

# Das Münchener Unterrichtskonzept zur Quantenmechanik

Rainer Müller und Hartmut Wiesner  
(überarbeitet von Bernadette Schorn)



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Photonen</b>	<b>7</b>
1.1	Der Photoeffekt: Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen . . . . .	7
1.2	Deutung des Photoeffekts mit Photonen . . . . .	8
1.3	Überprüfung der Energiebilanz und Bestimmung des Wirkungsquantums . . .	10
1.4	Impuls von Photonen . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Präparation dynamischer Eigenschaften</b>	<b>15</b>
2.1	Präparation dynamischer Eigenschaften in der klassischen Mechanik . . . . .	15
2.2	Prismenversuch mit Licht . . . . .	16
2.3	Nicht immer wird eine Eigenschaft präpariert . . . . .	18
2.4	Polarisation . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Wellen und Teilchen</b>	<b>23</b>
3.1	Licht im Interferometer . . . . .	23
3.2	Vom Lichtstrahl zu einzelnen Photonen . . . . .	25
3.3	Interferometrie mit einzelnen Photonen . . . . .	26
3.4	Kann man einem Photon einen Weg zuschreiben? . . . . .	28
3.5	Anschauliche Erklärung des Ergebnisses . . . . .	30
3.6	Teilt sich das Photon? . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Die statistischen Aussagen der Quantentheorie</b>	<b>33</b>
4.1	Doppelspaltexperiment mit Licht . . . . .	33
4.2	Das Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen und die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie . . . . .	34
4.3	Präparation und Wahrscheinlichkeitsaussagen . . . . .	36

<b>5</b>	<b>Elektronen als Quantenobjekte</b>	<b>39</b>
5.1	Elektronenbeugung . . . . .	39
5.2	Doppelspaltexperiment mit Elektronen und Atomen . . . . .	40
5.3	Die Wellenlänge von Elektronen . . . . .	43
5.4	Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen und mit Elektronen . . . . .	45
5.5	Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Wellenfunktion . . . . .	48
5.6	Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsverteilung beim Doppelspalt . . . . .	51
<b>6</b>	<b>Eigenschaften von Elektronen und der quantenmechanische Messprozess</b>	<b>55</b>
6.1	Die Eigenschaft „Ort“ im Doppelspaltexperiment . . . . .	55
6.2	Messprozess und Komplementarität . . . . .	57
6.3	Messungen und Eigenschaften . . . . .	59
6.4	Zustandsreduktion . . . . .	61
6.5	Schrödingers Katze, Messprozess und Dekohärenz . . . . .	63
<b>7</b>	<b>Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation</b>	<b>67</b>
7.1	Gleichzeitige Präparation verschiedener Eigenschaften . . . . .	67
7.2	Präparation von Ort und Impuls bei Photonen . . . . .	68
7.3	Ein Maß für die „Güte“ einer Präparation . . . . .	69
7.4	Messverfahren und Eigenschaften . . . . .	71
7.5	Elektronen am Einzelspalt und die quantitative Formulierung der Unbestimmtheitsrelation . . . . .	74
7.6	Unbestimmtheitsrelation und Bahnbegriff . . . . .	78
<b>8</b>	<b>Der Weg zur Schrödinger-Gleichung</b>	<b>81</b>
8.1	Mathematische Beschreibung von Quantenobjekten . . . . .	81
8.2	Präparation von Elektronen auf bestimmten Impuls und kinetische Energie . . . . .	83
8.3	Wellenfunktion eines freien Elektrons . . . . .	83
8.4	Operatoren für physikalische Größen . . . . .	84
8.5	Der Operator der kinetischen Energie . . . . .	86
8.6	Eigenwertgleichung . . . . .	89
8.7	Operator der Gesamtenergie . . . . .	91
8.8	Die Grundgleichung der Quantenmechanik . . . . .	94
8.9	Das Auffinden stationärer Zustände mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung . . . . .	95

<b>10 Potentiale</b>	<b>97</b>
10.1 Elektronen im Potentialtopf . . . . .	97
<b>12 Atome</b>	<b>103</b>
12.1 Was sind Atome? . . . . .	103
12.2 Linienspektren . . . . .	104
12.3 Das Bohrsche Atommodell . . . . .	106
12.4 Abschied vom Bohrschen Atommodell . . . . .	108
12.5 Quantisierung der Energie im Franck-Hertz-Versuch . . . . .	109
12.6 Dreidimensionaler Potentialtopf und Orbitale . . . . .	111
<b>13 Das Wasserstoff-Atom</b>	<b>115</b>
13.1 Energiewerte des Wasserstoff-Atoms durch Kastenpotential-Näherung . . . . .	115



# Kapitel 1

## Photonen

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

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

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

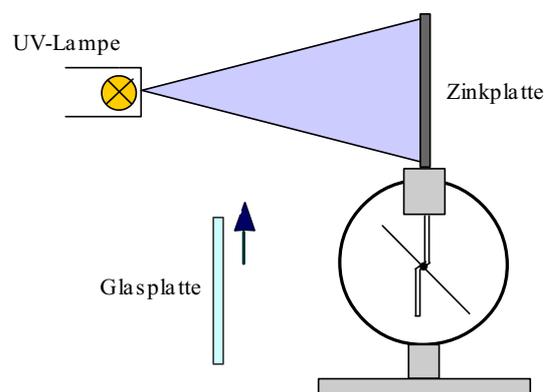
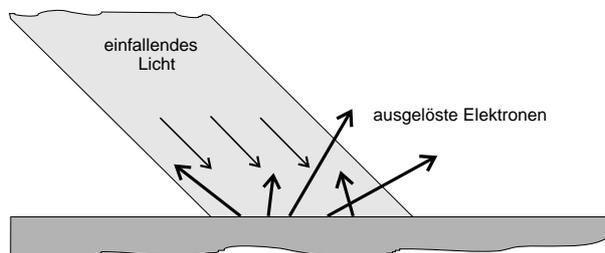


Abbildung 1.1: Versuchsaufbau zum Hallwachs-Effekt (Experiment 1.1)

Eine mögliche Erklärung für den Ausgang dieses Versuches besteht darin, dass Elektronen das Metall verlassen, wenn man es mit Licht bestrahlt. Das Licht scheint Elektronen aus der Zinkplatte „herauszuschlagen“ (Abbildung 1.2).



**Abbildung 1.2:** Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen

Dies erklärt den Abbau des Elektronenüberschusses auf der negativ geladenen Platte und damit die Entladung des Elektroskops. Allerdings kann nur UV-Licht den Effekt auslösen, wie das Einführen der Glasplatte zeigt. Es wird von der Glasplatte absorbiert, woraufhin die Entladung nicht stattfindet. Sichtbares Licht dagegen kann die Glasplatte fast ungehindert passieren. Die Auslösung von Elektronen aus einer Metalloberfläche durch Licht wird als äußerer **Photoeffekt** bezeichnet.

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

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

## 1.2 Deutung des Photoeffekts mit Photonen

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

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

$$E = h \cdot f. \quad (1.1)$$

Der Photoeffekt wird dann folgendermaßen mit Hilfe der Photonenvorstellung gedeutet:

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

Das an der Metalloberfläche austretende Elektron hat allerdings eine etwas kleinere kinetische Energie als  $h \cdot f$ . Denn um die Metalloberfläche von innen nach außen zu überwinden, muss das Elektron eine für das jeweilige Metall charakteristische Arbeit leisten, die man **Austrittsarbeit**  $W_A$  nennt. Zusätzlich können die Elektronen bereits im Innern des Metalls durch Stöße Energieverluste erleiden.

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

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

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

$$E_{\text{kin,max}} = h \cdot f - W_A. \quad (\text{Einstein-Gleichung}) \quad (1.3)$$

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

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

Um die Energiebilanz (1.3) experimentell zu prüfen, muss ein Messverfahren gefunden werden, mit dem die kinetische Energie der Elektronen für verschiedene Photonenenergien  $h \cdot f$  bestimmt werden kann.

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

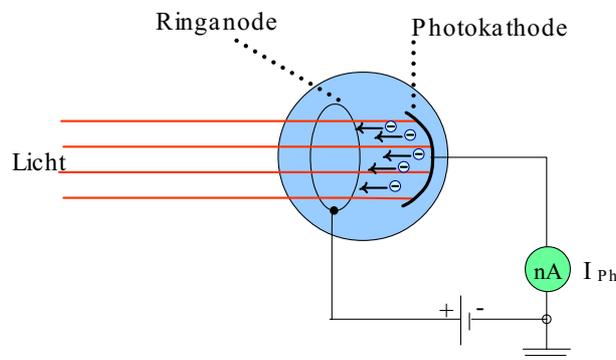


Abbildung 1.3: Nachweis des Photostroms mit einer Photozelle

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

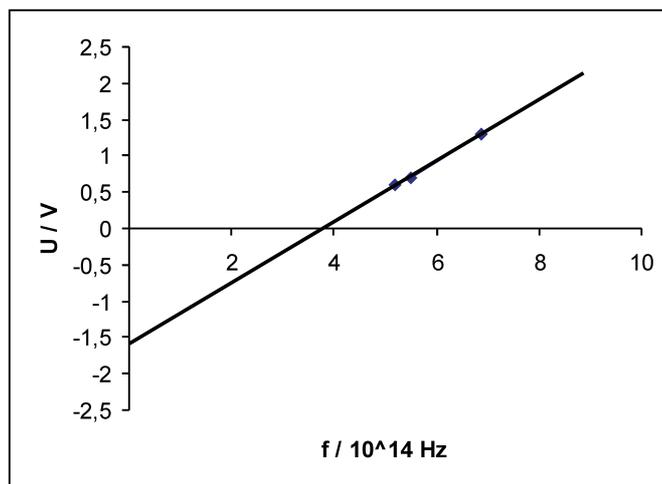
Die Bestimmung der kinetischen Energie der Elektronen gelingt mit der sogenannten *Gegenfeldmethode*. Dabei werden die Elektronen auf dem Weg zur Anode durch eine Gegenspannung  $U_g$  abgebremst. Der Photostrom wird Null, wenn die Gegenspannung gerade so weit erhöht wird, dass auch die schnellsten Elektronen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

bestimmen. Zudem kann der Wert für die Proportionalitätskonstante  $h$  (Plancksches Wirkungsquantum) bestimmt werden.

Das folgende Experiment ist sowohl als Realexperiment als auch in Form eines Interaktiven Bildschirmexperimentes (IBE) durchführbar. Wenn Sie das IBE benutzen möchten, rufen Sie das Programm „IBE zum Photoeffekt-deutsch.exe“ auf. Klicken Sie im Hauptmenü auf „Gegenfeldmethode“. Unter „Aufbau“ wird sowohl der reale Versuchsaufbau als auch eine Versuchsskizze dargestellt. Unter „Versuch“ können Sie direkt mit der Durchführung des Experimentes am Computer beginnen. Folgen Sie dazu den Anweisungen auf dem Bildschirm.

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

Da der Photostrom nur sehr allmählich abfällt, ist es schwierig, den Nullpunkt exakt festzulegen. Man stellt fest, dass die für verschiedene Frequenzen des auffallenden Lichts gemessenen Werte für die Gegenspannung auf einer Geraden liegen (Abbildung 1.4; Messwerte auf der Grundlage des IBEs zum Photoeffekt).



