

Albert Messiah
Quantenmechanik
Band 1

Albert Messiah

Quantenmechanik

Band 1

Aus dem Französischen übersetzt von
Joachim Streubel



Walter de Gruyter · Berlin · New York 1976

Titel der französischen Originalausgabe: Albert Messiah „Mécanique Quantique”,
Tome 1
© 1969 by Dunod, Editeur, Paris

Autor

Albert Messiah
Professor am Institut National des
Sciences et Technique Nucléaires

Übersetzer

Joachim Streubel
Diplomphysiker

Dieser Band enthält 38 Abbildungen.

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

<p>Messiah, Albert Quantenmechanik. — Berlin, New York: de Gruyter. Einheitssacht.: Mécanique quantique (dt.). Bd. 1. — 1. Aufl. — 1976. ISBN 3-11-003686-X</p>
--

Zweiter, unveränderter Nachdruck 1981

© Copyright 1976 by Walter de Gruyter & Co., vormals G. J. Göschen'sche Verlagshandlung, J. Guttentag, Verlagsbuchhandlung Georg Reimer, Karl J. Trübner, Veit & Comp., Berlin 30.

Alle Rechte, insbesondere das Recht der Vervielfältigung und Verbreitung sowie der Übersetzung, vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf in irgendeiner Form (durch Photokopie, Mikrofilm oder ein anderes Verfahren) ohne schriftliche Genehmigung des Verlages reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden. Printed in Germany.

Satz: Verena Boldin, Aachen; Druck: Karl Gerike, Berlin; Bindearbeiten: Buchgewerbe GmbH Lüderitz & Bauer, Berlin.

Vorwort zur deutschsprachigen Ausgabe

Eine besondere Einführung in dieses weltweit bekannte Standardwerk, das „allgemein als eines der vollständigsten betrachtet wird und das in adäquater Form sowohl den praktischen wie den mathematischen Aspekt umfaßt“ (d’Espagnat *)), erübrigt sich. Seine ungebrochen moderne Darstellung der Quantentheorie hat sich in der Physik eingebürgert. Es gibt heute kaum einen Physiker, der nicht wenigstens einmal während seines Studiums den „Messiah“ in der Hand hatte und Nutzen aus ihm zog. Jeder, der die Grundvorlesungen in Klassischer Theoretischer Physik und über Atomphysik mit Erfolg absolviert hat, sollte dieses Buch verstehen können.

Warum aber neben der französischen Ausgabe und der englischen Übersetzung noch eine deutsche Übersetzung, da doch Englisch heute als Muttersprache für Physiker obligatorisch zu sein scheint? Darauf ist einfach zu antworten: Insbesondere für den Anfänger bedeutet es eine nicht zu unterschätzende Doppelbelastung, wenn er sich eine neue und nicht immer einfache Materie in einer fremden Sprache aneignen muß, zumal er diese meist erst während seines Studiums richtig lernt.

Halter, im Frühjahr 1976

Joachim Streubel

*) d’Espagnat, B.: Grundprobleme der gegenwärtigen Physik, F. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1971.

Inhaltsübersicht zu Band 1 und Band 2

Band 1

Erster Teil Der Formalismus und seine Deutung

1. Die Ursprünge der Quantentheorie
2. Materiewellen und Schrödinger-Gleichung
3. Eindimensionale Quantensysteme
4. Statistische Deutung und Unschärferelationen
5. Der Formalismus der Wellenmechanik und seine Deutung
6. Klassische Näherung und WKB-Methode
7. Der allgemeine Formalismus: Der mathematische Rahmen
8. Der allgemeine Formalismus: Der physikalische Inhalt

Zweiter Teil Einfache Systeme

9. Trennung der Variablen. Zentralpotential
10. Streuprobleme, Streuphasen
11. Die Coulombwechselwirkung
12. Der harmonische Oszillator

Anhang

- A Distributionen, δ -Funktion und Fouriertransformation
- B Spezielle Funktionen und damit zusammenhängende Formeln
- Index von Band 1

Band 2

Dritter Teil Symmetrien und Invarianz

13. Der Drehimpuls in der Quantenmechanik
14. Identische Teilchen. Pauli-Prinzip
15. Invarianz und Erhaltungssätze. Zeitumkehr

Vierter Teil Näherungsmethoden

16. Stationäre Störungen
17. Näherungslösungen der Bewegungsgleichung
18. Variationsmethode und damit zusammenhängende Probleme
19. Streutheorie

Fünfter Teil Elemente der Relativistischen Quantenmechanik

20. Relativistische Theorie des Elektrons
21. Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Anhang

- C Vektoradditionskoeffizienten und Rotationsmatrizen
- D Elemente der Gruppentheorie
- Gesamtindex

Inhalt

Erster Teil Der Formalismus und seine Deutung

1 Die Ursprünge der Quantentheorie	
Einleitung	15
1.1 Das Ende der klassischen Periode	16
1.1.1 Die klassische theoretische Physik	18
1.1.2 Der Fortschritt in der Kenntnis der mikroskopischen Vorgänge und das Auftreten der Quanten in der Physik	18
1.2 Lichtquanten oder Photonen	22
1.2.1 Der photoelektrische Effekt	22
1.2.2 Der Compton-Effekt	23
1.2.3 Lichtquanten und Interferenzerscheinungen	27
1.2.4 Schlußfolgerungen	29
1.3 Die Quantisierung bei materiellen Systemen	30
1.3.1 Atomspektroskopie und Schwierigkeiten des klassischen Rutherford-Modells	30
1.3.2 Quantisierung der Energieniveaus der Atome	31
1.3.3 Andere Quantisierungsbeispiele: Richtungsquantelung	33
1.4 Korrespondenzprinzip und ältere Quantentheorie	35
1.4.1 Mängel der klassischen Korpuskulartheorie	35
1.4.2 Das Korrespondenzprinzip	36
1.4.3 Anwendung des Korrespondenzprinzips auf die Berechnung der Rydberg-Konstante	37
1.4.4 Lagrange- und Hamiltonform der Gleichungen der klassischen Mechanik	38
1.4.5 Die Quantisierungsregeln von Bohr-Sommerfeld	41
1.4.6 Erfolge und Grenzen der älteren Quantentheorie	45
1.4.7 Schlußfolgerungen	47
Aufgaben	48
2 Materiewellen und Schrödinger-Gleichung	
Historischer Abriss und allgemeine Übersicht über die folgenden Kapitel.	50
2.1 Materiewellen	53
2.1.1 Einleitung	53
2.1.2 Freies Wellenpaket, Phasen- und Gruppengeschwindigkeit	54
2.1.3 Wellenpaket in einem langsam veränderlichen Feld	57
2.1.4 Quantisierung der Energieniveaus von Atomen	58
2.1.5 Beugung von Materiewellen	59
2.1.6 Korpuskularstruktur der Materie	60
2.1.7 Universeller Charakter des Welle-Teilchen-Dualismus	62
2.2 Die Schrödinger-Gleichung	62
2.2.1 Erhaltungssatz für die Anzahl materieller Teilchen	62

2.2.2	Notwendigkeit einer Wellengleichung und Bedingungen für diese Gleichung	63
2.2.3	Der Begriff des Operators	64
2.2.4	Wellengleichung für ein freies Teilchen	66
2.2.5	Teilchen in einem skalaren Potential	67
2.2.6	Geladenes Teilchen in einem elektromagnetischen Feld	68
2.2.7	Allgemeine Regel für die Aufstellung der Schrödinger-Gleichung	69
2.3	Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung	73
2.3.1	Stationäre Lösungen	73
2.3.2	Allgemeine Eigenschaften der Gleichung	73
Art des Energiespektrums	73	
Aufgaben	75	
3	Eindimensionale Quantensysteme	
Einleitung	78	
3.1	Rechteckpotentiale	79
3.1.1	Allgemeines	79
3.1.2	Potentialstufe, Reflexion und Transmission von Wellen	80
3.1.3	Unendlich hohe Potentialschwelle	85
3.1.4	Rechteckiger, unendlich tiefer Potentialtopf. Diskretes Spektrum.	86
3.1.5	Endlich tiefer, rechteckiger Potentialtopf, Resonanzen	87
3.1.6	Durchgang durch einen rechteckigen Potentialwall, Tunneleffekt	94
3.2	Allgemeine Eigenschaften der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung	95
3.2.1	Eigenschaft der Wronski-Determinante	95
3.2.2	Asymptotisches Verhalten der Lösungen	97
3.2.3	Das Eigenwertspektrum	100
3.2.4	Ungebundene Zustände: Reflexion und Transmission von Wellen	101
3.2.5	Knotenzahl gebundener Zustände	104
3.2.6	Orthogonalitätsrelationen	105
3.2.7	Bemerkung über die Parität	106
Aufgaben	108	
4	Statistische Deutung des Welle-Teilchen-Dualismus und Unschärferelationen	
Einleitung	109	
4.1	Statistische Deutung der Wellenfunktionen in der Wellenmechanik	110
4.1.1	Wahrscheinlichkeiten für die Ergebnisse von Orts- und Impulsmessungen	110
4.1.2	Erhaltung der Norm	113
4.1.3	Der Begriff des Stroms	114
4.1.4	Mittelwerte von Funktionen von r oder p	115
4.1.5	Erweiterung auf Mehrteilchensysteme	118
4.2	Die Heisenbergschen Unschärferelationen	121
4.2.1	Ort-Impuls-Unschärferelationen für ein Teilchen	121

4.2.2	Strenge Formulierung der Ort-Impuls-Unschärferelation	124
4.2.3	Verallgemeinerung: Unschärferelationen zwischen kanonisch konjugierten (kartesischen) Variablen	125
4.2.4	Energie-Zeit-Unschärferelation	126
4.2.5	Unschärferelationen für Photonen	128
4.3	Unschärferelationen und Meßprozeß	129
4.3.1	Unkontrollierbare Störung während des Meßvorgangs	129
4.3.2	Ortsmessungen	132
4.3.3	Impulsmessung	134
4.4	Die Beschreibung physikalischer Vorgänge in der Quantentheorie, Komplementarität und Kausalität	138
4.4.1	Probleme der statistischen Deutung	138
4.4.2	Beschreibung mikroskopischer Erscheinungen und Komplemen- tarität	140
4.4.3	Komplementäre Variablen. Kompatible Variablen	141
4.4.4	Welle-Teilchen-Dualismus und Komplementarität	143
4.4.5	Komplementarität und Kausalität	144
	Aufgaben	146
5	Der Formalismus der Wellenmechanik und seine Deutung	
	Einleitung	149
5.1	Hermitesche Operatoren und physikalische Größen	150
5.1.1	Der Raum der Wellenfunktionen	150
5.1.2	Definition der Mittelwerte	152
5.1.3	Fehlende Schwankung und Eigenwertproblem	154
5.2	Untersuchung des diskreten Spektrums	157
5.2.1	Eigenwerte und Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators	157
5.2.2	Entwicklung einer Wellenfunktion nach orthonormierten Eigenfunktionen	159
5.2.3	Statistische Verteilung der Meßergebnisse für eine Größe, für die der zugeordnete Operator ein vollständiges System von Eigenfunktionen mit endlicher Norm besitzt	161
5.3	Statistik der Messungen im allgemeinen Fall	164
5.3.1	Die Schwierigkeiten beim kontinuierlichen Spektrum. Ein- führung der Diracschen δ -Funktion	164
5.3.2	Entwicklung nach Eigenfunktionen im allgemeinen Fall Vollständigkeitsrelation	168
5.3.3	Statistische Verteilung der Meßergebnisse im allgemeinen Fall	172
5.3.4	Andere Möglichkeiten der Behandlung des kontinuierlichen Spektrums	174
5.3.5	Bemerkungen und Beispiele	177
5.4	Die Bestimmung der Wellenfunktion	179
5.4.1	Meßprozeß und Reduktion des Wellenpakets (Zustandsreduk- tion). Idealmessungen	179

5.4.2	Vertauschbare Observable und kompatible Variable	181
5.4.3	Vollständige Menge kommutierender Observabler	183
5.4.4	Reine und gemischte Fälle	185
5.5	Kommutatoralgebra und ihre Anwendungen	186
5.5.1	Kommutatoralgebra und Eigenschaften der fundamentalen Kommutatoren	186
5.5.2	Vertauschungsrelationen des Drehimpulses	188
5.5.3	Zeitliche Änderung der statistischen Verteilung Konstanten der Bewegung	189
5.5.4	Beispiele für Konstanten der Bewegung. Energie, Parität	191
	Aufgaben	192
6	Klassische Näherung und WKB-Methode	
6.1	Der klassische Grenzfall der Wellenmechanik	194
6.1.1	Allgemeines	194
6.1.2	Das Theorem von Ehrenfest	196
6.1.3	Bewegung und Zerfließen von Wellenpaketen	197
6.1.4	Der klassische Grenzfall der Schrödinger-Gleichung	201
6.1.5	Anwendung auf die Coulomb-Streuung. Rutherford-Formel	205
6.2	Die WKB-Methode	208
6.2.1	Das Prinzip der Methode	208
6.2.2	WKB-Lösungen im eindimensionalen Fall	208
6.2.3	Voraussetzungen für die Gültigkeit der WKB-Näherung	210
6.2.4	Umkehrpunkte und Anschlußbedingungen	211
6.2.5	Durchgang durch einen Potentialwall	213
6.2.6	Energieniveaus eines Potentialtopfes	215
	Aufgaben	217
7	Der allgemeine Formalismus der Quantentheorie	
	Der mathematische Rahmen	
	Superpositionsprinzip und Darstellung dynamischer Zustände durch Vektoren	219
7.1	Vektoren und Operatoren	221
7.1.1	Der Vektorraum. Ket-Vektoren	227
7.1.2	Dualer Raum. Bra-Vektoren	222
7.1.3	Skalarprodukt	223
7.1.4	Lineare Operatoren	225
7.1.5	Tensorprodukt zweier Vektorräume	227
7.2	Hermitesche Operatoren, Projektoren und Observable	229
7.2.1	Adjungierte Operatoren und Konjugationsbeziehungen	229
7.2.2	Hermitesche (oder selbstadjungierte) Operatoren, positiv definite hermitesche Operatoren, unitäre Operatoren	230
7.2.3	Das Eigenwertproblem und Observable	231
7.2.4	Projektoren (oder Projektionsoperatoren)	233
7.2.5	Algebra der Projektionsoperatoren	236

