrons.
3. Betrachte den Vektorraum der im Intervall $[-1; +1]$ stetig differenzierbaren und quadrat-integrierbaren Funktionen (s. Gl. 7.137) mit dem über die Gl. 7.138 definierten Skalarprodukt.
 - (a) Berechne ausgehend von den Polynomen x^i über das Schmidtsche Orthonormierungs-Verfahren (Gl. 7.125 bis 7.127) einen Satz von abzählbar unendlich vielen or-thonormierten Vektoren.
 - (b) Berechne in analoger Vorgehensweise eine orthonormierte Basis für den über die Gl. 7.159 definierten Funktionenraum \mathfrak{F}_H .
4. Beweise, dass jedes Legendre-Polynom die zugehörige Legendre-Differenzialglei-chung erfüllt. Verwende hierzu die Gl. 7.155 und 7.156.
5. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)
6. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)
7. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)
8. Beweise den Satz 152: 2 Operatoren besitzen genau dann gemeinsame Eigen-vektoren (mit i.a. unterschiedlichen Eigenwerten), wenn sie miteinander kom-mutieren
9. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)
10. Eine Dispersion von Teilchen im Größenbereich von einigen μm in einer Flüs-sigkeit wurde in einem Lichtmikroskop aufgenommen. Bei der bildanalytischen Auswertung dieser Aufnahme zeigte sich, dass für den Durchmesser d aller de-tektierten Teilchen die Bedingung

$$2 \cdot \mu m < D \leq 20 \cdot \mu m \quad (7.647)$$

erfüllt war. Darauf hin wurde dieser Durchmesserbereich in 13 Intervalle I_k von jeweils $1 \cdot \mu m$ Breite eingeteilt,

$$I_1 = (2 \cdot \mu m; 3 \cdot \mu m] \quad \text{etc.} \quad (7.648)$$

und die Anzahl der Teilchen bestimmt, deren Durchmesser in jeweils eines dieser Intervalle fiel. Im Ergebnis befanden sich in allen Intervallen annähernd die gleichen Anzahl N_1 von Teilchen. Bestimme die Verteilungsfunktion und die Dichte dieser Verteilung

- a) bezogen auf den Teilchen-Durchmesser;
- b) bezogen auf das Teilchen-Volumen.

11. Das französische Kartenspiel *Tarot* wird mit 78 Karten gespielt, nämlich mit je 14 Karten der 4 Farben *pique*, *coeur*, *carreau*, *trèfle*, mit 19 (normalen) Trumpfkarten und mit 3 sog. *Oudlers*. Letztere haben eine herausragende Bedeutung für den Spielablauf. Meist spielt man Tarot mit 4 Spielern. Dann erhält jeder Spieler 18 Karten und die verbleibenden 6 Karten werden verdeckt auf den Spieltisch gelegt. Dieser Stapel wird als *chien* bezeichnet. Im Zuge einer Ansageprozedur wird 1 Spieler als Angreifer bestimmt. Er spielt alleine gegen die von den 3 übrigen Spielern gebildete Verteidigung. Der Angreifer nimmt den chien auf und legt dann 6 i.a. andere Karten ebenfalls verdeckt zurück und das Spiel beginnt mit den verbleibenden Karten.
 - (a) Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet der Angreifer mindestens 1 Oudlers in dem chien?
 - (b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet der Angreifer mindestens 2 Trumpfkarten in dem chien?
 - (c) Mit welcher Wahrscheinlichkeit findet der Angreifer weder einen Trumpf noch einen Oudlers in dem chien?
 Schätze diese Werte nur grob ab.

12. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)

13. Beweise die im Absatz S. 698 erläuterten, für 2 beliebige Zufallsgrößen a und b und deren Korrelationskoeffizienten ρ geltenden Aussagen 7.275

$$-1 \leq \rho(a, b) \leq +1 \quad (7.649)$$

und 7.276

$$\rho(a, b) = 0 \quad (7.650)$$

14. (XXX: Der Text dieser Aufgabe ist noch nicht verfügbar.)

15. Die Massenzahlen \mathcal{A} der bei der Spaltung von Uran U_{92}^{235} entstehenden Spaltprodukte haben eine Verteilung, wie sie in der Abb. 32 wiedergegeben ist. Zeige,

dass diese Verteilung zwangsläufig entsteht, sobald man annimmt, dass ein bestimmtes Paar von Spaltkernen umso häufiger auftritt, je größer die dabei frei werdende Energie ist. Verwende für die Bearbeitung dieser Aufgabe insbesondere den kernphysikalischen Inhalt der Abb. 19.