**Abbildung 1.4:** Gemessene Gegenspannungen für verschiedene Frequenzen

Dies stimmt mit Gleichung (1.3) überein, die umgeformt die Gestalt der Geradengleichung

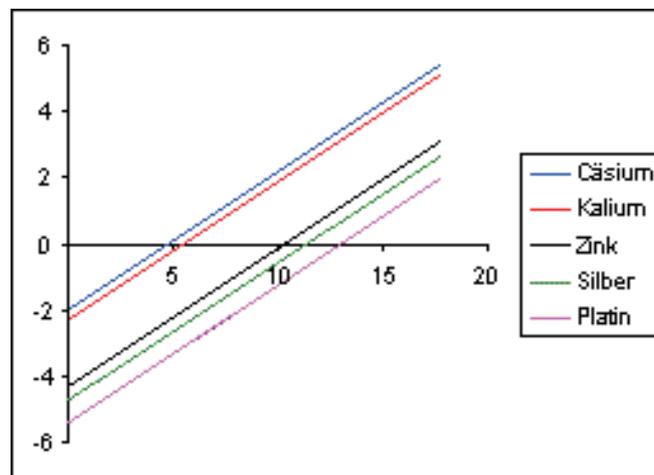
$$e \cdot U_g = h \cdot f - W_A \quad (1.4)$$

besitzt. Die dieser Gleichung zugrunde liegende Hypothese, dass die Photonenenergie proportional zur Frequenz ist, findet damit ihre Bestätigung. Aus dem Vergleich der Geradengleichung

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

mit den gemessenen Daten kann man die Werte der Konstanten  $h$  und  $W_A$  ablesen. Die Steigung der Geraden bestimmt die Proportionalitätskonstante  $h$  zwischen Photonenenergie und Frequenz. Aus präzisen Messungen ergibt sich der Wert von  $h$  zu  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Js. Die fundamentale Naturkonstante  $h$  wird als *Plancksches Wirkungsquantum* bezeichnet. Sie ist eine kennzeichnende Größe für das Auftreten von Quanteneffekten.

Die gemessene Gerade schneidet die  $f$ -Achse bei der sogenannten *Grenzfrequenz*  $f_{gr}$ . Für sie ist die kinetische Energie  $E_{kin,max} = e \cdot U_g$  der ausgelösten Elektronen Null. Die Photonenenergie reicht dann gerade aus, um die Austrittsarbeit aufzubringen. Licht mit einer Frequenz  $f < f_{gr}$  kann keine Elektronen aus dem betreffenden Metall auslösen. Die Austrittsarbeit  $W_A$  erhält man nach Gleichung (1.4) durch Extrapolation der Geraden zum Wert  $f = 0$ . Der Schnittpunkt mit der Ordinaten liegt bei  $e \cdot U_g = -W_A$ . Aus Abbildung (1.4) liest man einen Wert von etwa 1,6 eV ab (Literaturwert  $W_A = -2,25$  eV). Benutzt man Photozellen, bei denen andere Metalle als Kalium auf die Kathode aufgedampft sind, ergeben sich Geraden mit der gleichen Steigung, die aber wegen der verschiedenen Austrittsarbeiten andere Achsenschnittpunkte aufweisen (Abbildung 1.5).



**Abbildung 1.5:** Zusammenhang zwischen Frequenz und Gegenspannung für verschiedene Materialien

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

**Experiment 1.4:** Benutzen Sie den Versuchsaufbau von Experiment 1.3 und reduzieren Sie die Intensität des Lichts, das auf die Photoschicht fällt, z.B. durch Graufilter. Man beobachtet einen kleineren Photostrom, aber die Gegenspannung  $U_g$  zur Abbremsung der schnellsten Photoelektronen bleibt gleich.

Experiment 1.4 zeigt, dass die kinetische Energie der Photoelektronen nur von der Frequenz und nicht von der Intensität des Lichts abhängt. Nach der Photonentheorie ist das einsichtig, denn die Frequenz bestimmt die Photonenenergie. Nach der klassischen Wellentheorie hingegen sollte Licht höherer Intensität mehr Energie auf die Elektronen übertragen, weshalb die ki-

netische Energie der Photoelektronen mit der Intensität zunehmen sollte. Das Versuchsergebnis deutet also darauf hin, dass beim Photoeffekt die Energie in einem quantenhaften Einzelprozess auf die Elektronen übertragen wird.

## 1.4 Impuls von Photonen

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

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

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

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

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

Die quantenhafte Übertragung von Energie und die Existenz des Photonenimpulses deuten auf ein Teilchenmodell des Lichts hin. Aber wie sind dann die zahlreichen Befunde zur Interferenz des Lichts einzuordnen, die stark auf eine Wellentheorie hindeuten? Sie lassen sich nicht ohne weiteres mit einer Teilchenvorstellung erklären. Man stellt sich zu Recht die Frage, was das Licht denn nun eigentlich ist: Welle, Teilchen, oder etwas ganz anderes? Wellen- und Teilchenvorstellung sind so verschieden, dass man sich nicht vorstellen kann, dass beide gleichzeitig zutreffen.

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

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

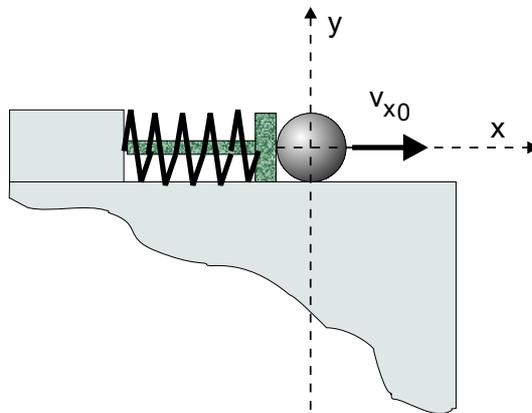
Allerdings ist die Quantenmechanik keine anschauliche Theorie. Die korrekte Beschreibung des oftmals seltsam anmutenden Verhaltens der Quantenobjekte wird mit einer gewissen Abstraktheit erkaufte. Um sich trotzdem in der Quantenwelt zurechtzufinden, ist es nützlich, zuerst einige begriffliche Grundlagen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

# Kapitel 2

## Präparation dynamischer Eigenschaften

### 2.1 Präparation dynamischer Eigenschaften in der klassischen Mechanik

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



**Abbildung 2.1:** Präparation von Ort und Geschwindigkeit beim horizontalen Wurf

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

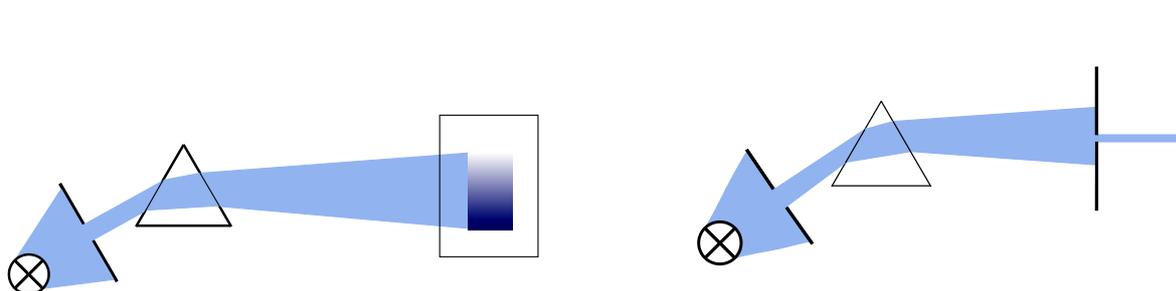
**Experiment 2.1 (Java-Applet):** Anhand des Java-Applets können Sie sich mit der Präparation einer Kugel auf bestimmte Anfangsbedingungen von Ort und Geschwindigkeit und mit der Güte einer Präparation vertraut machen.

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

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

## 2.2 Prismenversuch mit Licht

**Experiment 2.2:** Leiten Sie in einem abgedunkelten Raum ein dünnes Lichtbündel weißen Lichts auf ein Prisma (Abbildung 2.2 (a)). Auf dem Schirm sehen Sie das aus der elementaren Optik bekannte farbige Regenbogenspektrum. Sie können Licht einer bestimmten Farbe herstellen, indem Sie hinter das Prisma eine weitere Spaltblende stellen, die nur das Licht aus einem eng begrenzten Farbbereich (z. B. grün) durchlässt (Abbildung 2.2 (b)).



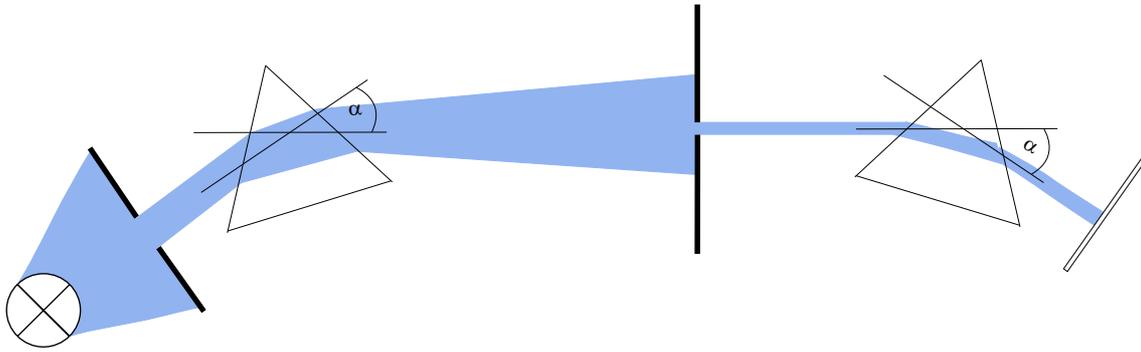
**Abbildung 2.2:** (a) Aufspaltung eines Lichtbündels im Prisma

(b) Ausblenden einer bestimmten Farbe

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

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

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



**Abbildung 2.3:** Test auf Präparation einer Eigenschaft

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

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

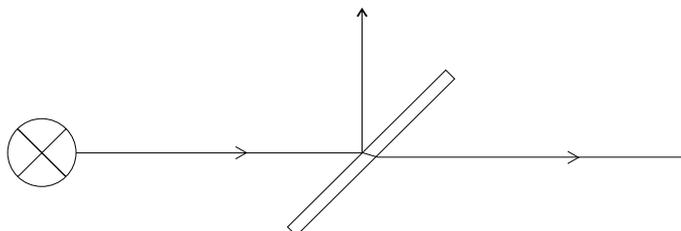
1. Die Blende hinter dem ersten Prisma lässt nur Licht durch, das um einen bestimmten Winkel abgelenkt wurde (vgl. Abbildung 2.2 (b)). Das durchgelassene Licht besitzt die dynamische Eigenschaft „wird um einen bestimmten Winkel abgelenkt“. Prisma und Blende haben Licht mit dieser Eigenschaft *präpariert*.
2. Das zweite Prisma hat eine andere Funktion. Es dient als *Test*, um zu bestätigen, dass wirklich eine Präparation auf eine bestimmte Eigenschaft stattgefunden hat. Liefert der Test ein eindeutiges und zugleich vorhersagbares Ergebnis, dann sprechen wir davon, dass das Objekt die entsprechende Eigenschaft besitzt.