7.2.6	Observable mit einem vollständig diskreten Spektrum	239
7.2.7	Observable im allgemeinen Fall und verallgemeinerte Vollständigkeitsrelation	240
7.2.8	Observablenfunktionen	243
7.2.9	Operatoren, die mit einer Observablen vertauschen. Kommutierende Observable	244
7.3	Darstellungstheorie	245
7.3.1	Allgemeines über endliche Matrizen	245
7.3.2	Quadratische Matrizen	247
7.3.3	Erweiterung auf unendliche Matrizen	250
7.3.4	Darstellung von Vektoren und Operatoren durch Matrizen	252
7.3.5	Transformation von Matrizen	255
7.3.6	Darstellungswchsel	257
7.3.7	Unitäre Transformationen von Operatoren und Vektoren	259
	Aufgaben	261
8	Der allgemeine Formalismus der Quantentheorie	
	Die Beschreibung der physikalischen Erscheinungen	
	Einleitung	264
8.1	Zustände und physikalische Größen	265
8.1.1	Definition der Wahrscheinlichkeiten. Postulate über die Messung	265
8.1.2	Die Observablen eines quantenmechanischen Systems und ihre Vertauschungsrelationen	268
8.1.3	Die Heisenbergschen Unschärferelationen	269
8.1.4	Definition der Zustände und Konstruktion des Raumes \mathfrak{E}	270
8.1.5	Eindimensionale Quantensysteme mit klassischem Analogon	271
8.1.6	Konstruktion des Zustandsraums durch Bildung des Tensor- produkts aus einfacheren Räumen	275
8.2	Die Bewegungsgleichungen	277
8.2.1	Entwicklungsoperator und Schrödinger-Gleichung	277
8.2.2	Das Schrödinger-Bild	280
8.2.3	Das Heisenberg-Bild	281
8.2.4	Heisenberg-Bild und Korrespondenzprinzip	283
8.2.5	Erhaltungsgrößen	284
8.2.6	Bewegungsgleichungen für Mittelwerte und Energie-Zeit- Unschärferelation	285
8.2.7	Andere Bilder. Wechselwirkungsbild	286
8.3	Verschiedene Darstellungen der Theorie	288
8.3.1	Definition einer Darstellung	288
8.3.2	Die Wellenmechanik	289
8.3.3	Die $\{p\}$ -Darstellung	291
8.3.4	Ein Beispiel: Bewegung eines freien Wellenpakets	293
8.3.5	Andere Darstellungen. Darstellungen, in der die Energie diago- nal ist	294

8.4	Quantenstatistik	295
8.4.1	Unvollständig bekannte Systeme und statistische Gemische	295
8.4.2	Der Dichteoperator	296
8.4.3	Zeitliche Entwicklung eines statistischen Gemischs	298
8.4.4	Charakteristische Eigenschaften des Dichteoperators	299
8.4.5	Reine Fälle	300
8.4.6	Klassische und Quantenstatistik	301
	Aufgaben	302

Zweiter Teil Einfache Systeme

9	Lösung der Schrödinger-Gleichung durch Trennung der Variablen	
	Zentralpotential	
	Einleitung	307
9.1	Teilchen in einem Zentralpotential. Allgemeine Behandlung	308
9.1.1	Der Hamilton-Operator in sphärischen Polarkoordinaten	308
9.1.2	Separation der Winkelvariablen. Kugelfunktionen	312
9.1.3	Die Radialgleichung	313
9.1.4	Eigenlösungen der Radialgleichung. Eigenschaften des Spektrums	315
9.1.5	Schlußfolgerungen	316
9.2	Kugelsymmetrischer Potentialtopf. Freies Teilchen	317
9.2.1	Sphärische Bessel-Funktionen	317
9.2.2	Freies Teilchen. Ebene Wellen und freie Kugelwellen	318
9.2.3	Entwicklung der ebenen Welle nach Kugelfunktionen	319
9.2.4	Untersuchung eines kugelsymmetrischen Potentialtopfes	321
9.3	Zweikörperprobleme. Separation der Schwerpunktsbewegung	323
9.3.1	Separation der Schwerpunktsbewegung in der klassischen Mechanik	323
9.3.2	Separation der Schwerpunktsbewegung bei einem quantenmechanischen Zweiteilchensystem	324
9.3.3	Erweiterung auf Systeme mit mehr als zwei Teilchen	326
	Aufgaben	327
10	Streuprobleme. Zentralpotential und Streuphasenmethode	
	Einleitung	331
10.1	Wirkungsquerschnitte und Streuamplituden	331
10.1.1	Definition der Wirkungsquerschnitte	331
10.1.2	Stationäre Streuwelle	333
10.1.3	Beschreibung der Streuung mit Hilfe von Wellenpaketen	334
10.1.4	Potentialstreuung eines Wellenpakets	336
10.1.5	Berechnung der Wirkungsquerschnitte	338
10.1.6	Stoß zweier Teilchen. Laborsystem und Schwerpunktsystem	339
10.2	Streuung an einem Zentralpotential. Streuphasen	344
10.2.1	Partialwellenzerlegung. Streuphasenmethode	344

10.2.2	Halbklassische Beschreibung der Streuung. Stoßparameter	346
10.3	Potential endlicher Reichweite	348
10.3.1	Beziehung zwischen der Streuphase und der logarithmischen Ableitung	348
10.3.2	Verhalten der Streuphase bei niedrigen Energien ($\lambda \rightarrow \infty$)	350
10.3.3	Partialwellen höherer Ordnung. Konvergenz der Reihe ($l \rightarrow \infty$)	351
10.3.4	Streuung an einer harten Kugel	352
10.4	Resonanzstreuung	354
10.4.1	Streuung an einem tiefen Potentialtopf	354
10.4.2	Untersuchung einer Streuresonanz. Metastabile Zustände	356
10.4.3	Beobachtung der Lebensdauer metastabiler Zustände	358
10.5	Verschiedene Formeln und Eigenschaften	360
10.5.1	Integraldarstellung der Streuphasen	360
10.5.2	Potentialabhängigkeit und Vorzeichen der Streuphasen	361
10.5.3	Bornsche Näherung	362
10.5.4	Effektive Reichweite. Die Bethesche Formel	363
	Aufgaben	365
11	Die Coulomb-Wechselwirkung	
	Einleitung	367
11.1	Das Wasserstoffatom	368
11.1.1	Die Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms	368
11.1.2	Größenordnung der Bindungsenergie des Grundzustands	369
11.1.3	Lösung der Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten	370
11.1.4	Energiespektrum. Entartung	372
11.1.5	Die Eigenfunktionen der gebundenen Zustände	374
11.2	Coulomb-Streuung	375
11.2.1	Coulomb-Streuwellen	375
11.2.2	Die Rutherfordsche Streuformel	377
11.2.3	Zerlegung nach Partialwellen	379
11.2.4	Entwicklung der Welle ψ_C nach Kugelfunktionen	380
11.2.5	Modifizierung des Coulomb-Potentials durch eine Wechselwirkung kurzer Reichweite	382
	Aufgaben	384
12	Der harmonische Oszillator	
	Einleitung	385
12.1	Eigenzustände und Eigenvektoren des Hamilton-Operators	386
12.1.1	Das Eigenwertproblem	386
12.1.2	Einführung der Operatoren a , a^+ und N	387
12.1.3	Spektrum und Basissystem von N	388
12.1.4	Die $\{N\}$ -Darstellung	390
12.1.5	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	391
12.1.6	Die $\{Q\}$ -Darstellung. Hermitesche Polynome	392

12.2	Anwendung und verschiedene Eigenschaften	393
12.2.1	Erzeugende Funktion der Eigenfunktionen	393
12.2.2	Integration der Heisenbergschen Bewegungsgleichungen.	395
12.2.3	Der klassische und der quantenmechanische Oszillator	396
12.2.4	Bewegung des minimalen Wellenpakets und klassischer Grenzfall	398
12.2.5	Harmonische Oszillatoren im thermodynamischen Gleichgewicht	400
12.3	Mehrdimensionale isotrope harmonische Oszillatoren	403
12.3.1	Allgemeine Behandlung des p -dimensionalen isotropen Oszillators	403
12.3.2	Zweidimensionaler isotroper Oszillator	405
12.3.3	Dreidimensionaler isotroper Oszillator	407
	Aufgaben	410
	Anhang	413
	A Distributionen, δ -„Funktion“ und Fourier-Transformation	415
	B Spezielle Funktionen und damit zusammenhängende Formeln	431
	Index zu Band 1	449

Erster Teil

Der Formalismus und seine Deutung

. . . « Il lui proposa de faire le voyage
de Copenhague, et lui en facilita les
moyens » (*Candide*).

1 Die Ursprünge der Quantentheorie

Einleitung

In der klassischen Physik, wie sie bis zum Beginn des 20. Jahrhunderts ausschließlich vertreten wurde, ordnet man einem physikalischen System, dessen zeitliche Veränderung man beschreiben will, eine Anzahl von Größen oder dynamischen Variablen zu. Dabei besitzt *jede* dieser Variablen zu jedem Zeitpunkt einen *wohlbestimmten Wert*, und die Angabe dieser Anzahl von Werten definiert den dynamischen Zustand des Systems zu diesem Zeitpunkt. Man nimmt ferner an, daß die zeitliche Entwicklung des physikalischen Systems vollständig bestimmt ist, wenn man seinen Zustand zu einem gegebenen Anfangszeitpunkt kennt. Dieses grundlegende Axiom findet seinen mathematischen Ausdruck darin, daß die dynamischen Variablen einem System von Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit genügen. Die Aufgabe der klassischen theoretischen Physik besteht also in der Angabe der dynamischen Variablen für das zu untersuchende System und im Aufsuchen der Bewegungsgleichungen, die in Übereinstimmung mit den experimentellen Beobachtungen seine zeitliche Entwicklung vorhersagen.

Dieses Programm wurde seit Formulierung der Mechanik durch Newton bis zum Ende des 19. Jahrhunderts mit beachtlichem Erfolg verwirklicht. Jedes experimentell neu entdeckte Phänomen wurde entweder durch Einführung neuer Variabler und neuer Gleichungen oder durch die Abänderung bereits vorliegender Gleichungen in die Theorie integriert, und zwar so, daß sich die neue Erscheinung in das bestehende allgemeine Lehrgebäude widerspruchsfrei einordnete. Während dieser Epoche führte keine der neuen Entdeckungen dazu, daß an der Richtigkeit des Programms selbst Zweifel aufkamen. Die klassische Physik konnte vielmehr ständig Fortschritte in Richtung auf größere Einfachheit und Einheit verzeichnen. Erst als die Kenntnisse über die Phänomene im mikroskopischen Bereich ¹⁾ genauer wurden, stieß die klassische Theorie auf immer zahlreichere Schwierigkeiten und Widersprüche. Rasch wurde klar, daß sich die atomaren und subatomaren Phänomene nicht in den Rahmen der klassischen Lehre einfügten und daß sich ihre Deutung auf vollkommen neue Prinzipien

¹⁾ Es ist wichtig, die Ausdrücke „mikroskopisch“ und „makroskopisch“, von denen wir in diesem Buch häufig Gebrauch machen werden, zu präzisieren. Wir definieren den mikroskopischen Bereich als den Bereich der atomaren oder subatomaren Phänomene, in dem die Längen höchstens einige Angström ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$) betragen. Dem makroskopischen Bereich sind die mit bloßem Auge oder einem gewöhnlichen Mikroskop beobachtbaren Erscheinungen zugeordnet. Die Genauigkeit beträgt hier bis zu 10^{-4} cm .

gründen mußte. Die Entdeckung dieser Prinzipien erfolgte schrittweise in zahlreichen Versuchen. Erst um 1925 wurde mit der Begründung der Quantenmechanik eine zusammenhängende Theorie der mikroskopischen Phänomene entwickelt. Die Ursprünge dieser Theorie sind Gegenstand dieses Kapitels.

Nach einer Skizze der klassischen theoretischen Physik beschreiben wir in diesem Kapitel hauptsächlich Erscheinungen, die das Abgehen von den klassischen Vorstellungen rechtfertigen. Sie sind dem Leser vermutlich bekannt²⁾. Wir werden nur an die wesentlichen Aspekte erinnern, wobei wir vor allem auf die Widersprüche mit der klassischen Theorie Gewicht legen. Das Ende des Kapitels ist einem kurzen Abriß der ersten Deutungsversuche dieser Erscheinungen gewidmet, die unter dem Namen „ältere Quantentheorie“ bekannt sind.

1.1 Das Ende der klassischen Periode

1.1.1 Die klassische theoretische Physik

Am Ende der klassischen Periode integrieren sich die verschiedenen Zweige der Physik zu einem allgemeinen und zusammenhängenden System, das in großen Zügen folgendermaßen aussieht. Man unterscheidet im Universum zwei Kategorien von Objekten: *Materie* und *Strahlung*. Die *Materie* besteht aus genau lokalisierbaren, den Gesetzen der Newtonschen Mechanik unterworfenen Teilchen; der Zustand jedes Teilchens ist in jedem Augenblick durch seine Lage und seine Geschwindigkeit (oder seinen Impuls) definiert, also durch insgesamt sechs dynamische Variablen. Die *Strahlung* gehorcht den Maxwell'schen Gleichungen der Elektrodynamik; ihre – unendlich vielen – dynamischen Variablen sind die Komponenten des elektrischen und magnetischen Feldes in jedem Raumpunkt. Im Gegensatz zur *Materie* kann man die *Strahlung* nicht derart in „Teilchen“ zerlegen, daß diese in ihrer zeitlichen Entwicklung die Eigenschaft der räumlichen Lokalisierbarkeit beibehalten. Sie zeigt vielmehr ein wellenartiges Verhalten, das sich insbesondere in den bekannten Erscheinungen der Interferenz und der Beugung manifestiert.

Die *Korpuskulartheorie der Materie* wurde im 19. Jahrhundert weiterentwickelt. Zunächst auf die Mechanik der Himmelskörper und der makroskopischen festen Körper beschränkt, erschien sie mehr und mehr auch als die grundlegende Theorie der *Materie* im mikroskopischen Bereich, und zwar in dem Maße, wie sich die von den Chemikern vorgeschlagene Atomhypothese bestätigt fand. Zwar kann man diese Hypothese nicht direkt dadurch bestätigen, daß man die Moleküle isoliert und ihre Wechselwirkungen untersucht, aber man kann sie indirekt rechtfertigen, indem man zeigt, daß die makroskopischen Eigenschaften materieller Körper aus den Bewegungsgesetzen der Moleküle folgen, aus denen sie aufgebaut sind.

²⁾ Man findet einen detaillierten Überblick in Veröffentlichungen über Atomphysik, z.B. bei M. BORN, *Atomic Physics*, 6. ed., London (usw.): Blackie 1957, oder W. DÖRING, *Atomphysik und Quantenmechanik*, 1, Berlin–New York: de Gruyter 1973.

Mathematisch handelt es sich um ein sehr verwickeltes Problem, denn bei dieser Hypothese ergeben sich die makroskopischen Größen als Mittelwerte der dynamischen Variablen eines Systems mit sehr vielen Freiheitsgraden³⁾: Es war nicht sinnvoll, die Bewegungsgleichungen eines solchen Systems exakt lösen zu wollen, und so beschränkte man sich auf statistische Untersuchungsmethoden. Es entstand und entwickelte sich eine neue Disziplin, die statistische Mechanik, deren Ergebnisse besonders bei der Untersuchung der Gase (kinetische Gastheorie) und in der Thermodynamik (statistische Thermodynamik) die Korpuskulartheorie der Materie qualitativ und im Rahmen der Rechenmöglichkeiten auch quantitativ bestätigten⁴⁾.