16. Berechne die Masse an sog. natürlichem Uran, die ein Mensch ständig bei sich haben kann (z.B. in seine Kleidung eingenäht), ohne sich einer signifikant erhöhten Strahlungsgefährdung auszusetzen.

17. Es gibt die Spekulation, das Problem der Entsorgung radioaktiver Abfälle dadurch zu lösen, dass diese mit einer Rakete in dem Weltraum transportiert und dann auf unsere Sonne gelenkt werden. Schätze die zusätzlichen Kosten in $\frac{\text{Eurocent}}{\text{kWh}}$ ab, um die sich der Preis für elektrischen Strom aus Kernenergie erhöht, sofern diese Entsorgungskosten auf den Strompreis uugelegt werden.

18. (XXX: Der Text der weiteren, noch vorgesehenen Aufgaben ist noch nicht verfügbar.)

7.20 Zahlenwerte (-)

Zerfallsdaten einiger langlebiger radioaktiver Isotope

sortiert nach ihrer Halbwertszeit $\tau_{1/2}$.

Zusätzlich angegeben sind die bei diesem Zerfall emittierte (oder absorbierte) Strahlung und deren kinetische Energie ΔE . Existieren mehrere unterschiedliche Zerfallsprozesse, so wurde nur der jeweils häufigste Prozess aufgeführt. Ist der Ergebniskern dieses Prozesses seinerseits nicht stabil, so wird diese Zerfallsreihe gedanklich solange fortgesetzt, bis ein Kern entstanden ist, dessen Halbwertszeit zumindest deutlich größer ist als die Halbwertszeit des betrachteten Ausgangskerns. Dieser Kern wird in der Tabelle als *Endkern* bezeichnet und die während dieser Serie von radioaktiven Zerfällen insgesamt frei werdende kinetische Energie als ΔE_{ges} .

Isotop	$\tau_{1/2}$ /y	Strahlg	ΔE /MeV	Endkern	ΔE_{ges} /MeV
Te_{52}^{128}	$7,7 \cdot 10^{24}$	$2 \cdot e^-$	3,933	Xe_{54}^{128}	
Te_{52}^{130}	$7,9 \cdot 10^{20}$	$2 \cdot e^-$	3,520	Xe_{54}^{130}	
Bi_{83}^{209}	$1,9 \cdot 10^{19}$	He_2^4	3,137	Tl_{81}^{205}	
V_{23}^{50}	$1,4 \cdot 10^{17}$	e^-	1,037	Cr_{24}^{50}	
Ce_{58}^{142}	$> 5 \cdot 10^{16}$	$2 \cdot e^-$		Nd_{60}^{142}	
Sm_{62}^{148}	$8 \cdot 10^{15}$	He_2^4	1,986	Nd_{60}^{144}	
Nd_{60}^{144}	$2,3 \cdot 10^{15}$	He_2^4	1,905	Ce_{58}^{140}	
Sm_{62}^{149}	$> 2 \cdot 10^{15}$	He_2^4		Nd_{60}^{145}	
Hf_{72}^{174}	$2 \cdot 10^{15}$	He_2^4	2,495	Yb_{70}^{170}	
Os_{76}^{186}	$2 \cdot 10^{15}$	He_2^4	2,822	W_{74}^{182}	
In_{49}^{115}	$4,41 \cdot 10^{14}$	e^-	0,495	Sn_{50}^{115}	
Dy_{66}^{154}	$2 \cdot 10^{14}$	He_2^4		Gd_{64}^{150}	
Gd_{64}^{152}	$1,1 \cdot 10^{14}$	He_2^4	2,205	Sm_{62}^{148}	
Te_{52}^{123}	$1,2 \cdot 10^{13}$	e^-	0,051	Sb_{53}^{123}	