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

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

## 2.3 Nicht immer wird eine Eigenschaft präpariert

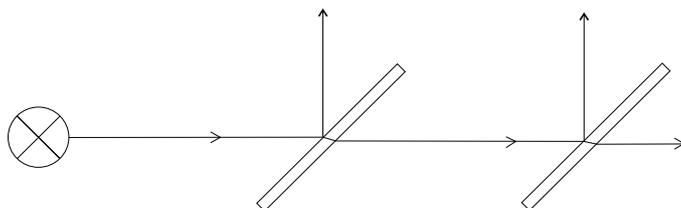
Nicht immer präpariert eine Versuchsanordnung eine dynamische Eigenschaft, auch wenn es zunächst den Anschein hat. Das sieht man an folgendem Experiment: Licht fällt unter einem Winkel von  $45^\circ$  auf einen Strahlteiler (einen halbdurchlässigen Spiegel; Abbildung 2.4). Das Licht wird teilweise durchgelassen und teilweise reflektiert, wobei der durchgelassene und der reflektierte Strahl die gleiche Intensität besitzen.



**Abbildung 2.4:** Durchgelassener und reflektierter Strahl am halbdurchlässigen Spiegel

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

Leiten Sie also den durchgelassenen Strahl auf einen zweiten Strahlteiler (Abbildung 2.5). In diesem Experiment zeigt sich jedoch, dass der durchgelassene Strahl am zweiten Strahlteiler erneut in einen durchgelassenen und einen reflektierten Anteil aufgespalten wird.



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

Das Versuchsergebnis zeigt, dass der durchgelassene Strahl keine Eigenschaft „wird durchgelassen“ besessen hat. Ein Strahlteiler führt also keine solche Präparation durch<sup>2</sup>. Tatsächlich kann man einen Lichtstrahl gar nicht so präparieren, dass er gänzlich durch einen halbdurchlässigen Spiegel durchgelassen wird.

<sup>2</sup>Es gibt jedoch auch polarisierende Strahlteiler, die das Licht präparieren.

## 2.4 Polarisation

Die folgenden Experimente sind sowohl als Realexperimente als auch in Form von Computersimulationen durchführbar. Wenn Sie die Computersimulation benutzen möchten, starten Sie das Programm Polfilter.exe und informieren Sie sich kurz unter Hilfe → Bedienungshinweise über das Handling mit dem Programm.

**Experiment 2.4 (Realexperiment oder Computersimulation):** Beleuchten Sie mit dem Licht einer 12 V-Experimentierleuchte ein waagrecht eingestelltes Polarisationsfilter (Abbildung 2.6). Die Intensität  $J_L$  des Lichts wird durch das Polarisationsfilter abgeschwächt; der durchgelassene Anteil besitzt etwa die halbe Intensität des ursprünglichen Lichts:  $J_0 = \frac{1}{2} J_L$ .

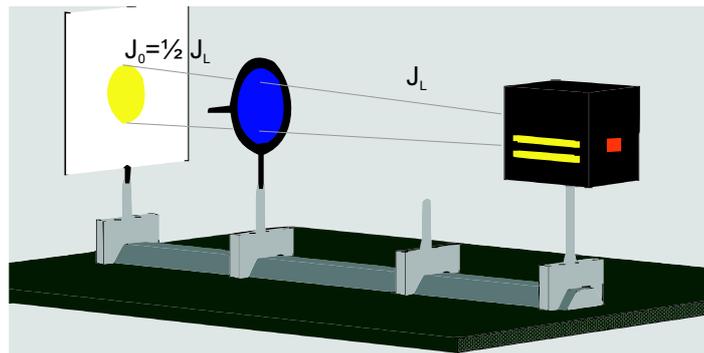


Abbildung 2.6: Herstellung von polarisiertem Licht

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

**Experiment 2.5 (Realexperiment oder Computersimulation):** Stellen Sie ein zweites waagrecht eingestelltes Polarisationsfilter in den Strahlengang (Abbildung 2.7). Sie werden keine merkliche Abschwächung der Lichtintensität beobachten; sowohl vor als auch hinter dem zweiten Polarisationsfilter ist die Intensität  $J = J_0$ .

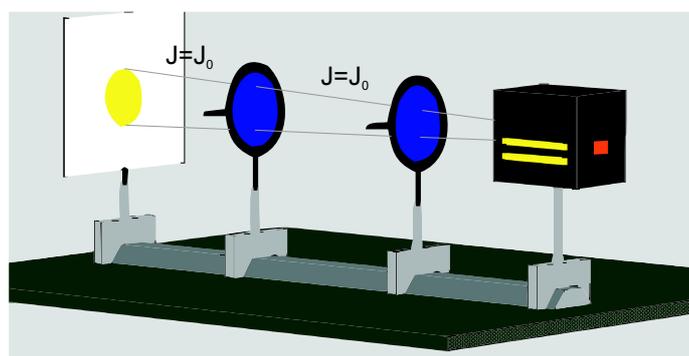
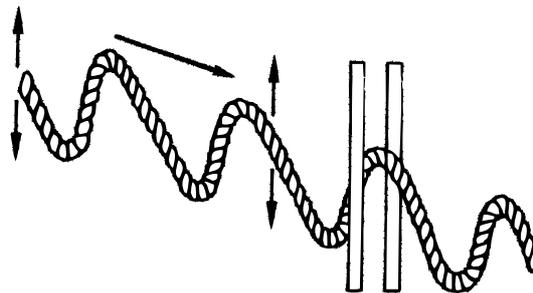


Abbildung 2.7: Test auf Präparation der Eigenschaft „waagrecht polarisiert“

Das Experiment zeigt, dass das erste Polarisationsfilter am Licht der Lampe eine Eigenschaft präpariert hat. Sie wird *Polarisation* genannt. Das waagrecht eingestellte Polarisationsfilter hat *waagrecht polarisiertes Licht* hergestellt. Das zweite Polarisationsfilter dient als Test für die Eigenschaft „waagrecht polarisiert“. Das vom ersten Polarisationsfilter auf diese Eigenschaft präparierte Licht konnte es ungehindert passieren.

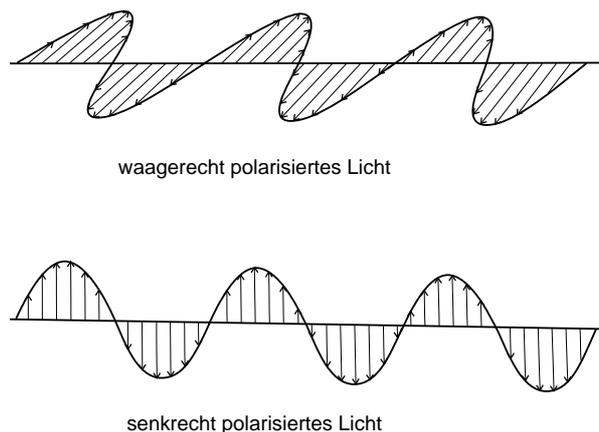
In der Wellentheorie des Lichts kann man sich die Eigenschaft „Polarisation“ und die Wirkungsweise eines Polarisationsfilters mit einem Modellversuch veranschaulichen:

**Experiment 2.7:** Zwei Stativstangen werden wie in Abbildung (2.8) in senkrechter Stellung befestigt. Mit einem Seil werden Wellen in senkrechter Richtung erzeugt. Die Seilwellen können das „Filter“ ungehindert passieren. Waagerechte Seilwellen werden dagegen von den Stativstangen aufgehalten („absorbiert“).



**Abbildung 2.8:** Modellversuch zur Polarisation

Bei den Seilwellen hängt es von der *Schwingungsrichtung* ab, ob die Welle durchgelassen wird oder nicht. Die Eigenschaft „Polarisation“ des Lichts lässt sich analog erklären, wenn man auf die Vorstellung von Licht als einer elektromagnetischen Welle Bezug nimmt. Hier ist es die Schwingungsebene des elektrischen Felds, welche die Polarisationsrichtung des Lichts bestimmt (Abbildung 2.9).



**Abbildung 2.9:** Waagrecht und senkrecht polarisiertes Licht

Schwingt das elektrische Feld in waagerechter Richtung, handelt es sich um waagrecht polarisiertes Licht. Schwingt das elektrische Feld jedoch in senkrechter Richtung, handelt es sich um senkrecht polarisiertes Licht. Allgemein lässt sich das folgendermaßen formulieren: Besitzt das elektrische Feld einer Lichtwelle ausschließlich eine Komponente in eine bestimmte Raumrichtung, ist das Licht in dieser Richtung polarisiert.



# Kapitel 3

## Wellen und Teilchen

### 3.1 Licht im Interferometer

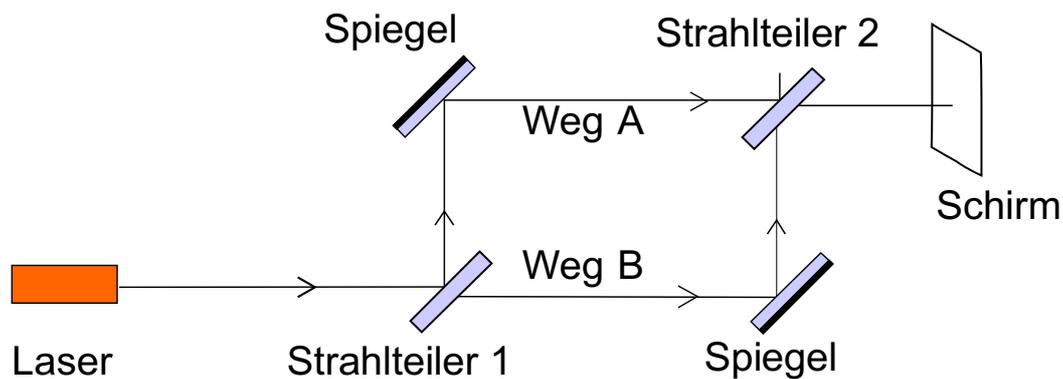
Einer der interessantesten und rätselhaftesten Aspekte der Quantenmechanik ist die Tatsache, dass sich Photonen und andere Quantenobjekte unter gewissen Umständen wie Wellen und unter anderen Umständen wie Teilchen verhalten. Dieser sogenannte *Welle-Teilchen-Dualismus* wurde bereits in Abschnitt 1.4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

Ein charakteristisches Merkmal für Wellenverhalten ist das Auftreten von *Interferenz*. Betrachten wir deshalb einen Versuchsaufbau, bei dem die Interferenz im Vordergrund steht: ein Interferometer. Der folgende Versuch ist als Realexperiment durchführbar, wenn ein Interferometer zur Verfügung steht.<sup>1</sup> Andernfalls kann der Versuch als Computersimulation durchgeführt werden. Laden Sie sich dafür das Programm *Interferometer.exe* herunter.

**Experiment 3.1 (Realexperiment oder Computersimulation):** Abbildung (3.1) zeigt den Aufbau eines *Mach-Zehnder-Interferometers*. Das Licht eines Lasers fällt auf einen Strahlteiler (einen halbdurchlässigen Spiegel) und wird von diesem in zwei Anteile aufgespalten, die entlang verschiedener Wege laufen (Weg A und Weg B). Beide Teilstrahlen werden durch Spiegel um 90° umgelenkt. An ihrem Schnittpunkt steht ein weiterer Strahlteiler, der die beiden Teilstrahlen wieder „mischt“.