Zur selben Zeit fand die *Wellentheorie der Strahlung* ihre volle Bestätigung. In der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts endete auf dem Gebiet der Optik die alte Kontroverse über die Wellen- oder Teilchennatur des Lichts, als entscheidende Fortschritte in der Behandlung von Wellenausbreitungsproblemen (Fresnel) gemacht wurden. Jetzt war man in der Lage, alle Folgerungen aus der Wellenhypothese zu untersuchen und die Gesamtheit der bekannten optischen Erscheinungen, einschließlich der geometrischen Optik, auf dieser Hypothese zu begründen. Währenddessen entwickelte sich rasch das Studium der elektrischen und magnetischen Vorgänge. Der entscheidende Fortschritt auf diesem Gebiet gelang Maxwell, der 1855 die elektrodynamischen Grundgleichungen aufstellte. Er sagte die Existenz elektromagnetischer Wellen voraus, was später in spektakulärer Weise durch die Entdeckung der Radiowellen (Hertz) bestätigt wurde, deutete die Lichtwellen als eine besondere elektromagnetische Erscheinung und verwirklichte so die Synthese von Optik und Elektrodynamik.

Gegen Ende des 19. Jahrhunderts sind die Erfolge der klassischen Physik beeindruckend. Es scheint, daß alle bekannten physikalischen Phänomene in einer allgemeinen Theorie der Materie und der Strahlung ihre Erklärung finden. Hatte man eine solche Erklärung einmal nicht gefunden, so konnte man dies den mathematischen Schwierigkeiten bei der Lösung des Problems zuschreiben, ohne dabei die Form der Grundgleichungen selbst in Zweifel zu ziehen. Was bei dieser Theorie am meisten beeindruckt, ist ihr hoher Grad an Einheitlichkeit. Der Wunsch, die verschiedenen Zweige ihrer Wissenschaft zu vereinen, ist immer einer der fruchtbarsten Antriebe der Physiker gewesen. Die Physiker jener Epoche schrieben der klassischen Theorie sogar mehr Einheitlichkeit zu, als sie tatsächlich besitzt. Die Wellenausbreitung ist in Wirklichkeit kein speziell elektromagnetischer Vorgang. Schwingungen sind vielmehr zunächst bei materiellen Körpern untersucht worden (schwingende Saiten, Oberflächenwellen von Flüssigkeiten usw.), und der Wellencharakter ist vor

³⁾ Die Zahl N der Moleküle pro Mol ist $6,02 \cdot 10^{23}$. Die erste genaue, von Loschmidt 1865 durchgeführte Bestimmung von N beruhte auf der Anwendung der kinetischen Gastheorie.

⁴⁾ In diesem Zusammenhang sollte nicht unerwähnt bleiben, daß bei allen Überlegungen der statistischen Mechanik stets eine grundsätzliche statistische Hypothese eine Rolle spielt, nämlich die Hypothese vom molekularen Chaos. Auf sie kann man nicht verzichten, ohne die statistische Methode selbst aufzugeben. Obwohl diese Hypothese intuitiv richtig zu sein scheint, erweist sich ihre strenge Rechtfertigung (Ergodentheorem) als besonders schwierig.

den optischen bei den akustischen Vorgängen entdeckt worden. Die Existenz von Wellen in materiellen Körpern steht übrigens durchaus nicht im Widerspruch zur Korpuskulartheorie; es handelt sich dabei um eine makroskopische Erscheinung, die sich aus den mikroskopischen Bewegungsgleichungen herleiten läßt, wenn man ein entsprechendes Kraftgesetz zugrunde legt. In Analogie dazu schrieben nun die klassischen Physiker den elektromagnetischen Wellen einen Träger zu, eine Art materiellen Fluidums, dem sie den Namen Äther gaben und dessen Struktur und mechanische Eigenschaften es aufzuklären galt. So erschien die Materie allein als fundamental und der Newtonschen Mechanik mit solchen Kraftgesetzen unterworfen, daß sie unter bestimmten Bedingungen der Sitz verschiedener wellenartiger Erscheinungen sein konnte, von denen dann die elektromagnetischen Schwingungen nur ein Beispiel sind.

Diese Vorstellung, die später vollständig aufgegeben wurde, führte in jener Epoche zu einer ganzen Reihe von Experimenten, die nicht viel zur Aufklärung über die Natur des Äthers beitrugen. Ein Versuch aber gibt Anlaß zu einem grundlegenden Umsturz der klassischen Physik. Es handelt sich um das berühmte Experiment von Michelson-Morley (1887), mit dem die Bewegung der Erde relativ zum Äther nachgewiesen werden sollte; sie untersuchten, ob sich die Lichtgeschwindigkeit bezüglich der Erde mit der Ausbreitungsrichtung ändert. Der negative Ausgang dieses Experiments ist bekannt. Nach einigen mehr oder weniger künstlichen Deutungsversuchen wird dieses augenscheinliche Paradoxon endgültig von Einstein (1905) im Rahmen seiner *Relativitätstheorie* erklärt. Dies gelingt ihm durch eine kritische Analyse der Begriffe Raum und Zeit, die zur Abkehr vom Begriff der absoluten Zeit und zur Verwerfung eines Teils der Newtonschen Axiome führt. Letztere folgen vielmehr näherungsweise aus der Relativitätstheorie, wenn die Teilchengeschwindigkeiten gegenüber der Lichtgeschwindigkeit c klein sind. Wir werden am Ende des Buches hierauf zurückkommen, wenn wir die relativistische Quantenmechanik behandeln. Wichtig ist an dieser Stelle die Feststellung, daß diese Theorie die klassische Physik und ihr Programm nicht in Frage stellt.

1.1.2 Der Fortschritt in der Kenntnis der mikroskopischen Vorgänge und das Auftreten der Quanten in der Physik

Um die Jahrhundertwende konzentrieren sich die Anstrengungen der Experimentalphysiker hauptsächlich auf zwei eng miteinander zusammenhängende Gebiete: An erster Stelle steht die genaue Untersuchung der mikroskopischen Struktur der Materie, an zweiter die Bestimmung der Wechselwirkung der Teilchen untereinander und mit dem elektromagnetischen Feld.

Die die Struktur der Materie betreffenden ersten Entdeckungen werden durch die Untersuchung der bei der Entladung verdünnter Gase auftretenden Strahlen geliefert, also der Kathoden- und Kanalstrahlen. Man deutet sie vollkommen richtig als Strahlen elektrisch geladener und mehr oder weniger schneller Teilchen. So wird das *Elektron* (J. J. Thomson, 1897) als Teilchen der Kathodenstrahlung entdeckt.

Sein Verhalten im elektromagnetischen Feld wird experimentell untersucht und eine vollständige Theorie der Wechselwirkung zwischen Elektronen und elektromagnetischen Wellen aufgestellt (Theorie des Elektrons von Lorentz ⁵⁾).

Allmählich wird auch die lange nur als Arbeitshypothese angesehene Existenz von Atomen und Molekülen als Realität akzeptiert. Den überzeugendsten Beweis liefert die Untersuchung der Brownschen Bewegung, also der Bewegung sehr feiner Teilchen einer Suspension in einer Flüssigkeit oder einem Gas. Diese Bewegung wird den zahlreichen Stößen zugeschrieben, die die Teilchen von einem Teil der sie umgebenden Moleküle erleiden; sie ist eine Reproduktion der Molekularbewegung im großen Maßstab und kann quantitativ zu den statistischen Bewegungsgesetzen der Moleküle selbst in Beziehung gesetzt werden (Einstein, Smoluchovski, 1905). Die systematischen Messungen von Perrin (1908) bestätigen diese Hypothese und liefern mehrere genaue und übereinstimmende Bestimmungen der Avogadro'schen Zahl. Nach diesem entscheidenden Erfolg bezweifeln die Physiker die Existenz der atomaren oder subatomaren Teilchen nicht mehr. Immer zahlreichere und vollkommene experimentelle Techniken ermöglichen die Beobachtung einzelner mikroskopischer Vorgänge oder das Zählen einzelner mikroskopischer Teilchen (Messung der elektrischen Elementarladung durch Millikan 1910, erste Beobachtung der Bahnen geladener Teilchen in der Wilson-Kammer 1912, der erste Geigerzähler 1913). Die Entwicklung dieser „direkten“ Beobachtungstechniken hat nie aufgehört; sie stellen auch heute fast das gesamte Rüstzeug dar, dessen sich die Experimentatoren bei der Aufklärung mikroskopischer Vorgänge bedienen.

Zur gleichen Zeit wird mit der Entdeckung der Radioaktivität (1896) ein neues Kapitel der Physik eröffnet; zum ersten Mal werden Eigenschaften von Atomkernen erkennbar. Diese wichtige Entdeckung gibt dem Physiker ein Mittel zur Untersuchung der Atomstruktur in die Hand: die aus Heliumkernen von großer Geschwindigkeit bestehende α -Strahlung. Rutherford (1911) setzt verschiedene Targets der α -Strahlung aus, d. h. er untersucht systematisch die Streuung von α -Teilchen an Atomen, und es gelingt ihm, das erste moderne Bild vom Atom zu entwickeln.

Das *Rutherford-Atom* wird aus einem sehr kleinen Kern (Durchmesser 10^{-13} bis 10^{-12} cm) gebildet, um den eine bestimmte Anzahl (Z) von Elektronen kreist. Fast die gesamte Masse ist im Kern konzentriert. Er trägt eine positive Ladung Ze , die die Gesamtladung der Elektronen $-Ze$ kompensiert, so daß das ganze Gebilde nach außen elektrisch neutral ist. Das Rutherford-Atom ähnelt so einem Sonnensystem im kleinen, bei dem die Gravitationskräfte durch elektrische Kräfte ersetzt sind. Die Coulomb-Anziehung des Kerns und die gegenseitige Abstoßung der Elektronen bewirken, daß diese um den Kern stabile Bahnen beschreiben, deren Ausdehnung von atomarer Größenordnung, also etwa 10^{-8} cm ist.

Während der Korpuskularcharakter der Materie durch die Fortschritte in der Atomphysik bestätigt zu werden scheint, vervollständigt sich die Kenntnis des Spektrums

⁵⁾ Siehe L. ROSENFELD, *Theory of Electrons*; Publ. Co. Amsterdam, North Holland, 1951.

der elektromagnetischen Wellen mit der Entdeckung der Röntgenstrahlen (1895) im Bereich der kleinen Wellenlängen. Deren Wellencharakter wird durch Beugungsexperimente an Kristallen (von Laue, 1912) nachgewiesen. Schließlich erkennt man nicht viel später die elektromagnetische Natur der γ -Strahlung radioaktiver Stoffe. Abb. 1.1 zeigt die Wellenlängenskala der elektromagnetischen

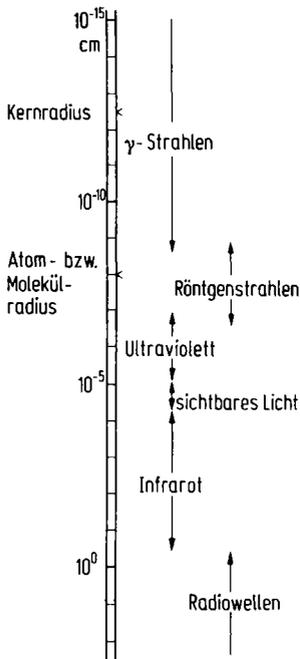


Abb. 1.1 Das elektromagnetische Spektrum

Strahlung. Die Spektralanalyse erweitert aber nicht nur ihren Bereich, sondern wird gleichzeitig immer genauer. Sie liefert damit eine Fülle von Informationen über die Probleme der Emission, der Streuung und der Absorption des Lichts durch die Materie, anders gesagt, über die Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlung im mikroskopischen Bereich. Die bereits erwähnte Lorentzsche Elektrodentheorie erlaubt prinzipiell die Vorhersage aller dieser Erscheinungen. Beim Vergleich der Voraussagen dieser Theorie mit den experimentell gewonnenen Ergebnissen zeigen sich nun aber die ersten Widersprüche zwischen klassischer Theorie und Erfahrung.

Die ersten Schwierigkeiten treten auf, als man die Spektralverteilung der elektromagnetischen Strahlung im thermodynamischen Gleichgewicht mit der Materie untersucht. Der typische Fall ist der *schwarze Körper*; *per definitionem* ist das ein Körper, der die gesamte auftreffende Strahlung absorbiert. Die sehr allgemein gehaltenen thermodynamischen Überlegungen zeigen, daß die von einem schwarzen Körper ausgesandte Strahlung allein von seiner Temperatur abhängt. Die spektrale Intensitätsverteilung der von einem schwarzen Körper emittierten Strahlung ist folg-

lich ein fundamentaler Ausdruck, der sich mit den Methoden der statistischen Thermodynamik aus den allgemeinen Gesetzen der Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlung herleiten lassen muß. Die aus der klassischen Theorie folgende Beziehung steht nun in krassem Widerspruch zur Erfahrung. Im Jahre 1900 kann Planck die Schwierigkeit beseitigen, indem er das klassische Gesetz der Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlung aufgibt ⁶⁾. Er stellt die Hypothese auf, daß der Energieaustausch zwischen Materie und Strahlung nicht kontinuierlich erfolgt, sondern in diskreten und unteilbaren Einheiten oder *Energiequanten*. Er zeigt, daß das Energiequant proportional zur Frequenz ν der Strahlung sein muß:

$$\epsilon_\nu = h\nu,$$

und erhält einen Ausdruck für das Spektrum, der sich nach passender Wahl der Proportionalitätskonstanten mit der experimentell festgestellten Verteilung deckt. Diese Konstante h ist seitdem unter dem Namen *Plancksche Konstante* bekannt. Sie hat die Dimension einer Wirkung (Energie \times Zeit oder Impuls \times Länge). Im folgenden werden wir die Konstante stets in der Form

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \times 10^{-27} \text{ erg}\cdot\text{s}$$

gebrauchen.

Bei ihrer Veröffentlichung erschien die Plancksche Hypothese als unannehmbar. Die Physiker weigerten sich fast einmütig, etwas anderes als einen mathematischen Kunstgriff in ihr zu sehen, der eines Tages im Rahmen der klassischen Physik erklärt werden könnte. Selbst der Erfolg der Planckschen Theorie konnte nicht als unwiderlegbarer Beweis dafür angesehen werden, daß der Energieaustausch zwischen Materie und Strahlung tatsächlich in Quanten erfolgt. Das Verteilungsgesetz von Planck ist ein makroskopisches Gesetz, das aus dieser Hypothese mit statistischen Methoden hergeleitet wurde. Es stellt also nur eine indirekte Bestätigung des Sachverhalts dar; daher konnte man die Gültigkeit der Quantenhypothese ebenso bezweifeln, wie man lange Zeit die Gültigkeit der Atomhypothese bezweifelt hatte, weil keine direkte Bestätigung im mikroskopischen Bereich zu erhalten war. Indessen wurde die Plancksche Hypothese durch eine ganze Reihe von experimentell gewonnenen Erkenntnissen gesichert und vervollständigt. Sie erlaubten es, Elementarprozesse auf direktem Wege zu analysieren und die Existenz von Diskontinuitäten in der Entwicklung physikalischer Systeme des mikroskopischen Bereiches eindeutig dort aufzuzeigen, wo die klassische Theorie eine kontinuierliche Entwicklung vorhersagte.