Pt_{78}^{190}	$6,5 \cdot 10^{11}$	He_2^4	3,249	Os_{76}^{186}	
Ld_{57}^{138}	$1,4 \cdot 10^{11}$	e^-	1,044	Ce_{58}^{138}	
		$-e^-$	1,737	Ba_{56}^{138}	
Sm_{62}^{147}	$1,1 \cdot 10^{11}$	He_2^4	2,310	Nd_{60}^{143}	
		e^-	0,003	Os_{76}^{187}	
Re_{75}^{187}	$5 \cdot 10^{10}$	He_2^4	1,653	Ta_{73}^{183}	
		e^-	0,283	Sr_{38}^{87}	
Rb_{37}^{87}	$4,75 \cdot 10^{10}$	e^-	1,193	Hf_{72}^{176}	
Lu_{71}^{176}	$3,6 \cdot 10^{10}$	He_2^4	4,083	Pb_{82}^{208}	43, 94
Th_{90}^{232}	$1,41 \cdot 10^{10}$	He_2^4	4,270		52, 52
U_{92}^{238}	$4,47 \cdot 10^9$	e^-	1,311	Ca_{20}^{40}	
		$-e^-$	1,505	Ar_{18}^{40}	
K_{19}^{40}	$1,27 \cdot 10^9$	He_2^4	4,679	Pb_{82}^{207}	62, 232
U_{92}^{235}	$7,04 \cdot 10^8$	He_2^4	2,529	Nd_{60}^{142}	
Sm_{62}^{146}	$1,0 \cdot 10^8$				
Pu_{94}^{244}	$8 \cdot 10^7$	He_2^4	4,666		
Pb_{82}^{205}	$1,53 \cdot 10^7$	$-e^-$	0,051	Tl_{81}^{205}	
Cm_{96}^{247}	$1,56 \cdot 10^7$	He_2^4	5,353		
J_{53}^{129}	$1,6 \cdot 10^7$	e^-	0,194	Xe_{54}^{129}	
Np_{93}^{237}	$2,144 \cdot 10^6$	He_2^4	4,959	Pa_{91}^{233}	
Zr_{40}^{93}	$1,53 \cdot 10^6$	e^-	0,091	Nb_{41}^{93}	
Al_{13}^{26}	$7,4 \cdot 10^5$	e^+		Mg_{12}^{26}	
		e^-	0,709	Ar_{18}^{36}	
Cl_{17}^{36}	$3,08 \cdot 10^5$	$-e^-$	1,142	S_{16}^{36}	
		He_2^4	4,909	Bi_{83}^{209}	40, 64
U_{92}^{233}	$1,592 \cdot 10^5$	e^-	0,294	Ru_{44}^{99}	
Tc_{43}^{99}	$2,1 \cdot 10^5$	He_2^4	4,770		
Th_{90}^{230}	$7,51 \cdot 10^4$	He_2^4			
Pa_{91}^{231}	$3,25 \cdot 10^4$	e^-	0,151	Br_{35}^{79}	
Se_{34}^{79}	$6,5 \cdot 10^5$				
Pu_{94}^{239}	$2,44 \cdot 10^4$	He_2^4	5,245		
Cs_{55}^{135}	$2 \cdot 10^4$	e^-	0,269	Ba_{56}^{135}	
Nb_{41}^{94}	$2,0 \cdot 10^4$	e^-	2,045	Mo_{42}^{94}	
C_6^{14}	$5,73 \cdot 10^3$	e^-		C_6^{14}	
Ra_{88}^{226}	$1,60 \cdot 10^3$	He_2^4	4,871	Pb_{82}^{206}	
Cs_{55}^{137}	30	e^-	1,176	Ba_{56}^{137}	
Sr_{38}^{90}	28,79	e^-	0,546	Zr_{40}^{90}	
		e^-	1,865	Gd_{64}^{152}	
Eu_{63}^{152}	13,5	$-e^-$	1,920	Sm_{62}^{152}	
		e^-		He_2^3	
H_1^3	12,32	e^-	0,687	Rb_{37}^{85}	
Kr_{36}^{85}	10,78				

(Quelle: insbesondere [1] und [2] aus Heft 15, sowie [31])

Ruheenergie einer atomaren Masseneinheit: $E_0 = 931,494061 \cdot MeV$

(XXX: bis zu welcher max HWZ macht es Sinn, die Isotope hierin aufzunehmen
? - überprüfen: $Np, Cu, Nd,$)

(XXX: Hi. Altersbestimmung von Gesteinen -)

Wirkungsquerschnitt einiger Stoßprozesse

Edukte **Produkte** $\Delta E/MeV$ $\sigma/barn$

$C_6^{12} + H_1^1$

(XXX: Der weitere Text des Kapitels *Zahlenwerte* ist noch nicht verfügbar.)