---

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



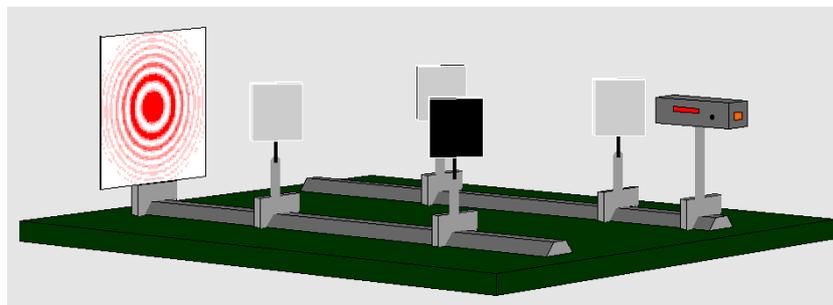
**Abbildung 3.1:** Mach-Zehnder-Interferometer

Hinweise zur Computersimulation:

Wenn Sie das Simulationsprogramm starten, erscheint zunächst ein dem in Abbildung (3.1) dargestellten Aufbau, entsprechender Versuchsaufbau. Klicken Sie auf den Button „Strahlengang“ und ein dem in Experiment 3.1 beschriebenen Verlauf entsprechender Verlauf des Laserlichts wird visualisiert.

Für die Durchführung der weiteren Experimente betätigen Sie den Button „Start“. Auch bei diesem Programm empfiehlt es sich, sich vor dem Arbeiten über das Handling unter „Hilfe“ → „Bedienungshinweise“ zu informieren (Zu dem anfangs dargestellten Versuchsaufbau können Sie jederzeit über „Hilfe“ → „Strahlengang“ zurückkehren).

Schalten Sie den Laser ein (bei der Computersimulation als Lichtquelle „Laser“ auswählen und mit der Maus auf den Einschaltknopf drücken). Auf dem Schirm erscheint ein Muster aus konzentrischen Kreisen (Abbildung 3.2).



**Abbildung 3.2:** Interferenzmuster bei intensivem Laserlicht

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

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

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

## 3.2 Vom Lichtstrahl zu einzelnen Photonen

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

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

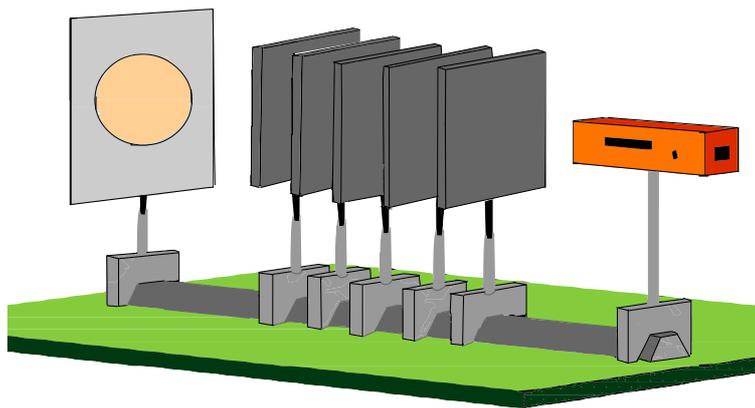


Abbildung 3.3: Abschwächen von Laserlicht

Mit jedem Graufilter wird das Licht weiter abgeschwächt, bis die Intensität schließlich so gering ist, dass man nichts mehr wahrnimmt. Einzelne Photonen sieht man dabei aber nicht. Der Grund dafür ist aber nicht unser Auge, sondern das visuelle Nervensystem, das für die Verarbeitung von optischen Reizen zuständig ist. Tatsächlich konnte nachgewiesen werden, dass die Stäbchen in der menschlichen Netzhaut auf einzelne Photonen reagieren. Die Verschaltung der Nerven, die von der Netzhaut zum Gehirn führen, macht es aber notwendig, dass innerhalb von 100 ms etwa 9 Photonen in einem gewissen Netzhautbereich registriert werden, damit ein Signal ins Gehirn weitergeleitet wird.

Das Problem besteht also im Nachweis der Photonen. Das bloße Auge ist nicht dazu geeignet, einzelne Photonen nachzuweisen. Ein Gerät, mit dem dies gelingt, ist ein CCD-Element (einfachere Ausfertigungen werden z. B. in Videokameras verwendet). Ein CCD-Element ist

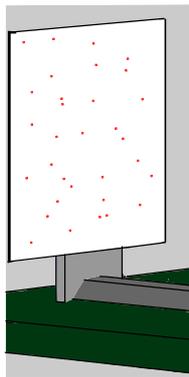
eine flächenhafte Anordnung von Halbleiter-Detektorbausteinen, die die Photonen nachweisen. Empfindliche CCD-Elemente können sogar einzelne Photonen registrieren. Der Ort, wo die Photonen auftreffen, wird elektronisch gespeichert, so dass die räumliche Verteilung der Photonen sichtbar gemacht werden kann.

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

### 3.3 Interferometrie mit einzelnen Photonen

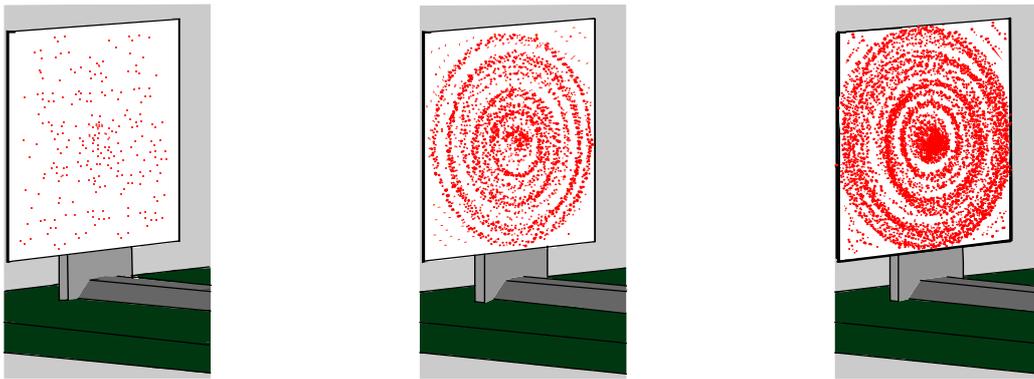
Führen wir das oben betrachtete Interferenzexperiment nun also mit einzelnen Photonen durch.

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



**Abbildung 3.4:** Verteilung weniger nachgewiesener Photonen

Wenn die Zahl der registrierten Photonen langsam ansteigt, sehen Sie, wie sich aus den Spuren der einzeln nachgewiesenen Photonen allmählich ein Muster herausbildet. Es handelt sich um das kreisförmige Interferenzmuster, das schon in Experiment 3.1 mit intensivem Licht eines Lasers beobachtet wurde. Abbildung (3.5) zeigt den allmählichen Aufbau des Musters aus einzelnen Photonen-„Einschlägen“. Um den Aufbau des Musters auf dem Schirm zu beschleunigen, betätigen Sie den Button „Tempo“.



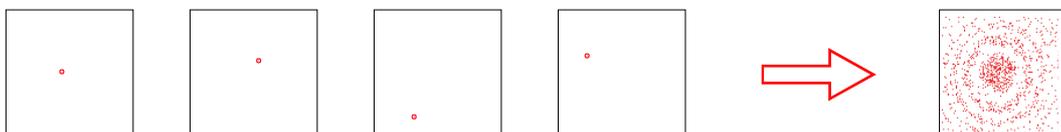
**Abbildung 3.5:** Aufbau des Interferenzmusters aus den Spuren einzelner Photonen

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

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

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

Man kann den scheinbaren Konflikt zwischen Wellen- und Teilchenverhalten sogar noch verschärfen. Wir stellen uns dazu eine Serie von Experimenten mit einzelnen Photonen vor. Das heißt, dass in jedem Experiment nur ein einzelnes Photon nachgewiesen wird (Abbildung 3.6).



**Abbildung 3.6:** Serie von Experimenten mit einzelnen Photonen

Die Experimente sollen zeitlich so weit auseinanderliegen, dass ein gegenseitiger Einfluss ausgeschlossen ist. In jedem dieser Einzelexperimente findet man einen kleinen Fleck, der vom

Nachweis des Photons herrührt. Er befindet sich an einer vermeintlich zufälligen Stelle. Notiert man bei jedem dieser Experimente die Koordinaten der Flecke und trägt sie in ein gemeinsames Diagramm ein, so zeigt sich in den Eintragungen eine überraschende Struktur: das bekannte Interferenzmuster. Obwohl jedes der Experimente für sich nur einen einzelnen Fleck lieferte, der sicherlich nicht als ein Wellenphänomen oder als ein abgeschwächtes Interferenzbild aufgefasst werden kann, liefert die Gesamtheit der unabhängigen Experimente das wellentypische Interferenzmuster.

Mit diesem Experiment sieht man deutlich, dass das Interferenzmuster nicht auf eine – wie auch immer geartete – Wechselwirkung der Photonen untereinander zurückgeführt werden kann. In jedem der Einzelexperimente ist nur ein einzelnes Photon beteiligt, eine Wechselwirkung zwischen verschiedenen Photonen ist also ausgeschlossen.

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

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

Um dies zu klären, benutzen wir den Begriff der dynamischen Eigenschaft. Wir fragen, ob ein Photon innerhalb des Interferometers die Eigenschaft „Weg“ besitzt. Das ist sicher dann der Fall, wenn man an jedem Photon eine *Markierung* anbringen kann, die eine Entscheidung zwischen Weg A und Weg B erlaubt. Um die Photonen zu markieren, kann man die Eigenschaft „Polarisation“ benutzen (vgl. Abschnitt 2.4). Dazu zunächst ein Vorversuch:

**Experiment 3.4 (Computersimulation):** Bringen Sie im Simulationsprogramm ein Polarisationsfilter in jeden der beiden Interferometerwege (Polarisationsfilter 1 und 2 auswählen). Stellen Sie beide Polarisationsfilter zunächst senkrecht ein und schalten Sie die Quelle ein. Sie werden feststellen, dass sich wie in Versuch 3.3 aus den „Einschlägen“ vieler einzelner Photonen nach und nach das Interferenzmuster zusammensetzt (Abbildung 3.7). Auch hier können Sie den Aufbau des Musters auf dem Schirm beschleunigen, indem Sie den Button „Tempo“ betätigen.

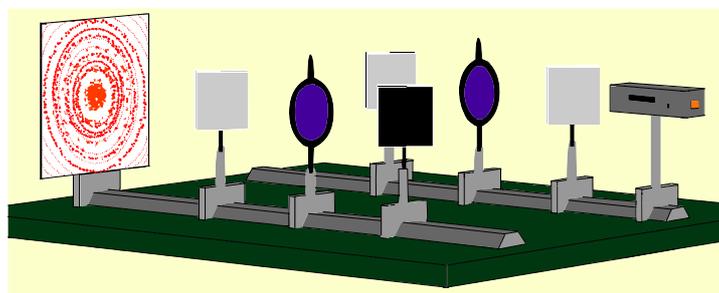


Abbildung 3.7: Mach-Zehnder-Interferometer mit Polarisationsfiltern

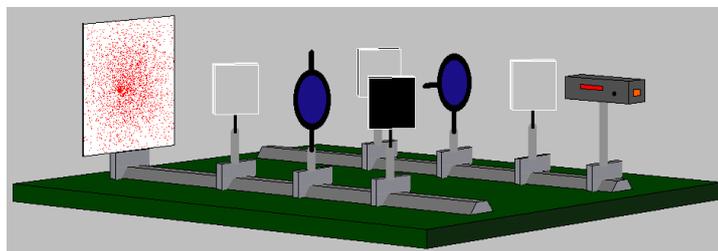
Das Einbringen der beiden gleich eingestellten Polarisationsfilter hat an dem Ergebnis des Experiments nichts verändert. Der einzige Unterschied zu Experiment 3.3 ist, dass die Polarisationsfilter im Mittel die Hälfte der Photonen absorbieren, so dass es länger dauert, bis sich das Interferenzmuster zusammensetzt. Wir können den Versuch noch einmal mit waagrecht eingestellten Polarisationsfiltern wiederholen; solange die Polarisationsfilter parallel stehen, ergibt sich immer das gleiche Ergebnis.