⁶⁾ Eine detaillierte Behandlung der Theorie der schwarzen Strahlung findet sich bei M. Born a.a.O. (s. Anm. 2).

1.2 Lichtquanten oder Photonen

Eine Reihe von experimentell festgestellten Tatsachen erzwingt die radikale Revision der Strahlungstheorie von Maxwell und Lorentz und teilweise eine Rückkehr zur alten Korpuskulartheorie. Es handelt sich vor allem um den *Photo-Effekt* und den *Compton-Effekt*.

1.2.1 Der photoelektrische Effekt

Den ersten Schritt in dieser Richtung unternimmt Einstein in seiner berühmten Abhandlung von 1905 über den photoelektrischen Effekt. Die allgemeine Haltung gegenüber der Planckschen Theorie war die: Man sagte, „alles verhalte sich so“, als ob der Energieaustausch zwischen der Strahlung und dem schwarzen Körper quantenhaft erfolge, und versuchte dann, diese *ad hoc*-Hypothese mit der Wellentheorie in Übereinstimmung zu bringen. Einstein nimmt nun die entgegengesetzte Haltung ein und geht viel weiter als Planck, der sich darauf beschränkte, die Unstetigkeit beim Vorgang der Absorption bzw. der Emission einzuführen. Einstein postuliert, daß das Licht selbst aus Strahlen von Korpuskeln, den Photonen, mit der Energie $h\nu$ und der Geschwindigkeit c (= Vakuum-Lichtgeschwindigkeit = 3×10^{10} cm/s) besteht. Er zeigt dann, wie man mit dieser damals überraschenden Hypothese eine Anzahl von bis dahin ungeklärten Vorgängen deuten kann, unter denen der photoelektrische Effekt herausragt.

Man bezeichnet mit diesem Namen die Emission von Elektronen aus einem Alkali-metall, das man im Vakuum mit ultraviolettem Licht bestrahlt. Die Stärke des so erzeugten elektrischen Stroms ist proportional der Intensität der vom Metall aufgenommenen Strahlung. Dagegen hängt die Geschwindigkeit der Elektronen nicht von der Intensität der Strahlung, sondern nur von deren Frequenz ab, unabhängig davon, in welcher Entfernung sich die Lichtquelle befindet (Lenard, 1902). Die Zahl der pro Sekunde emittierten Elektronen ist proportional der Intensität der Strahlung, also umgekehrt proportional dem Quadrat der Entfernung der Lichtquelle. Die Erklärung Einsteins ist sehr einfach. Wie groß auch der vom Licht seit seiner Emission durchlaufene Weg sein mag, es tritt in Korpuskeln mit der Energie $h\nu$ auf. Wenn nun eines dieser Photonen auf ein Elektron im Metall trifft, wird es vollständig absorbiert, und das Elektron erhält die Energie $h\nu$. Dieses muß beim Verlassen des Metalls eine Arbeit gleich seiner Bindungsenergie W aufbringen, so daß die beobachteten Elektronen eine wohlbestimmte kinetische Energie besitzen:

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W. \quad (1.1)$$

Diese quantitative Theorie wird von der Erfahrung völlig bestätigt. W ist gemäß der Vorhersage eine charakteristische Konstante des bestrahlten Metalls. Die Konstante h aber hat genau denselben numerischen Wert wie die in dem Ausdruck für das Spektrum der schwarzen Strahlung auftretende Konstante.

Angesichts dieses Erfolges der Korpuskulartheorie muß untersucht werden, ob nicht auch die klassische Wellentheorie in der Lage ist, den photoelektrischen Effekt zu erklären. Das ist nicht von vornherein auszuschließen. So transportiert eine Lichtwelle eine bestimmte Energiemenge und kann, je nachdem wie sie in das Metall eindringt, diese ganz oder teilweise abgeben. Die fortlaufend im Metall angesammelte Energie wird schließlich auf bestimmte Elektronen konzentriert, denen es so gelingt, aus dem Metall zu entweichen. Man kann sich vorstellen, daß mittels eines genauer zu klärenden Mechanismus ein Elektron erst dann entweichen kann, wenn es eine Energiemenge vom Betrag $h\nu$ aufgenommen hat. Der entscheidende Unterschied zwischen dieser Erklärung und der Korpuskulartheorie besteht in der stetigen und fortlaufenden Ansammlung von Energie im Metall. Folglich könnte die photoelektrische Emission nicht sofort auftreten, sondern erst, wenn das Metall die Energie $h\nu$ empfangen hat. Wenn man mit genügend feinen metallischen Teilchen arbeitet, kann die minimale Verzögerung zwischen dem Beginn der Einstrahlung und dem Beginn der Emission so lang gemacht werden, daß sie experimentell beobachtbar ist.

Hierzu sind von Meyer und Gerlach (1914) Versuche an Metallstaub gemacht worden. Da die Strahlungsintensität und die Größe der Staubkörner bekannt waren, konnte die Mindestzeit bestimmt werden, mit der ein Staubteilchen bestrahlt werden mußte, um die zur Emission eines Elektrons nötige Energie $h\nu$ zu absorbieren. Sie hätte unter den vorliegenden Versuchsbedingungen einige Sekunden betragen müssen. Statt dessen beobachteten sie jedes Mal die Emission von Elektronen sofort zu Beginn der Bestrahlung. Daraus muß man schließen, daß die Wellentheorie des Lichts zumindest in ihrer klassischen Form dem photoelektrischen Effekt überhaupt nicht Rechnung tragen kann.

1.2.2 Der Compton-Effekt

Der Compton-Effekt ist eine weitere Bestätigung der Photonentheorie zum Nachteil der Wellentheorie. Man beobachtet ihn (Compton, 1924) bei der Streuung von Röntgenstrahlen an freien (oder schwach gebundenen) Elektronen. Die Wellenlänge der gestreuten Strahlung ist größer als die der einfallenden Strahlung; die Differenz $\Delta\lambda$ ist eine Funktion des Winkels zwischen der Richtung der einfallenden und der der gestreuten Strahlung,

$$\Delta\lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.2)$$

worin m die Ruhemasse des Elektrons ⁷⁾ ist. Man sieht, daß $\Delta\lambda$ von der Wellenlänge der einfallenden Strahlung unabhängig ist. Compton und Debye zeigten, daß der Compton-Effekt auf einen einfachen elastischen Stoß zwischen einem Pho-

⁷⁾ Die Länge \hbar/mc , Größenordnung zwischen der der Strahlung der Atome und der der Atomkerne ($\hbar/mc = 3,86 \cdot 10^{-10}$ cm), spielt eine Rolle in der Quantentheorie des Elektrons. Man nennt sie Compton-Wellenlänge des Elektrons.

ton des einfallenden Lichts und einem Elektron aus der bestrahlten Probe zurückzuführen ist. Um diese korpuskulartheoretische Erklärung des Effekts zu diskutieren, genügt es, einige Eigenschaften der Photonen anzugeben, wie sie der Einsteinschen Hypothese direkt zu entnehmen sind. Da sie die Geschwindigkeit c haben, sind die Photonen Teilchen mit der Masse Null⁸⁾. Zwischen dem Impuls p und der Energie ϵ eines Photons besteht also die Beziehung

$$\epsilon = pc. \quad (1.3)$$

Betrachten wir eine ebene monochromatische Lichtwelle:

$$\exp\left(2\pi i\left(\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}}{\lambda} - \nu t\right)\right)$$

\mathbf{u} ist der Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung, λ die Wellenlänge, ν die Frequenz: $\lambda\nu = c$. Entsprechend der Einsteinschen Hypothese repräsentiert diese Welle einen Strahl von Photonen der Energie $h\nu$. Der Impuls dieser Photonen hat die Richtung \mathbf{u} und sein Betrag ist nach (1.3) gleich

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Dieser Zusammenhang ist ein Spezialfall der de Broglie-Beziehung, mit der wir uns im zweiten Kapitel beschäftigen werden. Es ist oft zweckmäßig, die Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu$ und den Wellenvektor $\mathbf{k} = (2\pi/\lambda)\mathbf{u}$ der ebenen Welle einzuführen. Die Beziehungen lauten dann:

$$\epsilon = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.4)$$

Die Korpuskulartheorie des Compton-Effekts besteht nun einfach im Anschreiben des Energie- und Impulserhaltungssatzes für den elastischen Stoß zwischen einfallendem Photon und Elektron. Seien \mathbf{p} , \mathbf{p}' der Anfangs- bzw. Endimpuls des Photons, \mathbf{p}' der Impuls des Elektrons nach dem Stoß (Abb. 1.2), so lauten die Erhaltungssätze

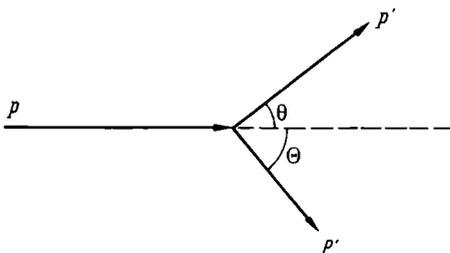


Abb.1.2 Compton-Stoß eines Photons mit einem ruhenden Elektron

8) Aufgrund des Relativitätsprinzips besteht zwischen der Ruhemasse m , der Energie ϵ und dem Impuls p eines Teilchens die Beziehung $\epsilon^2 - p^2c^2 = m^2c^4$; seine Geschwindigkeit ist $v = \partial\epsilon/\partial p = pc^2/\epsilon$. Wenn $v = c$, ist $\epsilon = pc$ und $m = 0$.

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \mathbf{p}' + \mathbf{P}', \\ mc^2 + pc &= \sqrt{P'^2 c^2 + m^2 c^4} + p'c. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Mit diesen Gleichungen ist der Stoß vollständig bestimmt, wenn man die Anfangsbedingungen und die Emissionsrichtung des gestreuten Photons kennt. Berücksichtigt man die angeführten Beziehungen (1.4), so kann man leicht die Compton-Formel (2) herleiten, die damit auch ihre theoretische Erklärung findet (s. Aufgabe 1). Seit den ersten Arbeiten von Compton sind auch die anderen Vorhersagen dieser Theorie experimentell bestätigt worden. Die Rückstoßelektronen wurden beobachtet, und die Abhängigkeit ihrer Energie vom Emissionswinkel Θ ist genau die, welche man aus den Gleichungen (1.1) herleitet. Koinzidenzmessungen zeigen, daß die Emission des gestreuten Photons und des Rückstoßelektrons gleichzeitig stattfindet und daß die Korrelation zwischen den Emissionswinkeln θ und Θ mit der Theorie übereinstimmt.

Es ist lehrreich, diese Ergebnisse von Vorhersagen der klassischen Theorie gegenüberzustellen. Die Maxwell-Lorentzsche Theorie sagt voraus, daß jedes der Strahlung ausgesetzte Elektron einen Teil der einfallenden elektromagnetischen Energie absorbiert und dann als Strahlung derselben Frequenz wieder emittiert. Im Gegensatz zum Impuls der absorbierten Strahlung ist der Gesamtimpuls der emittierten Strahlung Null. Der Vorgang der Lichtstreuung ist also begleitet von einer kontinuierlichen Impulsübertragung (Strahlungsdruck) auf das bestrahlte Elektron, das somit eine dauernde Beschleunigung in Richtung der einfallenden Welle erfährt. Das Absorptionsgesetz und das Gesetz der Reemission mit derselben Frequenz gilt im Ruhesystem des Elektrons. Weil sich aber das Elektron bewegt, sind die im Laborsystem beobachteten Frequenzen auf Grund des Dopplereffekts verschieden. Die Wellenlängenverschiebung $\Delta\lambda$ hängt vom Beobachtungswinkel θ der gestreuten Strahlung ab. Eine einfache Rechnung ergibt

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{P_{cl.} c}{E_{cl.} - P_{cl.} c} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.5)$$

wobei λ die Wellenlänge der einfallenden Strahlung, $P_{cl.}$ den Impuls des sich in Ausbreitungsrichtung bewegenden Elektrons und $E_{cl.} = \sqrt{m^2 c^4 + P_{cl.}^2 c^2}$ seine Energie darstellen. $\Delta\lambda$ ist eine wachsende Funktion von $P_{cl.}$ und nimmt während der Bestrahlung fortwährend zu.

Die klassischen Vorhersagen stimmen also nicht mit den experimentell festgestellten Tatsachen überein. Der wesentliche Mangel der klassischen Theorie des Compton-Effekts ist die Vorhersage einer *kontinuierlichen* Impuls- und Energieübertragung der Strahlung auf alle der Bestrahlung unterworfenen Elektronen, während der beobachtete experimentelle Effekt eine *diskontinuierliche* und *augenblickliche* Übertragung auf bestimmte Elektronen ist. Auf dieselbe Schwierigkeit stieß man beim lichtelektrischen Effekt. Die beiden Effekte haben übrigens eine gewisse Verwandtschaft: Die Compton-Streuung kann man als Lichtabsorption mit anschließender Reemission ansehen, während der photoelektrische Effekt eine reine und einfache Absorption darstellt.

Die Einführung von Lichtquanten ist unerlässlich, wenn man dem diskontinuierlichen Charakter der Impuls- und Energieübertragung auf Elektronen Rechnung tragen will. Nichtsdestoweniger läßt die Ähnlichkeit zwischen der klassischen Formel (1.5) und der richtigen Formel (1.2) für den Compton-Effekt vermuten, daß die klassische Theorie in einem gewissen Zusammenhang mit dem tatsächlichen Phänomen steht. Eine nähere Untersuchung ist sinnvoll.