7.21 Literatur (-)

1. P. Lenard, Erzeugung von Kathodenstrahlen durch ultraviolettes Licht, Ann. d. Physik Bd. 307 (1900) Heft 6, S. 359-375
2. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
3. A. Einstein, Über einen die Verwandlung und Erzeugung des Lichtes betreffenden heuristischen Standpunkt, Annalen der Physik 322 (6), 1905, S. 132-148
4. C.J. Davisson, L.A. Germer, Diffraction of Electrons by an Crystal of Nickel, Phys.Rev. 30 (1927) p. 705-740
5. D.P. Mitchell, P.N. Powers, Bragg Reflection of Slow Neutrons, Phys. Rev. 50 (1936) p. 486-487
6. H.v. Halban, P. Preiswerk, preuve expérimentale de la diffraction des neutrons, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris 203 (1936) p. 73-75
7. I. Estermann, O. Stern, Beugung von Molekularstrahlen, Zeitschr. f. Physik 61 (1930), S. 95-125
8. A. Zeilinger et al., Wave-particle duality of C60 molecules, Nature 401 (1999), p. 680-682
9. L. de Broglie, Recherches sur la Theorie des Quantas, Diss. 1924 Faculté des Sciences Université de Paris
10. John Simmons, Who is Who der Wissenschaft, Bastei-Lübbe-Taschenbuch, 1999
11. N. Margolus, L. Levitin, The Maximum Speed of Dynamical Evolution, Physica D 120 (1998), p. 188-195
12. E.U. Condon, R.W. Gurney, Wave Mechanics and Radioactive Disintegration, Nature 122 (1928), p. 439
13. G. Gamow, Zur Quantentheorie des Atomkerns, Zeitschrift f. Physik 51 (1928) S. 204-212
14. L. Nordheim, Zur Theorie der thermischen Emission und der Reflexion von Elektronen an Metallen, Zeitschrift f. Physik 46 (1927) S. 833-855
15. Rolf Walter, Lineare Algebra und analytische Geometrie, Vieweg Verlag, 1993
16. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
17. P.A. Dirac, The Principals of Quantum Mechanics, Oxford University Press, 4th Ed. 1967
18. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
19. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
20. A.N. Kolmogorow, Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Springer-Verlag Heidelberg 1933
21. H.L. Lebesgues, Intégrale, Longeur, Aire; thèse Université de Paris, Faculté des Sciences, 1902
22. M. Born, R. Oppenheimer, Zur Quantentheorie der Molekeln, Annalen der Physik 389 (1927), 20, S. 457-484

23. Y. Aharonov, D. Bohm, Significance of Electromagnetic Potenzial in the Quantum Theory, Phys. Rev. 115 (1959), p. 485-491
24. W. Pauli, Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen mit der KJomplexstruktur der Spektren, Zeitschrift f. Physik 31 (1925) S. 765-783
25. U. Essmann, H. Träuble, Physics Letters 24A (1967) p. 526
26. R.E. Peierls, O.R. Frisch, On the Construction of a "Super-Bomb" based on a Nuclear Chain Reaction in Uranium, Memorandum 1940,
<http://www.atomicarchive.com/Docs/Begin/FrischPeierls.shtml>
27. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
28. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
29. C.V. Raman, K.S. Krishnan, A New Nature of Secondary Radiation, Nature 121 (1928), p. 501 - 502
30. <http://www.iter.org>
31. Korea Atomic Energy Research Institute: <http://atom.kaeri.re.kr/>
32. Frankfurter Rundschau v. 12.10.2009
33. <http://www-lmj.cea.fr>
34. <http://myrrha.scken.be>
35. (XXX: Das an dieser Stelle vorgesehene Literaturzitat ist noch nicht verfügbar.)
36. E. Rutherford, The Scattering of α and β particles by Matter, Philosophical Magazine 21 (1911) p. 669-688
37. E. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem, Annalen der Physik 29, No. 6, S. 489-526
38. International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC-Nomenclature of Organic Chemistry, Introduction, R-0.1 Conventions
39. J. Chadwick, Possible Existence of a Neutron, Nature 129 (1932) p. 312 (XXX: präzisieren)
40. L.Meitner, O.Frisch, Disintegration of Uranium by Neutrons: a new Type of Nuclear Reaction, Nature 143 (1939) p. 239-240