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

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

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

**Experiment 3.5 (Computersimulation):** Bringen Sie das Polarisationsfilter in Weg B in waagerechte Stellung und das in Weg A in senkrechte Stellung. Schalten Sie die Quelle ein. Wieder regt jedes einzelne Photon nur einen Detektorbaustein an. Aus den Spuren vieler Photonen bildet sich jedoch *kein* Interferenzmuster, sondern eine strukturlose Verteilung (Abbildung 3.8).



**Abbildung 3.8:** Schirmbild bei zueinander orthogonal eingestellten Polarisationsfiltern

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

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

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

Allgemein lässt sich sagen:

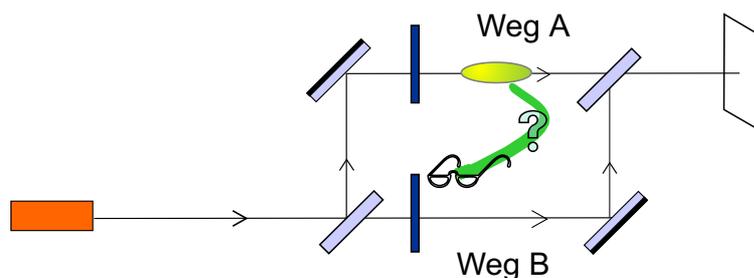
**In der Quantenmechanik ist es möglich, dass einem Quantenobjekt eine bestimmte Eigenschaft (z. B. „Weg A“ oder „Weg B“) nicht zugeschrieben werden kann.**

### 3.5 Anschauliche Erklärung des Ergebnisses

Man kann sich die Folgerung aus dem letzten Abschnitt auch auf anschauliche Art plausibel machen: In Experiment 3.4 erscheint das Interferenzmuster unabhängig davon, ob beide Polarisationsfilter gleichzeitig waagrecht oder senkrecht stehen. Entscheidend ist nur, dass sie parallel stehen. Bei diesem Experiment gibt es Gebiete auf dem Schirm (die Interferenzminima), in denen mit Sicherheit kein Photon nachgewiesen wird.

In Experiment 3.5, in dem die Polarisationsfilter orthogonal zueinander eingestellt sind, findet man an diesen Stellen dagegen Photonen. Was bedeutet dies für unsere Vorstellung von Photonen? Um entscheiden zu können, ob in den betreffenden Gebieten Photonen gefunden werden, muss man die Stellung beider Polarisationsfilter kennen. Wäre nun ein Photon tatsächlich ein lokalisiertes Gebilde, das auf genau einem der beiden Wege durch das Interferometer läuft, müsste es auf wundersame Weise „wissen“, wie das Polarisationsfilter im anderen Weg eingestellt ist, um sich am Schirm „korrekt zu verhalten“.

Es ist nicht leicht, sich vorzustellen, wie das Photon das „Wissen“ über die Stellung des Polarisationsfilters im anderen Arm erlangt haben kann (Abbildung 3.9).



**Abbildung 3.9:** Wie kann ein lokalisiertes Photon „wissen“, wie das andere Polarisationsfilter eingestellt ist?

Die Vorstellung vom Photon als einem lokalisiertem Gebilde, das entweder auf Weg A oder auf Weg B zum Schirm gelangt, gerät hier in Schwierigkeiten. Möchte man eine Fernwirkungsvorstellung wie in Abbildung (3.9) vermeiden, bleibt nur der Schluss, dass unsere Ausgangsanahme falsch war. Also:

Man darf sich ein Photon nicht als lokalisiertes Gebilde mit einem festen Ort vorstellen; man kann ihm die Eigenschaft Weg nicht ohne weiteres zuschreiben.

### 3.6 Teilt sich das Photon?

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

**Experiment 3.6 (Computersimulation):** Stellen Sie wie in Abbildung (3.10) in die beiden Wege des Mach-Zehnder-Interferometers je einen Photonendetektor (mit der Maus auswählen). Schalten Sie die Lichtquelle ein und lassen Sie die Quelle einzelne Photonen emittieren. An den Detektoren blinkt ein Signal auf, wenn ein Photon nachgewiesen wurde. Es spricht jeweils nur einer der beiden Detektoren an, niemals beide gleichzeitig. Mehrere „Teile“ von Photonen werden demnach nicht gefunden.

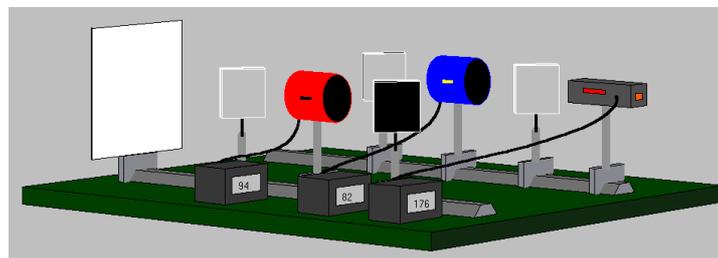


Abbildung 3.10: Photonendetektoren in den Interferometerarmen

Photonen spalten sich also an dem halbdurchlässigen Spiegel im Interferometer nicht in „Teile“ auf. Bei einer Messung wird ein Photon immer nur als Ganzes in einem der Wege A oder B gefunden. Dies wird auch dadurch bestätigt, dass an einem Detektor immer der gesamte Energiebetrag  $h \cdot f$  nachgewiesen wird, den die einzelnen Photonen beim Verlassen der Lampe besessen haben.

Die Ergebnisse von Experiment 3.5 und 3.6 scheinen sich zunächst zu widersprechen: Experiment 3.5 sagt, dass man einem Photon keinen Weg zuordnen kann, wohingegen Experiment 3.6 zeigt, dass man bei einer Messung immer ein ganzes Photon in einem der Wege A oder B findet. Es handelt sich hierbei jedoch nicht um einen Widerspruch, sondern um einen zentralen Zug der Quantenmechanik: Obwohl ein Photon im Interferometer keine der Eigenschaften „Weg A“ oder „Weg B“ besitzt, wird es bei einer *Messung* immer als Ganzes in einem der Ar-

me gefunden. Der Begriff der Messung stellt in der Quantenmechanik nicht mehr eine einfache Zurkenntnisnahme einer dem Quantenobjekt bereits zukommenden Eigenschaft dar. Sie stellt im Allgemeinen eine nicht zu vernachlässigende Beeinflussung der Eigenschaften des Systems dar. Bevor wir in den nachfolgenden Kapiteln zu einer tiefergehenden Analyse dieser Probleme übergehen, soll hier eine vorläufige Formulierung dieses Grundprinzips gegeben werden:

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

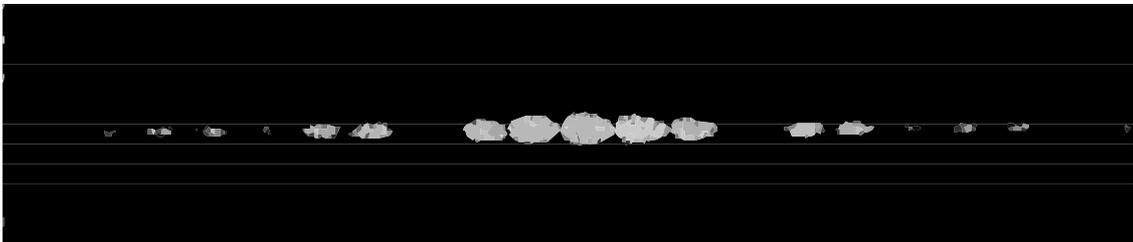
# Kapitel 4

## Die statistischen Aussagen der Quantentheorie

### 4.1 Doppelspaltexperiment mit Licht

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

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



**Abbildung 4.1:** Doppelspaltversuch mit Laserlicht

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

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

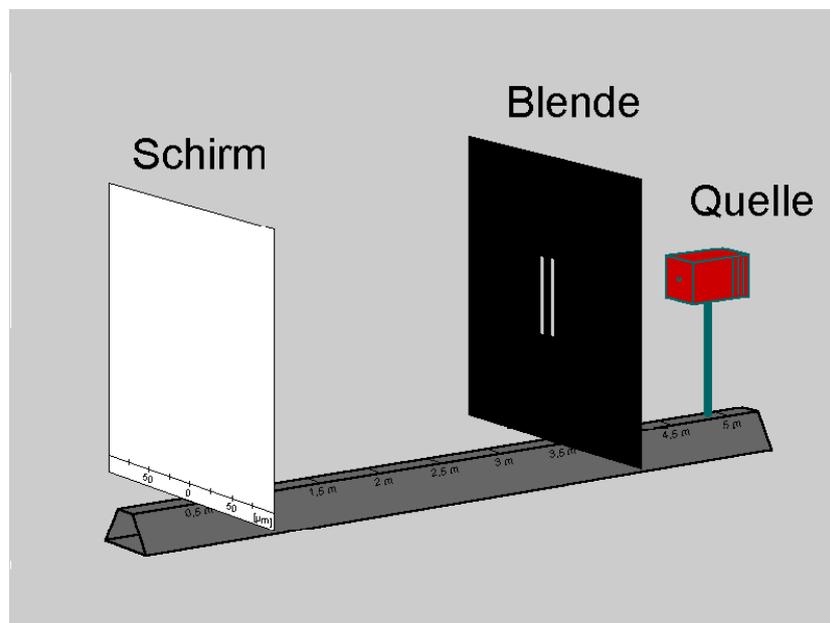
## 4.2 Das Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen und die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie

Da ein reales Doppelspaltexperiment mit einzelnen Photonen zwar möglich, aber doch sehr aufwendig ist, greifen wir auch hier zur Computersimulation. Laden Sie sich das Simulationsprogramm `Doppelspalt.exe` herunter, installieren Sie es auf Ihrem Rechner und starten Sie es.