Der Compton-Effekt wurde oben unter der Annahme behandelt, daß das Elektron anfänglich in Ruhe ist. Natürlich bleibt die Theorie auch gültig, wenn seine Anfangsgeschwindigkeit nicht gleich Null ist. Man kann die Gleichungen (1.1) und die Compton-Formel ohne Schwierigkeiten verallgemeinern. Für den Sonderfall, daß sich das Elektron parallel zur einfallenden Lichtwelle mit dem Impuls P und der Energie $E = \sqrt{m^2 c^4 + P^2 c^2}$ bewegt, ergibt sich (s. Aufgabe 1)

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{(P + p)c}{E - Pc} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1.6)$$

Man erkennt die sehr große Ähnlichkeit zwischen diesem und dem klassischen Ausdruck (1.5). Um vom einen zum anderen zu gelangen, muß man den Impuls P_{cl} im Zähler durch die Größe $P + p$ (von der Größenordnung des Impulses nach dem Stoß Photon – Elektron) und im Nenner (im Ausdruck $E_{cl} - P_{cl}c$) durch den Impuls P vor dem Stoß ersetzen. Doch unterscheidet sich der dem Ausdruck (1.6) zugrunde liegende Mechanismus sehr deutlich von dem der klassischen An-

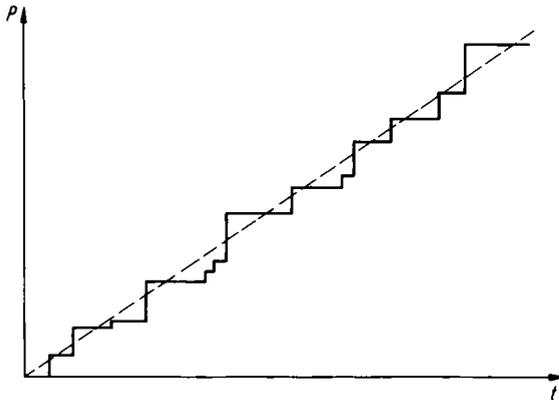


Abb. 1.3 Zeitliche Änderung des Impulses P eines monochromatisch bestrahlten Elektrons durch aufeinanderfolgende Compton-Stöße. (Die Abbildung ist sehr schematisch; ihre Grenzen werden im vierten Kapitel im Zusammenhang mit den Unschärfelationen diskutiert.) Punktiert der von der klassischen Theorie angegebene Verlauf $P_{cl}(t)$.

nahmen. Unter der Einwirkung einer länger dauernden Bestrahlung empfängt jedes Elektron einen ersten Impulsübertrag, der es in Bewegung setzt, darauf eine zweite und so fort. Der Impulsübertrag ändert sich von einem Stoß zum anderen um einen mittleren Wert ungefähr gleich dem Impuls p der einfallenden Photonen. Es ist diese Änderung des Impulses durch *diskontinuierliche* Quanten der Größenordnung p und die daraus resultierende Verschiebung $\Delta\lambda$, die wir den von der klassischen Theorie vorhergesagten *kontinuierlichen* Impulsänderungen gegenüberstellen wollen (Abb. 1.3).

Ein solcher Vergleich ist nur für den Grenzfall sinnvoll, daß die Quanten als unendlich klein und unendlich zahlreich angesehen werden können und daß die mittlere Wirkung einer sehr großen Anzahl von aufeinanderfolgenden Stößen betrachtet wird. Weil das Elektron im Mittel pro Stoß einen Impuls von der Größe p aufnimmt und weil nach einer sehr großen Zahl von Stößen die Schwankungen sich gegenseitig aufheben, ist die resultierende Wirkung praktisch dieselbe, wie wenn es bei jedem Stoß diesen mittleren Impuls empfängt. Der Impuls P des Elektrons wächst also durch aufeinanderfolgende Sprünge in Richtung der einfallenden Strahlung. Diese Sprünge sind von der Größe des Quantums $p = h\nu/c$, und der Impulszuwachs kann in dem Maße mit einem kontinuierlichen Zuwachs verglichen werden, wie die Größe p als unendlich klein angesehen werden kann. Man kann in den Grenzen dieser Näherung einen mittleren Impuls $\langle P \rangle$ definieren, der kontinuierlich mit der Zeit wächst. Eine gründliche experimentelle Untersuchung, auf die wir hier nicht näher eingehen, zeigt, daß die Änderung dieses mittleren Impulses als Funktion der Zeit genauso ausfällt, wie sie die klassische Theorie vorhersagt, anders formuliert, daß die Vektoren $\langle P \rangle$ und P_{cl} gleich sind. Da schließlich der klassische Wert P_{cl} , definiert mit der Genauigkeit p , in jedem Augenblick gleich dem Mittelwert von P ist, ist die von der klassischen Theorie [Gleichung (1.5)] vorhersagte Compton-Verschiebung in jedem Augenblick gleich dem Mittelwert der tatsächlich beobachteten Compton-Verschiebung [Gleichung (1.6)].

1.2.3 Lichtquanten und Interferenzerscheinungen

Wenn es einerseits Beweise dafür gibt, daß die klassische Wellentheorie im makroskopischen Bereich richtig ist, so ist andererseits klar, daß im mikroskopischen Bereich allein die Korpuskulartheorie des Lichts so typische Absorptions- und Streuphänomene wie den Photo- und den Compton-Effekt erklären kann. Es bleibt also zu untersuchen, wie die Photonenhypothese mit den wellenartigen Erscheinungen der Interferenz und der Beugung in Einklang gebracht werden kann.

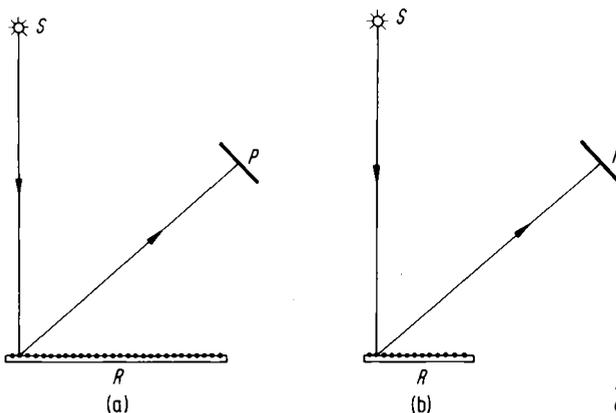


Abb. 1.4 Lichtstreuung an einem Gitter

Betrachten wir zu diesem Zweck die Begung von monochromatischem Licht an einem parallelen Gitter (Abb. 1.4). Auf einem geeignet angebrachten Schirm läßt sich die Interferenzfigur sichtbar machen. Die quantitative Beobachtung kann auf verschiedene Weise erfolgen, z.B. indem man den Schirm durch eine photographische Platte ersetzt und diese nach einer bestimmten Bestrahlungsdauer entwickelt. Die Interferenzfigur erscheint bei der Entwicklung als Negativ; die Schwärzung jedes Elements der Plattenfläche ist dabei proportional der Menge des eingestrahnten Lichts. Tatsächlich erfolgt die Absorption des Lichts durch die Platte quantenhaft: Jedes in die Platte eindringende Photon regt einen photoempfindlichen Mikrokristall an, der bei der Entwicklung dann einen schwarzen Fleck ergibt⁹⁾. Es ist nicht möglich, diese Flecken mit bloßem Auge zu unterscheiden; man beobachtet praktisch eine mehr oder weniger ausgeprägte kontinuierliche Schwärzung, entsprechend der mehr oder weniger großen Dichte der Stöße. Man kann aber die Existenz getrennter Stöße tatsächlich feststellen, wenn man die Platte mit einem genügend starken Mikroskop beobachtet. Unter normalen Versuchsbedingungen ist die Zahl der auf die Platte treffenden Photonen sehr groß, und die quasikontinuierliche Verteilung der Stöße liefert die von der Wellentheorie vorhergesagte Interferenzfigur.

Indem man auf diese Weise ausschließlich von experimentell gesicherten Tatsachen ausgeht, könnte man *a priori* die vollständige Erklärung des Phänomens im Rahmen einer reinen Korpuskulartheorie liefern. Man stellt zunächst fest, daß die Photonen sich unabhängig voneinander bewegen und daß ihre gegenseitige Wechselwirkung völlig vernachlässigbar ist. Tatsächlich bleibt das Interferenzbild dasselbe, wenn man die Intensität der Lichtquelle verringert und dafür die Dauer der Bestrahlung verlängert, so daß die auf das Gitter fallende Lichtmenge konstant bleibt. Mit anderen Worten: Wenn man eine bestimmte (sehr große) Zahl N von Photonen auf das Gitter schickt, so ist die Verteilung der Stöße auf der Platte dieselbe, ob nun die Photonen in Gruppen einfallen oder nicht, und zwar auch im Grenzfall sehr schwacher Intensitäten, bei dem die Photonen „eins nach dem andern auf das Gitter treffen“. Es würde sich dieselbe Verteilung ergeben, wenn man ein *einzelnes Photon* auf das Gitter schickt und dieses Experiment N -mal wiederholt.

Untersuchen wir also das Problem der Streuung eines Photons am Gitter. Da unter den gegebenen Versuchsbedingungen der Anfangszustand des Systems (Photon + Gitter) nicht genau bekannt ist, kann man die Bahn des Photons und damit den Stoß des gestreuten Photons auf das Gitter nicht bestimmen, sondern nur die statistische Verteilung der möglichen Bahnen und Stöße. Experimentell beobachtet man tatsächlich nur eine statistische Verteilung der Stöße, nämlich bis auf eine

⁹⁾ Diese Beschreibung ist extrem vereinfacht. In Wirklichkeit reicht der Stoß eines einzelnen Photons nur dann zur Sensibilisierung des Mikrokristalls aus, wenn die Energie des Photons genügend groß ist (fernes Ultraviolett oder Röntgenstrahlung). Doch auch in diesem Fall sind besondere experimentelle Bedingungen erforderlich, damit man mit Sicherheit sagen kann, daß jedes auf die Platte auftreffende Photon genau einen Mikrokristall anregt (Mikrokristalle von passender Größe, genügend dicke Platte usw.). Diese Schwierigkeiten kann man aber übergehen, ohne das Wesentliche der hier angegebenen Schlußfolgerung zu berühren.

Konstante das Verteilungsgesetz der Lichtintensität, das zum Beugungsbild auf der Photoplatte führt. Nun ist bekannt, auf welche Weise das Auflösungsvermögen eines Gitters von der Zahl seiner (äquidistanten) Striche abhängt; man verändert die Interferenzfigur wesentlich, wenn man eine Hälfte des Gitters abdeckt. Genau in diesem Punkt steht die Korpuskulartheorie in krassem Widerspruch zur Erfahrung. Denn wie auch die Bewegungsgleichungen der mit den Teilchen des Gitters in Wechselwirkung befindlichen Photonen aussehen mögen, die Verteilung der Bahnen der an der linken Hälfte des Gitters gestreuten Photonen kann nicht von der Anwesenheit (Abb. 1.4 a) oder Abwesenheit (Abb. 1.4 b) der rechten Hälfte des Gitters abhängen, es sei denn, das einzelne Photon hat eine Ausdehnung von der Größenordnung des gesamten Gitters. Wenn überdies Lichtquelle und Photoplatte genügend weit voneinander entfernt sind, ist die Verteilung der Stöße der an den beiden Gitterhälften gestreuten Photonen nicht merklich verschieden. Deckt man also die rechte Hälfte des Gitters ab, dann sollte nur die Lichtintensität in jedem Punkt der Platte geringer werden, ohne daß sich sonst das Interferenzbild ändert. Die Erfahrung widerspricht diesen Vorhersagen. Wir müssen also davon ausgehen, daß das gesamte Gitter bei der Streuung eines Photons beteiligt ist.

Auf Schwierigkeiten derselben Art stößt die Hypothese der Lichtkorpuskeln auch bei allen anderen Interferenz- und Beugungsproblemen (s. Aufgabe 2). Man kann das Auftreffen der einzelnen Photonen auf den Detektor (Schirm oder Photoplatte oder jede andere geeignete Vorrichtung) nachweisen; man kann aber nicht widerspruchsfrei jedem Photon eine bestimmte Bahn zuordnen. Die klassische Lehre, nach der sich ein Teilchen in Raum und Zeit stetig bewegt, versagt in diesem Punkt. Auf seinem Weg bis zum Detektor bewegt sich das Licht wie eine Welle, der Teilchenaspekt kommt erst im Augenblick seines Nachweises zur Geltung.

1.2.4 Schlußfolgerungen

Aus den experimentell gewonnenen Ergebnissen hinsichtlich der Wechselwirkung von Materie und Licht im mikroskopischen Bereich können wir nun eine Reihe von vorläufigen Schlußfolgerungen ziehen.

Obwohl man die beobachteten Unstetigkeiten nur mit dem Bild der Lichtkorpuskeln erklären kann, läßt sich der Wellenbegriff nicht verwerfen. Das Licht zeigt sich sowohl unter Wellen- als auch unter Teilchenaspekt. Es hängt vom jeweils beobachteten Vorgang ab, welcher Aspekt mehr oder weniger deutlich auftritt.

Die Beziehungen (1.4) ermöglichen es, von der einen Beschreibungsart zur anderen überzugehen. Das enge Band zwischen den beiden Bildern ist *statistischer Natur*, wie die Diskussion der Beugung am Gitter zeigt: Die Wahrscheinlichkeit, das Photon in einem Punkt zu lokalisieren, ist gleich der Intensität der Lichtwelle in diesem Punkt, so wie sie mit den Methoden der Wellenoptik berechnet wird. *Die Existenz dieser Welle-Teilchen-Dualität ist mit der klassischen Theorie unvereinbar.* Es ist unmöglich, das Licht nur als einen Strahl klassischer Teilchen oder nur als eine Überlagerung klassischer Wellen anzusehen, ohne mit den experimentell festgestellten Tatsachen in Widerspruch zu geraten.

Bei einer Revision der klassischen Physik muß man nun aber unbedingt im Auge behalten, daß bestimmte Ergebnisse der klassischen Wellentheorie gültig bleiben. An erster Stelle *gelten* weiterhin *in Strenge die Erhaltungssätze für Energie und Impuls*. Außerdem haben wir im Zusammenhang mit dem Compton-Effekt gesehen, daß die *klassische Theorie die zeitliche Entwicklung eines Systems im Mittel für den Fall richtig vorhersagt, daß die quantenhaften Unstetigkeiten als unendlich klein angesehen werden können („makroskopischer Grenzfall“)*.

1.3 Die Quantisierung bei materiellen Systemen

1.3.1 Atomspektroskopie und Schwierigkeiten des klassischen Rutherford-Modells

Wir haben im Abschnitt 1.2.4 gesehen, auf welche Weise die klassische Theorie des Lichts durch die Existenz von Unstetigkeiten beim Mechanismus der Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlung erschüttert wurde. Doch beschränkt sich diese Schwierigkeit nicht auf das Licht, vielmehr wird die klassische Korpuskulartheorie der Materie in gleicher Weise erschüttert. Das wird offensichtlich, wenn man die atomspektroskopischen Daten mit den Ergebnissen der Rutherfordschen Versuche zur Erforschung der Struktur des Atoms in Übereinstimmung zu bringen sucht ¹⁰⁾.

Eine der herausragenden Tatsachen, die durch die Vervollkommnung der spektroskopischen Untersuchungsmethoden erkennbar wurde, ist die Existenz scharfer Spektrallinien. Die Frequenzen der emittierten oder absorbierten Strahlung variieren von Atom zu Atom; das Absorptions- und das Emissionsspektrum eines bestimmten Atoms sind dagegen nicht voneinander verschieden: Bei geeigneten Versuchsbedingungen kann jede Linie des einen Spektrums im anderen beobachtet werden. Jedes Atom kann durch dieses Spektrum identifiziert werden, das somit ein wesentliches Mittel der Information über die Struktur des Atoms und seine Wechselwirkung mit der Strahlung darstellt.