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

Das „Labor“ besteht im Wesentlichen aus drei Komponenten (Abbildung 4.2):

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



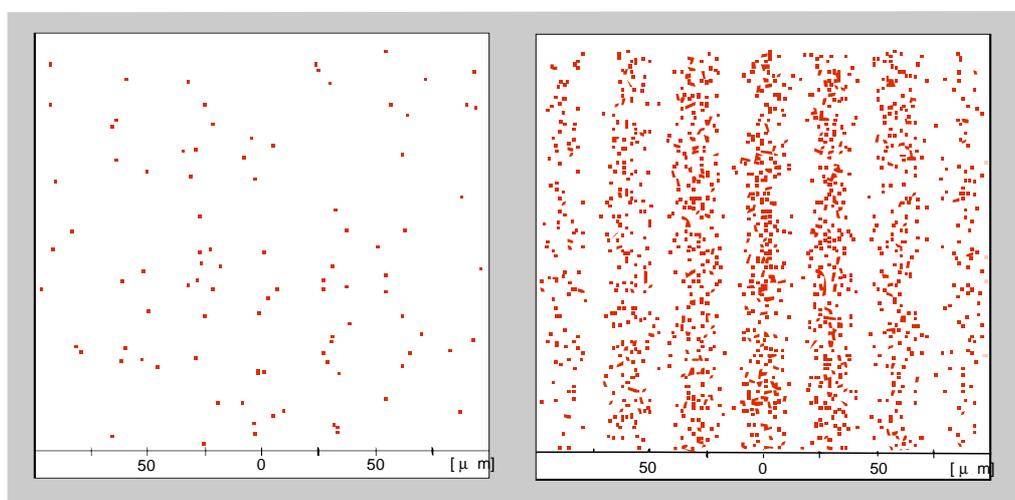
**Abbildung 4.2:** Das „interaktive Labor“ im Simulationsprogramm zum Doppelspaltexperiment

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

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

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

**Experiment 4.2 (Computersimulation):** Führen Sie das folgende Simulationsexperiment durch: Wählen Sie Photonen mit einer Energie von 200 eV, eine Spaltbreite von 200  $\mu\text{m}$ , einen Spaltabstand von 700  $\mu\text{m}$  und stellen Sie den Zoom des Schirms auf 10000x. Nach Einschalten der Quelle werden Photonen auf dem Schirm nachgewiesen. Sie hinterlassen punktförmige „Flecke“ an scheinbar zufälligen Stellen auf dem Schirm (Abbildung 4.3). Sie werden feststellen, dass sich ein Muster herausbildet, je mehr Photonen nachgewiesen werden (evtl. mit der Taste „Speed“ beschleunigen). Es handelt sich um das aus Experiment 4.1 bekannte Doppelspalt-Interferenzmuster.



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

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

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

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

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

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

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

### 4.3 Präparation und Wahrscheinlichkeitsaussagen

Die Bedeutung der Wahrscheinlichkeitsaussagen in der Quantenmechanik wird deutlicher, wenn wir den in Kapitel 2 eingeführten Begriff der Präparation von Eigenschaften benutzen. Wir unterteilen das Doppelspaltexperiment in zwei Phasen (Diese Unterteilung kann allgemein für jedes Experiment im Bereich der Quantenphysik vorgenommen werden):

- **Präparation:** Herstellung von Photonen in einem bestimmten Zustand, z.B. Erzeugen eines schmalen parallelen Lichtbündels mit **einer** bestimmten Frequenz bzw. Wellenlänge. Dann besitzen alle Photonen den gleichen Impuls, d.h. sie sind auf die Eigenschaft Impuls präpariert.
- **Messung, einschließlich der Registrierung von Messergebnissen:** Die auf Impuls präparierten Photonen wechselwirken mit der Messapparatur und die einzelnen Messergebnisse werden registriert. Beim Doppelspaltexperiment besteht die Messapparatur aus dem Doppelspalt und dem Nachweisschirm mit der Registrierungseinrichtung für die einzelnen Auftrefforte.

Experimente in der klassischen Physik laufen ebenfalls nach diesem Schema ab. Wenn man einen Basketball so wirft, dass er in den Korb fällt, besteht die Präparation darin, den Ball mit der richtigen Geschwindigkeit unter dem richtigen Winkel abzuwerfen, die Registrierung des Durchgangs durch den Basketballkorb erfolgt z.B. durch ein angehängtes Netz.

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

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

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

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

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

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

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



# Kapitel 5

## Elektronen als Quantenobjekte

### 5.1 Elektronenbeugung

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

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

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

**Experiment 5.1 (Elektronenbeugung):** In einer Elektronenbeugungsröhre (Abbildung 5.1 (a)) emittiert die mit 6 V geheizte Kathode Elektronen. Diese durchlaufen eine Beschleunigungsspannung  $U_B = 5$  kV. Sie werden von den nacheinander angeordneten Elektroden  $K_1$ ,  $K_2$  und  $A_1$  zu einem Elektronenstrahl gebündelt. In der durchbohrten Anode  $A_2$  durchquert der Strahl eine dünne Folie aus polykristallinem Graphit. Auf dem Leuchtschirm erkennt man mehrere helle Ringe um den zentralen Fleck in der Mitte (Abbildung 5.1 (b)). Eine Vergrößerung von  $U_B$  bewirkt eine Verkleinerung der Radien.

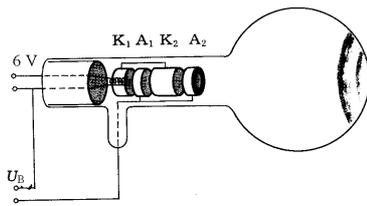
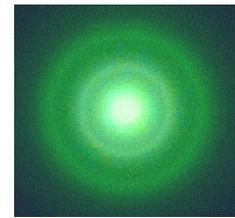


Abbildung 5.1: (a) Elektronenbeugungsröhre



(b) Beugungsmuster auf dem Leuchtschirm

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

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

## 5.2 Doppelspaltexperiment mit Elektronen und Atomen

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

**Experiment 5.2 (Computersimulation):** Starten Sie das Simulationsprogramm zum Doppelspaltexperiment. Wählen Sie Elektronen mit einer Energie von 50 keV, eine Spaltbreite von 300 nm und einen Spaltabstand von 1000 nm. Schalten Sie die Quelle ein. Die ersten nachgewiesenen Elektronen hinterlassen einzelne punktförmige Flecke an scheinbar zufälligen Stellen auf dem Schirm. Je mehr Elektronen nachgewiesen werden, desto deutlicher setzen sich die punktförmigen Flecken zu dem bekannten Doppelspalt-Interferenzmuster zusammen (Abbildung 5.2 (a) – (d)).

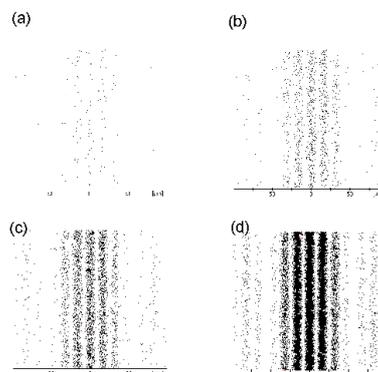


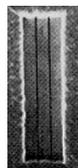
Abbildung 5.2: Aufbau des Interferenzmusters beim Doppelspaltexperiment

Das Verhalten der Elektronen im Doppelspaltexperiment ist völlig analog zu dem von Photonen (Abschnitt 4.2). Jedes einzelne Elektron verhält sich beim Nachweis wie ein Teilchen. Es überträgt seine gesamte Energie auf eine einzelne Stelle auf dem Schirm. Erst wenn man die Verteilung aus vielen Einzelaufschlägen betrachtet, zeigt sich die charakteristische Wellenerscheinung des Interferenzmusters.

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

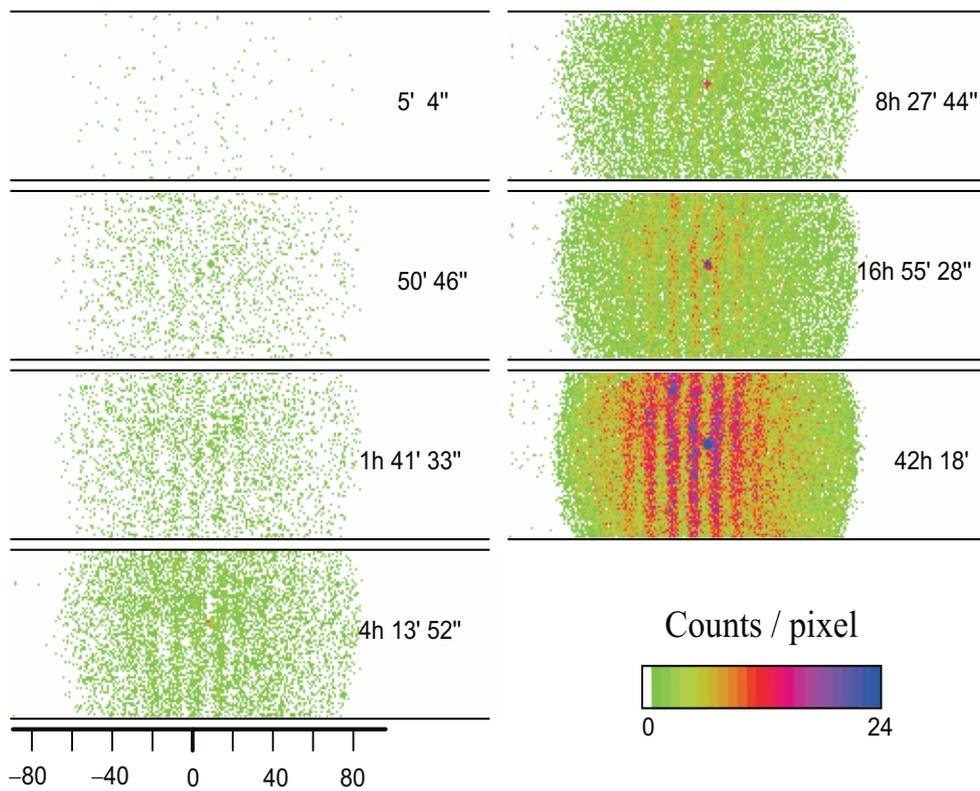
Die technischen Schwierigkeiten bei der Durchführung eines Doppelspaltexperiments mit Elektronen sind so groß, dass sie lange Zeit nur als Gedankenexperimente existierten. Die Schwierigkeit liegt in der Herstellung von Spalten, deren Breite nur einen halben Mikrometer ( $0,5 \cdot 10^{-6}$  m) beträgt. Aus diesem Grund gelang es erst 1961 (an der Universität Tübingen), das Doppelspaltexperiment mit Elektronen durchzuführen. Spaltbreite, Spaltabstand und Elektronenenergie entsprachen dabei den in Experiment 5.2 eingestellten Werten.

Inzwischen konnten Beugungsexperimente auch mit Neutronen, mit ganzen Atomen und sogar mit Molekülen verwirklicht werden. An der Universität Konstanz wurde 1991 ein Doppelspaltexperiment realisiert, bei dem Helium-Atome als Ganzes zur Interferenz gebracht wurden. Dies gelang, indem man sich Techniken aus der Halbleiterherstellung zunutze machte, um aus einer dünnen Goldfolie einen Doppelspalt mit zwei  $1 \mu\text{m}$  breiten Spalten im Abstand von  $8 \mu\text{m}$  herzustellen (Abbildung 5.3).



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

In dem Experiment wurden die Heliumatome vor dem Doppelspalt durch Elektronenstoß in einen angeregten Zustand gebracht. Dahinter trafen sie auf eine Goldfolie, die als Detektorschirm diente. Sie gaben dort ihre Anregungsenergie ab und wurden elektronisch registriert. Abbildung (5.4) zeigt, wie sich nach und nach das Interferenzmuster aus den „Flecken“ einzeln nachgewiesener Heliumatome aufbaut. Das Experiment erstreckte sich über einen Zeitraum von 42 Stunden, so dass trotz der großen Zahl der insgesamt nachgewiesenen Atome jedes Atom einzeln registriert werden konnte.



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

**Experiment 5.3 (Computersimulation):** Führen Sie das Doppelspaltexperiment mit Heliumatomen durch. Stellen Sie im Simulationsprogramm die oben angegebenen experimentellen Parameter (Spaltbreite  $1 \mu\text{m}$ , Spaltabstand  $8 \mu\text{m}$ ) und eine Energie von  $100 \text{ meV}$  ein. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit den Originaldaten aus Abbildung (5.4) (Im realen Experiment betrug der Abstand zwischen Doppelspalt und Schirm  $1,95 \text{ m}$ ).

## 5.3 Die Wellenlänge von Elektronen

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot E_{\text{kin}}}} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot e \cdot U_B}}. \quad (5.4)$$

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

Werten wir nun das Experiment 5.1 quantitativ aus. Man muss dazu wissen, dass der Graphitkristall zwei Netzebenen mit den Abständen  $d = 0,213 \text{ nm}$  und  $d = 0,123 \text{ nm}$  besitzt (Abbildung 5.5).

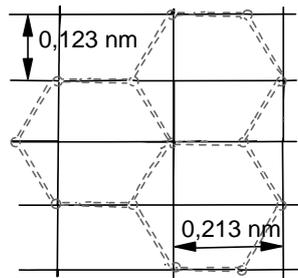


Abbildung 5.5: Netzebenen im Graphitkristall

In Analogie zur Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlung lautet die Bragg-Bedingung für die zwei hellen Ringe der Ordnung  $n = 1$  für beide Netzebenen:

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

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

$$\tan(2\alpha) = \frac{R}{L} \quad (5.6)$$

gilt, wobei  $R$  der Radius der Beugungsringe und  $L$  der Abstand des Kristalls vom Schirm (im vorliegenden Experiment ist  $L = 0,135$  m).

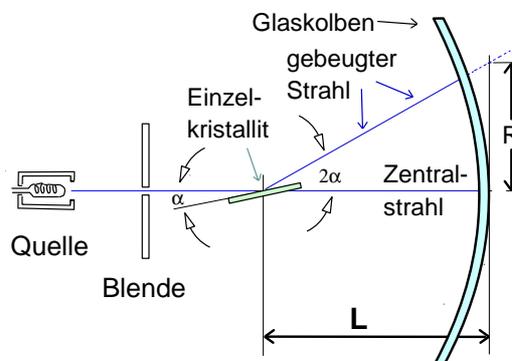


Abbildung 5.6: Geometrie bei der Elektronenbeugung

Gleichung (5.5) wird also zu

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

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

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

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

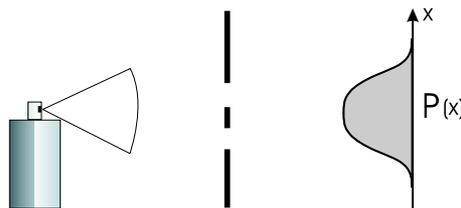
$$\lambda = \frac{0,123 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 1,9 \cdot 10^{-2} \text{ m}}{0,135 \text{ m}} = 1,7 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (5.9)$$

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

## 5.4 Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen und mit Elektronen

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

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



**Abbildung 5.7:** Doppelspaltversuch bei zwei geöffneten Spalten mit Farbtröpfchen (klassische Teilchen)

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

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

**Experiment 5.5 (Experiment oder Computersimulation):** In Experiment 5.4 wird Spalt 2 abgedeckt (Abbildung 5.8 (a)), so dass nur Farbtröpfchen von Spalt 1 auf das Papier gelangen. Es ergibt sich die Farbintensitätsverteilung  $P_1(x)$ . Danach wird der andere Spalt abgedeckt, so dass nur Farbe von Spalt 2 auf das Papier gelangt. Man erhält so die Verteilung  $P_2(x)$  (Abbildung 5.8 (b)).

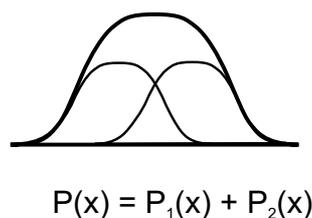


**Abbildung 5.8:** Doppelspaltversuch bei einem geöffneten Spalt mit Farbtröpfchen (klassische Teilchen)

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

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

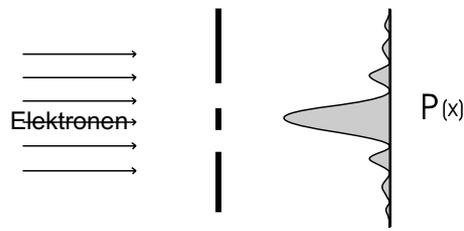
Für klassische Teilchen ist die beim Doppelspalt gewonnene Verteilung gleich der *Summe der beiden Einzelspaltverteilungen* (Abbildung 5.9).<sup>1</sup>



**Abbildung 5.9:** Verteilung beim Doppelspaltversuch mit Farbtröpfchen (klassische Teilchen)

Ganz anders verläuft ein entsprechendes Experiment mit Elektronen. Zunächst erinnern wir uns noch einmal an das Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten, bei dem sich auf dem Schirm das charakteristische Interferenzmuster ergab (Abbildung 5.10).

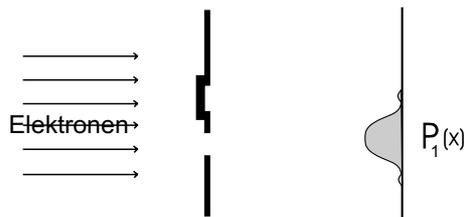
<sup>1</sup>Falls die Tröpfchen senkrecht auf die Spalten auftreffen würden, wäre die Breite der Verteilungen  $P_1(x)$  und  $P_2(x)$  gleich der Spaltbreite und es entstünde ein scharfer Schatten.



**Abbildung 5.10:** Doppelspaltversuch bei zwei geöffneten Spalten mit Elektronen

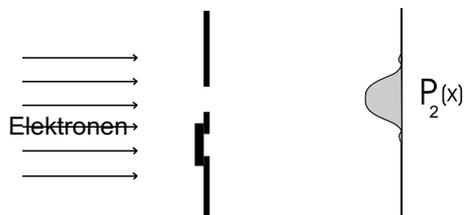
Die Intensitätsverteilung der Elektronen bezeichnen wir wieder mit  $P(x)$ . Nun wird jeweils einer der Spalte abgedeckt:

**Experiment 5.6 (Computersimulation):** Verwenden Sie für die folgenden Versuche die Energie und die Spalteinstellungen von Experiment 5.2 (Energie 50 keV, Spaltbreite 300 nm, Spaltabstand 1000 nm). Klicken Sie im Simulationsprogramm zum Doppelspaltversuch auf den Schirm und schließen Sie Spalt 2. Nun können die Elektronen nur noch durch Spalt 1. Wenn Sie die Quelle einschalten und warten, bis sich das Schirmbild aufgebaut hat, erhalten Sie eine Elektronenverteilung  $P_1(x)$ , deren Maximum hinter Spalt 1 liegt (Abbildung 5.11).



**Abbildung 5.11:** Doppelspaltversuch bei einem geöffneten Spalt mit Elektronen

Nun öffnen Sie Spalt 2 wieder und schließen Spalt 1. Alle Elektronen müssen jetzt durch Spalt 2. Nach Einschalten der Quelle ergibt sich die Verteilung  $P_2(x)$ , deren Maximum hinter Spalt 2 liegt (Abbildung 5.12).<sup>2</sup>

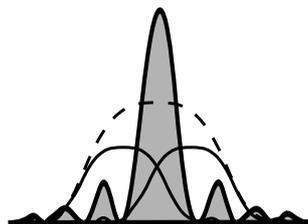


**Abbildung 5.12:** Doppelspaltversuch bei einem geöffneten Spalt mit Elektronen

<sup>2</sup>Man beachte, dass in Wirklichkeit der Abstand der Spalten und die Spaltbreite in Relation zu dem Abstand zwischen Schirm und Spalt winzig klein ist.

Legt man die beiden Verteilungsmuster übereinander (Abbildung 5.13), ergibt sich eine *andere* Verteilung, als bei zwei gleichzeitig geöffneten Spalten.<sup>3</sup> Für Elektronen gilt

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



$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$$

**Abbildung 5.13:** Verteilung beim Doppelspaltversuch mit Elektronen

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

Eine Besonderheit fällt beim Vergleich der Abbildungen (5.10) und (5.12) auf. Bei zwei geöffneten Spalten (Abbildung 5.10) gibt es mehrere Intensitätsminima, an denen fast keine Elektronen nachgewiesen wurden. An diesen Stellen ist die Elektronenintensität *größer*, wenn nur ein Spalt geöffnet ist. Das heißt, dass dort mehr Elektronen nachgewiesen werden, obwohl die „Zugangsmöglichkeiten“ (die Zahl der Spalte) geringer sind.

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

## 5.5 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Wellenfunktion

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

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

<sup>3</sup>Das Übereinanderlegen der beiden Verteilungen können Sie im Simulationsprogramm dadurch erreichen, dass sie auf den Schirm klicken und in dem Fenster, das daraufhin erscheint, auf den mit „A“ beschrifteten Knopf drücken. Damit wird das automatische Löschen des Schirms nach jeder Änderung der Konfiguration verhindert.

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

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

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

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

Eine derartige Wahrscheinlichkeitsaussage lässt sich natürlich nur überprüfen, indem man eine große Anzahl von Experimenten an identisch präparierten einzelnen Elektronen durchführt. Genau dies wird im Doppelspaltexperiment getan: Sehr viele voneinander unabhängige Elektronen durchlaufen die gleiche Versuchsanordnung und werden nachgewiesen. Eine solche Menge von sehr vielen identisch präparierten und einander nicht beeinflussenden Elektronen wurde in Abschnitt 4.3 als ein **Ensemble** bezeichnet. Der Begriff des Ensembles spielt eine zentrale Rolle, wenn es darum geht, das Verhalten von Quantenobjekten mathematisch – also quantitativ – zu charakterisieren.

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

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

Es hat sich als vorteilhaft herausgestellt, nicht mit  $P(x)$  selbst zu arbeiten, sondern mit einer Funktion  $\psi(x)$ , die man **Wellenfunktion** nennt (Für die Bestimmung von  $\psi(x)$  kann man Gleichungen angeben (siehe Kapitel??: Schrödinger-Gleichung)).  $P(x)$  ist nicht leicht zu berechnen, sondern ergibt sich aus  $\psi(x)$  durch  $P(x) = |\psi(x)|^2$ . Die Wellenfunktion ist einem *Ensemble von identisch präparierten Quantenobjekten* zugeordnet.