Das Wasserstoffatom verdient hier als das einfachste (ein Proton + ein Elektron) besondere Erwähnung. Alle beobachteten Frequenzen erfüllen die empirische Balmer-Formel:

¹⁰⁾ Historisch gesehen gab Einstein in seiner Theorie der spezifischen Wärme fester Körper (1907) den ersten Hinweis auf die Notwendigkeit der „Quantelung“ bei materiellen Systemen. Diese Theorie enthält grobe Näherungen, wie sie bei der Behandlung eines so komplexen Systems wie dem eines Festkörpers unvermeidlich sind. Außerdem macht sie genau wie die Theorie des schwarzen Körpers, mit der sie eng verwandt ist, Gebrauch von den Ergebnissen der statistischen Thermodynamik. Aus diesen Gründen werden wir uns damit hier nicht im einzelnen beschäftigen, sondern verweisen den Leser auf Werke wie das Buch von M. Born a.a.O. (s. Anm. 2).

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

wobei n und m ganze positive Zahlen ($m > n$) sind und R eine für Wasserstoff charakteristische Konstante (Rydberg-Konstante) darstellt.

Für die anderen Atome existiert keine so einfache Formel, aber man stellt stets einen bestimmten Zusammenhang zwischen den verschiedenen beobachteten Frequenzen fest: Gehören zwei Frequenzen zu einem Spektrum, so gehört oft ihre Summe oder ihre Differenz zum selben Spektrum. Genauer, jedem Atom kann man eine Zahlentafel oder ein Termspektrum derart zuordnen, daß jede Frequenz des Spektrums gleich der Differenz zweier anderer Frequenzen ist. Diese Regel, für die die Balmer-Formel einen Spezialfall darstellt, trägt den Namen *Rydberg-Ritzsches-Kombinationsprinzip* (1905). Umgekehrt sind nicht alle so gebildeten Differenzen notwendig Frequenzen des Spektrums, doch kann man relativ einfache *Auswahlregeln* formulieren, die die Unterscheidung zwischen Frequenzen des Spektrums und Frequenzen gestatten, die nicht zum Spektrum gehören.

Diese experimentell ermittelten Tatsachen stehen in klarem Widerspruch zur klassischen Theorie der Strahlung des Rutherford-Atoms. Tatsächlich sieht sich das Modell von Rutherford selbst mit ernsthaften Widersprüchen konfrontiert, wenn man nämlich, statt sich auf die Coulombsche Wechselwirkung zu beschränken, die Wechselwirkung der Atomelektronen mit dem elektromagnetischen Feld gemäß der Lorentzschen Elektronentheorie streng berücksichtigt. Danach strahlen die Elektronen beim Umlauf auf ihren Bahnen, verlieren ständig an Energie und stürzen schließlich in den Kern. In jedem Zeitpunkt sind die in der emittierten Strahlung beobachteten Frequenzen gleich der Frequenz der Bewegung auf der Bahn oder einer ihrer höheren Harmonischen. Diese Frequenz ändert sich beim Langsamerwerden fortwährend, so daß vom Elektron ein *kontinuierliches* Spektrum emittiert wird. Die klassische Theorie des Rutherford-Atoms erklärt folglich weder die Stabilität der Atome noch die Existenz von Linienspektren. Wir stehen vor einem neuen Beispiel für die Unstetigkeiten bei der Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlung, bei dem die klassische Theorie eine stetige Änderung vorhersagt.

1.3.2 Quantisierung der Energieniveaus der Atome

Im Jahre 1913 erhält Bohr ein allgemeines Schema zur Erklärung der Spektren, indem er zur Quantenhypothese des Lichts ein neues Postulat hinzufügt, das mit den klassischen Begriffen unvereinbar ist: die Quantisierung der Energieniveaus der Atome.

Nach Bohr verhält sich das Atom nicht wie ein klassisches System, das kontinuierlich Energie austauschen kann. Es kann nur in einer bestimmten Zahl von *stationären Zuständen* oder Quantenzuständen existieren, die jeder eine wohldefinierte Energie besitzen. Man sagt, die Energie des Atoms sei gequantelt. Sie kann sich

nur in aufeinanderfolgenden Sprüngen ändern; jeder Sprung bedeutet den Übergang von einem Zustand zu einem anderen.

Dieses Postulat erlaubt die genaue Bestimmung des quantenhaften Absorptions- oder Emissionsmechanismus. Bei der Bestrahlung mit Licht kann ein Atom der Energie E_i in einen Zustand höherer Energie E_j ($> E_i$) übergehen, indem es ein Photon $h\nu$ absorbiert, wenn dabei nur die Gesamtenergie erhalten bleibt:

$$h\nu = E_j - E_i.$$

Entsprechend kann es in einen Zustand niedrigerer Energie E_k ($< E_i$) übergehen, indem es ein Photon $h\nu$ emittiert, dessen Frequenz die Beziehung

$$h\nu = E_i - E_k.$$

erfüllt. Wenn das Atom sich in seinem Zustand niedrigster Energie befindet (Grundzustand), kann es nicht strahlen und bleibt stabil.

So findet nun die Existenz der Spektrallinien, die für jedes Atom charakteristisch sind und die dem Rydberg-Ritzschen Kombinationsprinzip genügen, ihre Erklärung: Die Spektraltermine sind bis auf den Faktor h gleich den Energien der Quantenzustände des Atoms. Speziell für das Wasserstoffatom ergibt sich die Balmer-Formel, wenn man annimmt, daß die Energieniveaus durch

$$E_n = -h \frac{R}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, \infty) \quad (1.7)$$

gegeben sind.

Eine weitere Bestätigung für die Quantelung der Energieniveaus von Atomen liefert das Experiment von Franck und Hertz zur Erforschung des inelastischen Stoßes zwischen Elektronen und Atomen (1914). Dieses Experiment besteht im Beschuß von Atomen durch monoenergetische Elektronen und in der Messung der kinetischen Energie der gestreuten Elektronen. Aus der Differenz ergibt sich die von den Atomen beim Stoß absorbierte Energie. E_0, E_1, E_2, \dots sei die Folge der quantelten Energieniveaus des Atoms, T die kinetische Energie der auftreffenden Elektronen. Unter den gegebenen Versuchsbedingungen sind die Atome des Targets praktisch alle in ihrem Grundzustand. Solange T geringer ist als die Differenz $E_1 - E_0$ zwischen der Grundzustandsenergie und der des ersten angeregten Zustands, kann das Atom keine Energie absorbieren und die Stöße sind vollkommen elastisch. Sobald $T > E_1 - E_0$ ist, können inelastische Stöße auftreten, bei denen das Elektron Energie von der Größe $E_1 - E_0$ verliert und das Atom in seinen ersten angeregten Zustand übergeht. Genau das läßt sich experimentell feststellen. Man beobachtet ebenso, daß Stöße den zweiten angeregten Zustand anregen, sobald $T > E_2 - E_0$ und so fort.

Also muß die Quantelung der Energieniveaus der Atome als eine experimentell gesicherte Tatsache angesehen werden. Diese Eigenschaft ist nicht auf Atome beschränkt. Der Fortschritt der Experimentiertechnik, besonders auf dem Gebiet der Spektroskopie, hat gezeigt, daß sie sich auch bei Molekülen oder noch komplexe-

ren Teilchensystemen findet. Wir stehen also vor einer sehr allgemeinen Eigenschaft der Materie, der die klassische Korpuskulartheorie nicht gerecht werden kann.

1.3.3 Andere Quantisierungsbeispiele: Richtungsquantelung

Ein anderer Fall experimentell beobachteter Quantelung ist die Richtungsquantelung atomarer Systeme. Man stellt sie fest, wenn das Atom ein äußeres Feld durchläuft, bei dem eine Richtung ausgezeichnet ist; die Orientierung des atomaren Systems ist dann nicht beliebig, sondern auf bestimmte diskrete Stellungen beschränkt.

Die direkte Bestätigung dieser Quantisierung wird durch den *Stern-Gerlach-Versuch* (1922) zur Ablenkung von Strahlen paramagnetischer Atome (oder Moleküle) in einem inhomogenen Magnetfeld geliefert. Die paramagnetischen Atome besitzen *per definitionem* ein permanentes magnetisches Moment μ und können darum als kleine Elementarkreisel mit dem Bahndrehimpuls l proportional zu μ angesehen werden:

$$\mu = Ml.$$

Die Richtung von μ und l bestimmt die Orientierung des Atoms. In einem Magnetfeld H vollführt der Bahndrehimpuls eine Präzessionsbewegung um H (Larmor-Präzession, s. Aufgabe 3). Wenn H konstant ist, bleibt auch die magnetische Energie $-\mu \cdot H$ konstant und unabhängig von der Lage des Atomschwerpunkts, der sich deshalb gleichförmig bewegt. Ist dagegen H nicht konstant, erfährt der Atomschwerpunkt die Kraft $F = \text{grad}(\mu \cdot H)$ und damit eine bestimmte Ablenkung. Das beobachtet man beim Stern-Gerlach-Versuch, dessen Anordnung in Abb. 1.5 skizziert ist. Wegen der Präzessionsbewegung um das Feld H bleibt die z -Komponente von μ in Richtung des Feldes konstant, während die beiden anderen Komponenten um Null oszillieren. Das geschieht so, als ob das Atom der über mehrere Oszillationen gemittelten Kraft $\mu_z \text{ grad } H_z$ unterworfen wäre. Unter normalen Versuchsbedingungen hat diese mittlere Kraft die Richtung der z -Achse und ist gleich $\mu_z (\partial H_z / \partial z)$.

Ist $2l$ die Länge des vom Atom im Magnetfeld zurückgelegten Weges und T die kinetische Energie der Atome des einfallenden Strahls, so zeigt eine einfache Rechnung, daß die Geschwindigkeit jedes Atoms von der ursprünglichen Richtung Ox um den Winkel $\cong \mu_z (\partial H_z / \partial z) (l/T)$ abgelenkt wird. Diese Ablenkung ist also proportional zur Komponente von μ in Richtung des Feldes. Wenn die Atome beliebig orientiert sind, kann μ_z alle Werte zwischen $-\mu$ und $+\mu$ annehmen und damit der Ablenkwinkel alle Werte zwischen den entsprechenden beiden Extremwerten. Die auf dem Schirm auftreffenden Atome führen zu einem in der z -Richtung ausgedehnten Fleck. Tatsächlich beobachtet man aber eine Folge von äquidistanten, parallel zur z -Richtung angeordneten kleinen Flecken. Verändert man die Feldstärke (und damit $(\partial H_z / \partial z)$), so ändert sich nur der Abstand der Flecken; insbe-

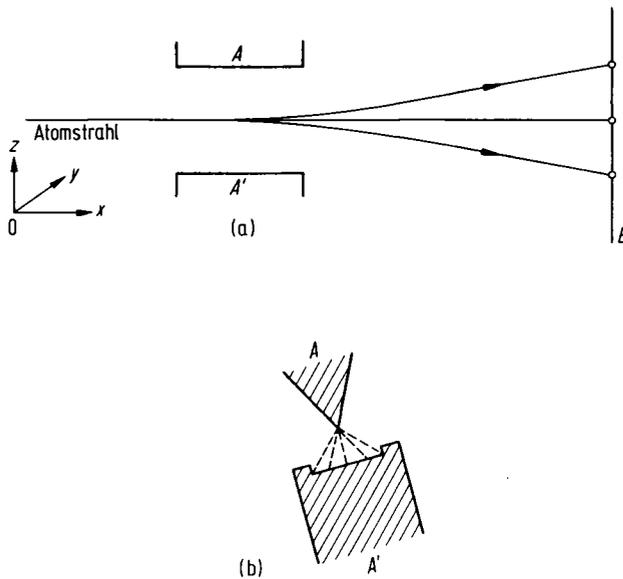


Abb. 1.5 Stern-Gerlach-Versuch

1.5 a) Allgemeines Schema des Versuchs:

Der Atomstrahl durchläuft das zwischen den Polschuhen AA' herrschende inhomogene (im Bild senkrecht gerichtete) Magnetfeld. Die Stöße der Atome werden auf dem Schirm E beobachtet.

1.5 b) Schnitt durch die Polschuhe des Magneten; punktiert die magnetischen Feldlinien

sondere bleibt die Zahl λ der Flecken konstant. Jeder der Flecken gehört zu einem bestimmten Wert von μ_z . Man sieht also, daß μ_z eine gequantelte Größe ist, die λ verschiedene Werte annehmen kann. Offensichtlich hat die z -Komponente des Drehimpulses dieselbe Eigenschaft.

Man kann gegen diese Deutung des Stern-Gerlach-Versuchs einwenden, daß sie auf einer sehr speziellen Hypothese über den Ursprung des atomaren Paramagnetismus beruht, nämlich der Existenz eines permanenten magnetischen Moments, das proportional zum Drehimpuls ist. Wir werden uns hier nicht mit den Tatsachen und Begründungen befassen, die eine solche Hypothese rechtfertigen (gyromagnetischer Effekt, die Theorie von Langevin über die paramagnetische Suszeptibilität usw.); sie wurde durch die spätere Entwicklung der Quantenmechanik eingehend bestätigt. Aber selbst wenn man diesen Punkt in der Erklärung anzweifelt, kann man kaum der Existenz von λ verschiedenen Flecken auf dem Schirm Rechnung tragen, ohne zuzulassen, daß bestimmte, für die innere Bewegung charakteristische Größen gequantelt sind. Genügt nämlich die Bewegung des Schwerpunkts den Gesetzen der klassischen Mechanik, so ist seine Bahn vollständig durch den dynamischen Zustand des Atoms am Eingang des Magneten bestimmt. Das Auftreten einer mehr oder weniger ausgedehnten Verteilung von Stößen auf dem Schirm zeigt, daß die Atome nicht alle denselben Anfangsbedingungen unterliegen und daß die den Anfangszustand bestimmenden dynamischen Variablen über einen mehr oder weniger

ausgedehnten Bereich statistisch verteilt sind. Die Existenz von λ verschiedenen Flecken zeugt davon, daß diese statistische Verteilung mindestens λ Unstetigkeiten aufweist. Weil nun die Atome praktisch alle in ihrem Grundzustand sind (sonst würden sie strahlen), kann es sich hier nicht um die Quantisierung der Energie handeln, und weil der auf dem Schirm beobachtete Effekt gerichtet ist, muß die dynamische Variable des Atoms, deren Quantelung hiermit gezeigt wird, von der Orientierung des Atoms abhängen.

Außer dem Stern-Gerlach-Versuch gibt es noch andere, weniger direkte Nachweise der Richtungsquantelung. Wir nennen hier vor allem die Wirkung eines konstanten Magnetfeldes auf die Struktur der Spektren, den Zeeman-Effekt (1896), auf den wir später zurückkommen werden. Alle diese Phänomene haben einen gemeinsamen Ursprung, die Quantisierung des Bahndrehimpulses. Die weitere Behandlung der Quantenmechanik wird das klar zeigen.

1.4 Korrespondenzprinzip und ältere Quantentheorie

1.4.1 Mängel der klassischen Korpuskulartheorie

Die Quantisierung bestimmter physikalischer Größen – auf diesen Punkt sei besonders hingewiesen – ist eine Erfahrungstatsache, die mit der klassischen Korpuskulartheorie der Materie unvereinbar ist. So ist die Energie eines Systems klassischer Teilchen eine stetige Größe. Ob man nun das Kraftgesetz wie auch immer abändert, ob man sogar zusätzliche dynamische Variablen einführt, man kann nichts daran ändern: Die Tatsache, daß die Energie eines Systems von Teilchen auf eine Folge diskreter Werte beschränkt ist, fällt aus dem Rahmen der klassischen Mechanik. Dasselbe gilt für jede andere gequantelte Größe.

Damit hängt zusammen, daß *die zeitliche Änderung einer gequantelten Größe nicht mit rein klassischen Begriffen beschrieben werden kann*. Nehmen wir das Beispiel eines Atoms, das sich anfänglich in seinem ersten angeregten Zustand E_1 befindet und unter Emission eines Photons in den Grundzustand zurückfällt. Wenn man in der Sprache der klassischen Physik die zeitliche Änderung der Energie des Atoms zu bestimmen versucht, muß man annehmen, daß diese in einem bestimmten Augenblick einen (unstetigen) Sprung von E_1 nach E_0 macht, da jede stetige Änderung der Energie zwischen diesen beiden Werten ausgeschlossen ist. Es ist aber nicht möglich vorherzusagen, zu welchem (genauen) Zeitpunkt der Sprung geschehen wird. Wenn in der Zeit vor dem Sprung der dynamische Zustand des Atoms identisch derselbe bleibt, gibt es keinen Grund, weshalb dieser Sprung zu einem gegebenen Zeitpunkt eher als zu irgendeinem anderen geschehen sollte. Man kann höchstens von der Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit sprechen, daß der Sprung erfolgt. In Wirklichkeit ist die klassische Physik nicht in der Lage, diese Situation zu beschreiben, und selbst das Bild eines Sprungs zu einem bestimmten Zeitpunkt ist ganz und gar falsch. Man darf sich eine präzise als Funktion der Zeit bestimmte

Änderung der Energie nicht vorstellen. Das einzige, was man bestimmen kann, ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich das anfangs in einem angeregten Zustand befindliche Atom zu einem gegebenen späteren Zeitpunkt im Grundzustand befindet.

Wie wir später sehen werden, gehorcht die Wahrscheinlichkeit für die Rückkehr des Atoms in den Grundzustand – genau wie der Zerfall radioaktiver Kerne – einem fallenden Exponentialgesetz, wobei die Konstante gleich der Zerfallswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ist, oder was auf dasselbe hinausläuft, gleich dem Reziproken der mittleren Lebensdauer des angeregten Zustands.

Wir müssen nun – um den Preis der Abkehr von bestimmten klassischen Vorstellungen – dieses Quantelungsphänomen in eine geschlossene Theorie der Materie einordnen, aus der man die genauen numerischen Werte der quantisierten Größen sowie die Größen herleiten kann, die sich auf die verschiedenen möglichen Quantenübergänge wie z.B. die mittlere Lebensdauer angeregter Atome beziehen. Dies wurde erst mit der Begründung der Quantenmechanik in ihrer modernen Form verwirklicht. Vorher hatten Bohr und seine Schule (Kramers, Sommerfeld) einen ersten Entwurf der Quantentheorie formuliert, mit dessen Hilfe man die Spektren wasserstoffartiger Atome richtig deuten konnte. Trotz der prinzipiellen Schwierigkeiten und Grenzen dieser älteren Quantentheorie ist es nützlich, sie in großen Zügen kennenzulernen, um dann die spätere Entwicklung der Theorie besser zu verstehen. Sie stellt außerdem das erste Anwendungsbeispiel eines heuristischen Prinzips dar, das bei der Aufstellung der Quantenmechanik eine wesentliche Rolle spielt: des Korrespondenzprinzips. Vor allem auf diesen Punkt werden wir bei unserer Darlegung der älteren Quantentheorie achten. Sie wurde durch eine halbklassische Theorie der Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlung ergänzt, die ebenfalls auf dem Korrespondenzprinzip beruht; wir werden in diesem Buch nicht darauf eingehen ¹¹⁾.

1.4.2 Das Korrespondenzprinzip

Das Korrespondenzprinzip ist von Bohr erst 1923 ¹²⁾ klar formuliert worden, inspirierte aber bereits seine früheren Arbeiten. Es macht eine Aussage darüber, in welchem Maß die Begriffe und Ergebnisse der klassischen Mechanik als Führer bei der Aufstellung und Deutung der richtigen Theorie dienen können.

Wir haben bereits im Zusammenhang mit den Lichtquanten den Gültigkeitsbereich der klassischen Strahlungstheorie diskutiert. Was dort gesagt wurde, gilt nun für die klassische Theorie ganz allgemein. Diese beschreibt eine ausgedehnte Skala von Erscheinungen richtig, vom makroskopischen Bereich bis hin zu gewissen mikroskopischen Vorgängen. Von diesen seien die Bewegung von Elektronen im elektroma-

¹¹⁾ Siehe L. de BROGLIE, *Le principe de correspondance et les interactions entre matière et la rayonnement*, Paris: Hermann 1938.

¹²⁾ N. BOHR, *Zeitsch. f. Phys.* 13 (1923), 117.

netischen Feld und die thermische Bewegung der Atome oder Moleküle eines Gases erwähnt. Die eigentliche Schwierigkeit bei der Erklärung von Vorgängen im mikroskopischen Bereich entsteht für die klassische Theorie beim Auftreten der Unstetigkeiten.

Man kann es also als gesicherte Tatsache ansehen, daß die *klassische Theorie* „*makroskopisch richtig*“ ist, d.h. sie trägt den Erscheinungen bis zu der Grenze Rechnung, wo die quantenhaften Unstetigkeiten noch als unendlich klein angesehen werden können. In all diesen Grenzfällen müssen die Vorhersagen der exakten Theorie mit denen der klassischen Theorie übereinstimmen. Das ist für die Quantentheorie eine sehr einschränkende Bedingung. Man drückt das kurz so aus: *Die Quantentheorie muß für den Grenzfall großer Quantenzahlen asymptotisch in die klassische Theorie übergehen*. Um diese Bedingung erfüllen zu können, fordert man prinzipiell, daß *zwischen der Quantentheorie und der klassischen Theorie eine formale Analogie besteht*. Diese „Korrespondenz“ zwischen den beiden Theorien besteht bis hin zu den kleinsten Einzelheiten und muß als Führer bei der Deutung der Ergebnisse der neuen Theorie dienen.

1.4.3 Anwendung des Korrespondenzprinzips auf die Berechnung der Rydberg-Konstante

Wir zeigen jetzt, daß der Ausdruck (1.7), der die Energieniveaus des Wasserstoffatoms in Abhängigkeit von der Quantenzahl n angibt, mit dem Korrespondenzprinzip verträglich ist und daß die Anwendung dieses Prinzips den numerischen Wert für die in diesem Ausdruck auftretende Konstante R eindeutig festlegt.

Nach der klassischen Theorie von Rutherford besteht das Wasserstoffatom aus einem Elektron und einem Proton in Coulomb-Wechselwirkung (Potential $- (e^2/r)$). Gemäß den Keplerschen Gesetzen, die wir hier als bekannt voraussetzen, beschreibt das Elektron eine elliptische Bahn, in deren einem Brennpunkt das (als unendlich schwer angesehene) Proton ruht. Zu jeder Bahn gehört ein bestimmter Energiewert $E (< 0)$ und eine Frequenz $\nu_{cl.}$ der Elektronenbewegung. Diese Größen hängen nur von der Länge der großen Halbachse der Ellipse ab; sie sind untereinander durch die Beziehung

$$\nu_{cl.}(E) = \frac{1}{\pi e^2} \left(\frac{2 |E|}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.8)$$

(m Masse des Elektrons) verknüpft. Während der Bewegung emittiert das Elektron eine bestimmte Strahlung, die aus einer Überlagerung monochromatischer Wellen der Frequenz $\nu_{cl.}$, oder einer ihrer Harmonischen besteht. Die Strahlung ist um so reicher an höheren Harmonischen, je größer die Exzentrizität der elliptischen Bahn ist. Diese Strahlung wird kontinuierlich ausgesandt und ist mit einer kontinuierlichen Abnahme der Energie E verbunden.

Diese Darstellung muß dem Abbau der Energie durch diskrete Sprünge gegenübergestellt werden, wie sie die Theorie von Bohr vorhersagt. Ist n sehr groß, so ist

der Abstand des Niveaus E_n von jedem seiner nächsten Nachbarn ein bestimmtes ganzzahliges Vielfaches von $dE/dn = 2Rh/n^3$. Für die optischen Übergänge, für die die relative Änderung $\Delta n/n$ der Quantenzahl sehr klein wird, ist, wie in der klassischen Theorie, die emittierte Frequenz die Harmonische (von der Ordnung $\Delta n-1$) einer bestimmten Grundfrequenz

$$\nu_{\text{qu.}} \simeq 2 \frac{R}{n^3} = 2 \left(\frac{|E_n|}{Rh^3} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.9)$$

Für den Grenzfall, daß n sehr groß ist, nimmt die Energie E_n im Mittel durch eine Folge von kleinen und zahlreichen Quantensprüngen ab, und das Spektrum der emittierten Frequenzen (genauer der untere Frequenzbereich des Spektrums, der zu den kleinsten Energiequanten gehört) muß, gemäß dem Korrespondenzprinzip, identisch mit dem klassischen Spektrum sein:

$$\nu_{\text{qu.}} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \nu_{\text{cl.}}(E). \quad (1.10)$$

Wie man an den Ausdrücken (1.8) und (1.9) sieht, kann diese Bedingung tatsächlich erfüllt werden, wenn man

$$R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3} \quad (1.11)$$

wählt. Der Wert von R ist mit sehr großer Genauigkeit ($\cong 10^{-6}$) experimentell bestimmt worden. Der theoretische Wert (1.11) stimmt mit ihm bis auf weniger als $\approx 10^{-4}$ überein¹³⁾. Das ist einer der auffälligsten Erfolge der Bohrschen Theorie.

Diese kann ohne Schwierigkeit auf wasserstoffartige Atome, die aus einem Elektron und einem Kern mit der Ladung Ze bestehen, übertragen werden, besonders auf das einfach ionisierte Heliumatom ($Z = 2$). Es genügt, in allen Formeln e^2 durch Ze^2 zu ersetzen. Das so für He^+ gewonnene Termspektrum stimmt mit derselben Genauigkeit von 10^{-4} mit dem experimentell beobachteten überein.

1.4.4 Lagrange- und Hamiltonform der Gleichungen der klassischen Mechanik

Im Hinblick auf die spätere Diskussion der formalen Korrespondenz von Quantentheorie und klassischer Theorie ist es zweckmäßig, sich einige Beziehungen aus der klassischen Mechanik in Erinnerung zu rufen.

Allgemein betrachtet, ist der dynamische Zustand eines klassischen Systems durch seine Lage – gegeben durch die Koordinaten q_1, q_2, \dots, q_R – und seine Ge-

¹³⁾ Um eine solche Genauigkeit bei der Bestimmung von R zu erreichen, muß man berücksichtigen, daß die Masse M des Protons endlich ist. Dazu genügt es, in Gleichung (1.11) m durch die reduzierte Masse $m' = mM/(m+M)$ zu ersetzen. Mit dieser Korrektur ($\approx 5 \cdot 10^{-4}$) liegt der theoretische Werte von R etwas unter dem experimentell ermittelten. Die Differenz muß im wesentlichen einem relativistischen Effekt zugeschrieben werden, der praktisch zu einer geringen Vergrößerung der Masse m' führt.

schwindigkeit – gegeben durch die zeitlichen Ableitungen $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_R$ dieser Koordinaten – definiert. R ist die Zahl der Freiheitsgrade des Systems¹⁴⁾. Wenn es sich um ein System von n Teilchen handelt, kann man als Lagekoordinaten die $3n$ kartesischen Koordinaten dieser Teilchen wählen, doch gelten die folgenden Überlegungen genauso bei der Wahl anderer Koordinaten. Die Lage des Systems kann zu jedem Zeitpunkt durch einen Punkt M im R -dimensionalen *Konfigurationsraum* mit den Koordinaten q_1, q_2, \dots, q_R repräsentiert werden. Aufgabe der klassischen Mechanik ist es, die Bewegungsgleichungen für das System bzw. für den repräsentativen Punkt M im Konfigurationsraum zu formulieren.

Für sehr viele dynamische Systeme – wir werden uns ausschließlich mit solchen befassen – kann man die Bewegungsgleichungen formulieren, indem man eine bestimmte, für das System charakteristische Funktion, die Lagrange-Funktion, einführt:

$$L = L(q_1, q_2, \dots, q_R; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_R; t).$$

Die Koordinaten genügen R Differentialgleichungen 2. Ordnung (Lagrangesche Gleichungen II. Art):

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \quad (r = 1, 2, \dots, R).$$

Die in diesen Gleichungen auftretenden Größen

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \quad (r = 1, 2, \dots, R)$$

heißen *generalisierte Impulse*. Ist q_r eine kartesische Koordinate eines Teilchens und leiten sich die Kräfte aus einem statischen Potential her, dann ist p_r die zugehörige Komponente der Bewegungsgröße dieses Teilchens: $p_r = m \dot{q}_r$.

Man kann das Bewegungsproblem auch als Variationsprinzip formulieren. Das System der Lagrangeschen Gleichungen ist nämlich dem *Prinzip der kleinsten Wirkung* (Mauvertuis-Hamilton) äquivalent:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0, \quad \delta M(t_1) = \delta M(t_2) = 0, \quad (1.12)$$

das folgendes aussagt: Von allen zwischen zwei festen Punkten $M_1 = M(t_1)$ und $M_2 = M(t_2)$ erlaubten Bahnen $M(t)$ des Systems wird genau die durchlaufen, für die das Integral $\int_{t_1}^{t_2} L dt$ stationär wird.

Eine andere, besonders zweckmäßige Form der Gesetze der klassischen Mechanik ist die *kanonische Formulierung von Hamilton*. Wir bemerken, daß der dynamische Zustand eines klassischen Systems in jedem gegebenen Zeitpunkt auch durch die Angabe der R Lagekoordinaten q_1, q_2, \dots, q_R und der R zu ihnen konjugierten generalisierten Impulse p_1, p_2, \dots, p_R vollständig definiert ist. Es ist bequem, einen $2R$ -dimensionalen Raum, den *Phasenraum*, einzuführen, in dem ein solcher dy-

¹⁴⁾ Wir betrachten hier nur Systeme ohne Nebenbedingungen; anders ausgedrückt, die q variieren ohne jede Einschränkung unabhängig voneinander.

namischer Zustand durch einen Punkt P mit den Koordinaten $q_1, q_2, \dots, q_R, p_1, p_2, \dots, p_R$ repräsentiert wird. Wir definieren nun die Hamilton-Funktion:

$$H \equiv H(q_1, \dots, q_R; p_1, \dots, p_R; t) = \sum_{r=1}^R \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - L. \quad (1.13)$$

Die Bewegungsgleichungen lauten dann in der kanonischen Form

$$\dot{q}_r = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial q_r} \quad (r = 1, 2, \dots, R) \quad (1.14)$$

Das sind $2R$ Differentialgleichungen erster Ordnung. Die Angabe der Koordinaten und Impulse für einen Anfangszeitpunkt reicht aus, um ihre Werte für jeden späteren Zeitpunkt zu bestimmen. Wenn H nicht von der Zeit abhängt, geht durch jeden Punkt P des Phasenraums genau eine Bahn (Trajektorie), die die mögliche Bewegung des Systems repräsentiert.

In den meisten Fällen ist L die Differenz zwischen der kinetischen Energie T , einer homogen-quadratischen Funktion der \dot{q} , und der potentiellen Energie V . $H = T + V$ ist die Gesamtenergie des Systems, ausgedrückt als Funktion der q und p . Doch sind Lagrange- und Hamilton-Formalismus auch auf viel allgemeinere dynamische Systeme anwendbar (s. Aufgabe 4). Man kommt in Erweiterung für alle diese Fälle überein, H als die Gesamtenergie des Systems anzusehen. Aus den Hamiltonschen Gleichungen leitet man her, daß $\dot{H} \equiv (dH/dt) = (\partial H/\partial t)$; mit anderen Worten, ist die Hamilton-Funktion nicht explizit zeitabhängig, so ist die Gesamtenergie des Systems eine Konstante der Bewegung. Man sagt, das System sei konservativ.

Als Beispiel betrachten wir ein Elektron im Coulomb-Feld eines Protons (das als unendlich schwer angenommen wird). $r(x, y, z)$ sei seine Lage in einem kartesischen Koordinatensystem mit dem Ursprung im Proton, $v = dr/dt$ seine Geschwindigkeit, $p(p_x, p_y, p_z)$ sein Impuls. Die Lagrange-Funktion ist

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{e^2}{r}.$$

Die zu den Koordinaten kanonisch konjugierten Impulse sind die entsprechenden Komponenten des Impulses ($p_x = \partial L/\partial v_x, p_y = \partial L/\partial v_y, p_z = \partial L/\partial v_z$). Aus der expliziten Form der Hamilton-Funktion,

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r},$$

ergeben sich die Hamiltonschen Gleichungen

$$\frac{dr}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = \text{grad} \frac{e^2}{r} = -e^2 \frac{r}{r^3}.$$

Mit diesen Gleichungen verifiziert man direkt, daß der Drehimpuls $l = r \times p$ eine Konstante der Bewegung ist: $dl/dt = 0$ (eine Folge der Zentralsymmetrie des Po-

tentials $-e^2/r$) und daß die Bahn des Elektrons in einer Ebene durch den Ursprung und senkrecht zum konstanten Vektor l liegt.

Auf die gleiche Weise erhält man die Bewegungsgleichungen, wenn man andere Koordinaten einführt. Für Bahnen in der x,y -Ebene ($z = \dot{z} = 0$) erhält man in Polarkoordinaten (r, φ) :

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi, & y &= r \sin \varphi, \\ L &= \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2) + \frac{e^2}{r}, & p_r &= m\dot{r}, & p_\varphi &= mr^2\dot{\varphi}, \\ H &= \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r}, \end{aligned}$$

woraus sich die Hamiltonschen Gleichungen ergeben:

$$\begin{aligned} \dot{p}_\varphi &= 0, & \dot{\varphi} &= \frac{p_\varphi}{mr^2} \\ \dot{p}_r &= \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2}, & \dot{r} &= \frac{p_r}{m} \end{aligned} \tag{1.15}$$

p_φ ist der Betrag des Drehimpulses: Er ist eine Konstante der Bewegung.

1.4.5 Die Quantisierungsregeln von Bohr-Sommerfeld

Die ältere Quantentheorie ist im wesentlichen eine auf den Hypothesen von Bohr und dem Korrespondenzprinzip beruhende allgemeine Methode zur Berechnung der quantisierten Größen. Das Verfahren war folgendes: Man nahm an, daß Systeme materieller Teilchen den Gesetzen der klassischen Mechanik folgten. Man postulierte aber darüber hinaus, daß von allen Lösungen der Bewegungsgleichungen nur die übrig bleiben sollten, die bestimmten, *ad hoc* eingeführten Quantisierungsregeln genügten. Man sonderte so eine unstetige Klasse von Bewegungen aus, die auf Grund der Hypothese als allein realisierbar vorausgesetzt wurden. Zu jeder dieser Bewegungen gehört ein bestimmter Wert der Energie. Die so ermittelte unstetige Folge von Energiewerten ist das Spektrum der quantisierten Energieniveaus. In derselben Weise erhielt man ein diskretes Spektrum von erlaubten Werten für jede andere Konstante der Bewegung.

Die Aufstellung der „Quantisierungsregeln“ erwies sich als das zentrale Problem der älteren Quantentheorie. Sie war vor allem eine Sache der Intuition: Man postulierte gewisse Regeln und verglich die sich dabei ergebenden Spektren quantisierter Größen mit den experimentell festgestellten Ergebnissen. Bei dieser Suche spielte das Korrespondenzprinzip eine wertvolle Rolle.

In einem sehr einfachen Fall führte dieses Prinzip auf ganz natürliche Weise zum Ergebnis: Hier verlaufen die klassischen Bewegungen periodisch mit einer nur von der Energie abhängigen Frequenz

$$v_{\text{cl.}} = v_{\text{cl.}}(E).$$

Ein Beispiel hierfür ist das Wasserstoffatom (s. Gleichung (1.8)).

$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ sei die Folge der quantisierten Energien. Man kann immer annehmen, daß die Energie des Systems eine stetige Funktion $E(n)$ der Quantenzahl n ist. Die Energiequantelung ergibt sich dann daraus, daß n nur ganzzahlige Werte annehmen kann. Indem man die in Abschnitt 1.4.3 bei der Berechnung der Rydberg-Konstante durchgeführten Überlegungen wiederholt, kann man folgende Korrespondenzbeziehung zwischen der klassischen und der Quantenfrequenz (s. Gleichung (1.10)) erhalten:

$$\frac{1}{h} \frac{dE}{dn} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} v_{\text{cl.}}(E),$$

woraus sich die Quantisierungsregel

$$\int^E \frac{dE}{v_{\text{cl.}}(E)} = nh + Cte,$$

ergibt, die für große ganzzahlige n gilt. Es liegt nahe, diese Regel auf alle Werte von n auszudehnen und zu setzen

$$\int_{E_{\text{min}}}^E \frac{dE}{v_{\text{cl.}}(E)} = nh \quad (n = 1, 2, \dots, \infty) \quad (1.16)$$

(E_{min} minimale Energie des klassischen Systems). Für den Fall des Wasserstoffatoms ergibt diese Quantisierungsregel genau die Terme der Balmer-Formel.

Auf periodische Systeme mit nur einem Freiheitsgrad ist diese Regel in gleicher Weise anwendbar. In diesem Fall kann man sie in eine für Verallgemeinerungen geeignetere Form bringen. q sei die Lagekoordinate eines solchen Systems, p der dazu konjugierte Impuls, $H(q, p) = E$ die Gesamtenergie. Der Phasenraum ist zweidimensional, und die periodischen Bewegungen werden in diesem Raum durch geschlossene Kurven $H(q, p) = \text{Konstante}$ dargestellt¹⁵⁾. Man kann mit Hilfe der Hamiltonschen Gleichungen zeigen, daß

$$\int_{E_{\text{min}}}^E \frac{dE}{v(E)} = \oint_{H=E} p \, dq,$$

wobei das Zeichen $\oint_{H=E}$ bedeutet, daß das Integral über eine volle Periode der Bewegung mit der Energie E zu nehmen ist ($\oint p \, dq$ heißt das Wirkungsintegral). Man erhält so die zur Regel (16) äquivalente Quantisierungsregel

$$\oint p \, dq = nh \quad n = 1, 2, \dots, \infty. \quad (1.17)$$

¹⁵⁾ Wenn die um das ganzzahlige Vielfache einer bestimmten Periode Q sich unterscheidenden Werte von q (z.B. eine Winkelvariable) dieselbe Konfiguration des Systems repräsentieren, wird die periodische Bewegung im Phasenraum nicht durch eine geschlossene Kurve, sondern durch eine Kurve mit der Periode Q dargestellt.

Sie bestimmt die erlaubten Bahnen im Phasenraum und die zugehörigen gequantelten Energien und ist unter dem Namen *Bohr-Sommerfeldsche Quantisierungsregel* bekannt.

Wilson und Sommerfeld haben diese Regel für mehrfach periodische Systeme verallgemeinert. Das sind Systeme mit mehreren Freiheitsgraden, deren Bewegung bei passender Wahl der Koordinaten q_1, \dots, q_R und der konjugierten Impulse p_1, \dots, p_R durch eine Funktionenfolge $p_1(q_1), p_2(q_2), \dots, p_R(q_R)$ dargestellt werden kann. Die Phasenbahnen sind so beschaffen, daß jeder Impuls p_r ausschließlich eine Funktion der einen Koordinate q_r ist. Jede Funktion $p_r(q_r)$ repräsentiert eine periodische Bewegung mit der Frequenz ν_r . Die Bewegung des Systems ergibt sich als Kombination der periodischen Bewegungen mit den Frequenzen $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_R$. In diesem Fall sind die Quantisierungsregeln die R Beziehungen

$$\oint p_r dq_r = n_r h \quad (r = 1, 2, \dots, R) \tag{1.18}$$

Die R (ganzen) Quantenzahlen n_1, n_2, \dots, n_R definieren die gequantelten Bahnen des Systems und die gequantelten Werte der verschiedenen Konstanten der Bewegung, wie z.B. der Energie und des Drehimpulses. Die Energie $E(n_1, n_2, \dots, n_R)$ als Funktion der Variablen n_1, n_2, \dots, n_R genügt insbesondere den Korrespondenzbedingungen

$$\frac{\partial E}{\partial n_r} \underset{n_r \rightarrow \infty}{\sim} h \nu_r \quad (r = 1, 2, \dots, R).$$

Als Anwendungsbeispiel betrachten wir kurz die Quantisierung des Wasserstoffatoms. Hat man einmal die Ebene der Elektronenbahn gewählt, so handelt es sich um ein zweidimensionales Problem, für das die Gleichungen in Polarkoordinaten bereits angegeben wurden (Gleichungen (1.15)). Der Betrag des Drehimpulses und die Energie sind Konstanten der Bewegung. Wenn man die Werte $L (\geq 0)$ bzw. $E (< 0)$ dieser beiden Größen festlegt, erhält man eine mögliche Bahn der klassischen Bewegung: Es ist eine Ellipse mit der Exzentrizität

$$\sqrt{1 + (2L^2 E / m e^4)}.$$

Die Impulse p_φ und p_r sind Funktionen ihrer jeweiligen konjugierten Koordinaten:

$$p_\varphi = L, \quad \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r} = E.$$

Wir können darum die Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregeln anwenden:

$$\oint p_\varphi d\varphi = l h, \quad \oint p_r dr = k h,$$

wobei l , die azimutale Quantenzahl, und k , die radiale Quantenzahl, positive ganze Zahlen (oder Null) sind. Die erste Regel gibt die quantisierten Werte des Drehimpulses an:

$$L = l \hbar.$$

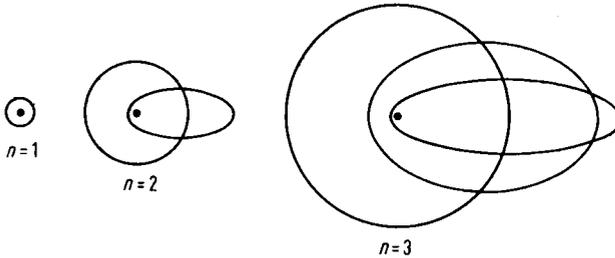


Abb. 1.6 Die Bohrschen Bahnen des Grundzustands ($n = 1$) und der beiden ersten angeregten Niveaus ($n = 2, 3$) des Wasserstoffatoms. Die unterschiedlichen Größenordnungen der Bahnen sind berücksichtigt.

Die zweite liefert nach einer etwas längeren, aber einfachen Rechnung

$$\sqrt{\frac{2\pi^2 me^4}{(-E)}} - 2\pi L = kh,$$

woraus man unter Einführung der „Hauptquantenzahl“ $n = l + k$ die Balmer-Formel erhält:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2},$$

mit demselben Wert für die Rydberg-Konstante wie den früher berechneten [Gleichung (1.11)].

Die gequantelte Energie hängt nur von der Summe der beiden Quantenzahlen l und k ab. Diese für das Coulomb-Potential charakteristische Eigenschaft beruht auf der Tatsache, daß die azimutalen und die radialen Frequenzen gleich sind: $\nu_\varphi = \nu_r$. Zur Energie E_n gehören n Quantenbahnen, die durch die folgenden Werte von l definiert sind: $l = 1, 2, \dots, n$. (Aus Gründen, die wir hier nicht diskutieren wollen, ist der Wert $l = 0$ nicht zugelassen.) Es handelt sich um Ellipsen mit der Exzentrizität $\sqrt{1 - (l^2/n^2)}$. Der Wert $l = n$ gehört zu einer Kreisbahn¹⁶⁾.

Man kann dieselben Quantisierungsregeln auf die relativistischen Bewegungsgleichungen anwenden und so die relativistischen Korrekturen dieser Theorie des Wasserstoffatoms bestimmen. Dabei erhält man einen mit der Erfahrung noch besser übereinstimmenden Wert für die Rydberg-Konstante (s. Anm. 13). Außerdem wird die „Entartung“ der Energie aufgehoben: Zu jedem Wert von n gehören n sehr nahe, aber voneinander verschiedene Werte der gequantelten Energie. Jedem von ihnen ist ein genauer Wert \hbar des Drehimpulses zugeordnet. Experimentell beobachtet

¹⁶⁾ Die Quantisierung der Kreisbahnen ermöglichte es Bohr schon 1913, die Balmer-Formel zu finden. Die Quantisierung der elliptischen Bahnen geht auf Sommerfeld zurück, der die Theorie auf den relativistischen Fall erweiterte (s. später).