Die Interpretation von  $P(x) = |\psi(x)|^2$  als Wahrscheinlichkeitsdichte ist eines der zentralen Elemente der Quantenmechanik. Sie wurde von Max Born begründet und ist nach ihm benannt<sup>4</sup>:

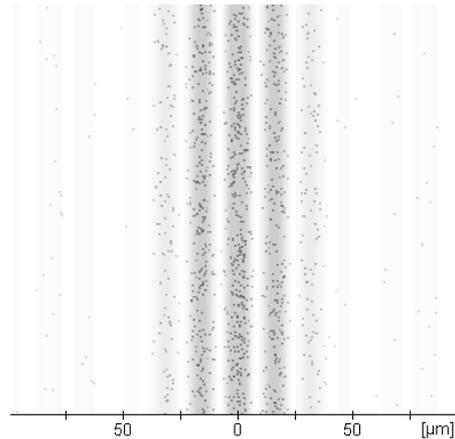
**Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation: Quantenobjekte werden durch eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  beschrieben. Die Wellenfunktion bestimmt die Wahrscheinlichkeit, ein Quantenobjekt im Intervall  $\Delta x$  um den Ort  $x$  nachzuweisen:**

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

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

Im Licht der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation haftet diesem Ergebnis nichts Geheimnisvolles mehr an. Die Elektronen werden durch eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  beschrieben. In Analogie zur Wellenoptik bildet sich eine Interferenzfigur. Abbildung (5.14) zeigt ihren Verlauf als graue Schattierung.

<sup>4</sup>Bei der Betrachtung dreidimensionaler Probleme bestimmt die Wellenfunktion  $\psi(x)$  die Wahrscheinlichkeit ein Quantenobjekt im Volumenelement  $\Delta V$  um den Ort  $x$  nachzuweisen:  $P(x) \cdot \Delta x = |\psi(x)|^2 \cdot \Delta x$ .



**Abbildung 5.14:** Wahrscheinlichkeitsverteilung (graue Schattierung) und nachgewiesene Elektronen (schwarze Punkte). Je dunkler die Schattierung, um so größer ist  $|\psi(x)|^2$ .

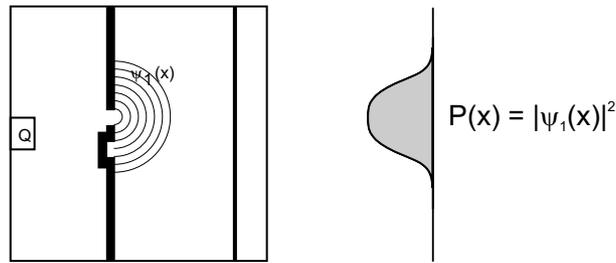
Dagegen gibt  $|\psi(x)|^2 \cdot \Delta x$  die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron an einem bestimmten Ort, also teilchenhaft nachzuweisen. Beim Nachweis verhält sich ein Elektron teilchenhaft, d. h. es hinterlässt einen genau lokalisierten Fleck auf dem Schirm (schwarze Punkte in Abbildung 5.14).

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

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

## 5.6 Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsverteilung beim Doppelspaltexperiment

Machen wir uns nun anhand des Doppelspaltexperiments klar, welche Konsequenzen die wellenmäßige Ausbreitung von  $\psi(x)$  zusammen mit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $|\psi(x)|^2$  hat. Betrachten wir noch einmal das Experiment 5.6, bei dem nur Spalt 1 geöffnet ist (Abbildung 5.11). Man ordnet diesen Elektronen eine Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  zu, die sich wie eine Wasserwelle halbkreisförmig hinter Spalt 1 ausbreitet (Abbildung 5.15). Die Intensität bzw. Wahrscheinlichkeitsdichte auf dem Schirm ist in Abhängigkeit von  $x$  durch  $P_1(x) = |\psi_1(x)|^2$  gegeben. Sie ist hinter Spalt 1 am größten.



**Abbildung 5.15:** Wellenfunktion beim Doppelspaltexperiment mit einem geöffneten Spalt

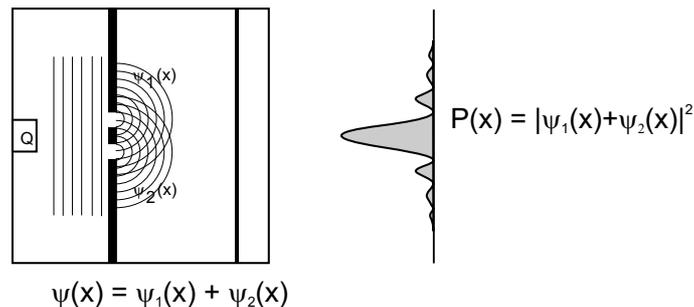
Das Ensemble von Elektronen, auf das sich die Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  bezieht, besteht aus einer Menge von einzelnen Elektronen, die alle dem gleichen Präparationsverfahren unterzogen wurden, indem sie Spalt 1 durchquert haben. Jedes dieser Elektronen wird an einem anderen Ort auf dem Schirm nachgewiesen,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

Wie in Experiment 5.6 kann man nun Spalt 1 verschließen und dafür Spalt 2 öffnen. Die Wellenfunktion  $\psi_2(x)$  ist dann eine Welle, die von Spalt 2 ausgeht. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion ist durch  $P_2(x) = |\psi_2(x)|^2$  gegeben. Nimmt man die beiden Verteilungen der getrennt durchgeführten Experimente zusammen, erhält man die Gesamtverteilung

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

wie in Gleichung (5.10).

Anders sieht die Situation aus, wenn im Doppelspaltexperiment beide Spalte geöffnet sind. Jetzt geht von beiden Spalten eine Welle aus: von Spalt 1 die Wellenfunktion  $\psi_1(x)$ , von Spalt 2 die Wellenfunktion  $\psi_2(x)$  (Abbildung 5.16).



**Abbildung 5.16:** Wellenfunktion beim Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten

Nach der klassischen Wellentheorie *überlagern* sich die beiden Wellen, wie man es z. B. auf der Oberfläche eines Sees beobachten kann, wenn man zwei Steine nicht allzuweit entfernt voneinander ins Wasser wirft. Mathematisch wird dies durch die Addition beider Wellenfunktionen zum Ausdruck gebracht:

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

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

Nun kommt der entscheidende Punkt: Die Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$  erhält man aus der Wellenfunktion (Gleichung (5.14)) durch Quadrieren:  $P(x) = |\psi(x)|^2$ . Setzt man die Wellenfunktion (Gleichung (5.14)) ein, ergibt sich der folgende Ausdruck<sup>5</sup>:

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

In der Wahrscheinlichkeitsfunktion  $P(x)$  taucht zu den beiden Einzelspalt-Verteilungsfunktionen  $|\psi_1(x)|^2 = P_1(x)$  und  $|\psi_2(x)|^2 = P_2(x)$  noch ein *zusätzlicher Term* auf, den man *Interferenzterm* nennt. Er ergibt sich beim Ausmultiplizieren, weil die Wellenfunktion aus einer *Summe* zweier Terme besteht. Er ist deshalb charakteristisch für einen Überlagerungszustand wie in Gleichung (5.14).

Gleichung (5.15) lässt sich auch folgendermaßen schreiben:

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) + 2\psi_1(x)\psi_2(x). \tag{5.16}$$

Man kann so *erklären*, warum man beim Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten eine Verteilung der Elektronen findet, für die

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x), \tag{5.17}$$

gilt (vgl. Gleichung 5.11), man also nicht einfach die beiden Einzelspaltverteilungen  $P_1(x)$  und  $P_2(x)$  addieren kann. Der Vergleich mit Gleichung (5.16) macht es deutlich: Der Interferenzterm, der sich beim Ausmultiplizieren ergeben hat, ist dafür verantwortlich, dass in Gleichung (5.17) kein Gleichheitszeichen steht.

Die Wahrscheinlichkeitsfunktion Gleichung (5.15) beschreibt das beim Doppelspaltexperiment beobachtete Interferenzmuster (Abbildung 5.2 und 5.10). Da wir die explizite mathematische Form der Wellenfunktion an dieser Stelle noch nicht kennen, können wir noch nicht bestätigen, dass die genaue Form der Verteilung tatsächlich korrekt wiedergegeben wird. Wir können aber an der *Struktur* der Gleichung und ihrer Interpretation ablesen, dass das Problem des naiven Welle-Teilchen-Dualismus, das das Verständnis der Quantenphänomene so erschwert, überwunden ist.

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

---

<sup>5</sup>Hier wird angenommen, dass die Wellenfunktion reell ist. Betrachtet man komplexwertige Wellenfunktionen, so lautet der Ausdruck:  $P(x) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1(x)\psi_2^*(x) + \psi_1^*(x)\psi_2(x)$ .



# Kapitel 6

## Eigenschaften von Elektronen und der quantenmechanische Messprozess

### 6.1 Die Eigenschaft „Ort“ im Doppelspaltexperiment

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

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

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

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

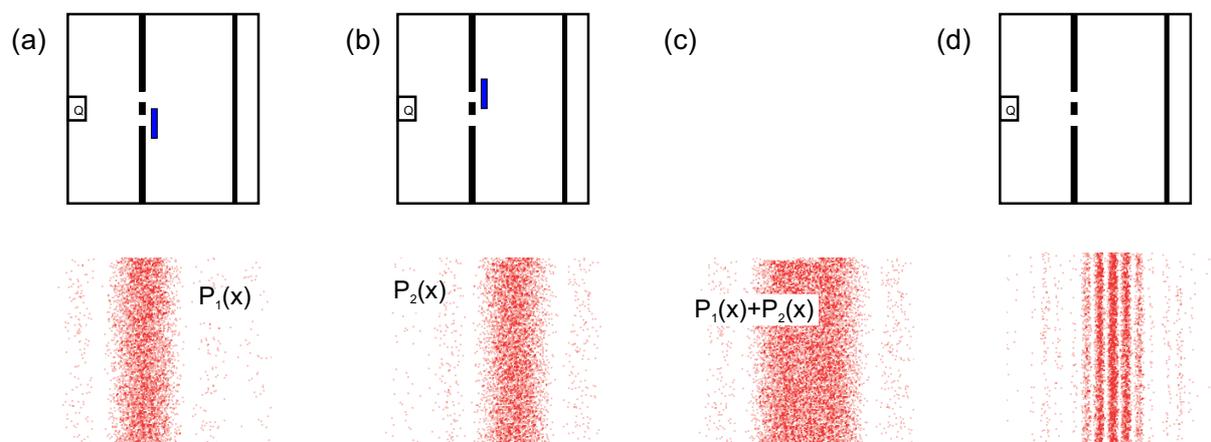
Das Experiment, mit dem dieses „Umsortieren“ erreicht wird, haben wir als Experiment 5.6 schon durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abbildung (6.1) noch einmal dargestellt. Zuerst deckt man Spalt 2 ab, damit alle dort ankommenden Elektronen absorbiert werden und nur die bei

Spalt 1 eintreffenden durchgelassen werden. Auf dem Schirm ergibt sich die in Abbildung (6.1 (a)) gezeigte Verteilung, die mit  $P_1(x)$  bezeichnet wird.

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

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

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



**Abbildung 6.1:** Ortseigenschaft beim Doppelspaltexperiment

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

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

Da die Zuordnung der Elektronen zu einem bestimmten Spalt nicht möglich ist, kann man auch nicht sagen, dass ein bestimmtes Elektron durch einen bestimmten Spalt gegangen ist. In der Quantenmechanik ist es *falsch* zu behaupten, das Elektron habe in der Spaltebene einen bestimmten Ort, den wir nur nicht kennen. Die Eigenschaft „Ort“ kann einem Elektron unter

diesen Umständen nicht zugeschrieben werden. Dies ist ein grundlegender Zug der Quantenmechanik, der auch für andere Quantenobjekte (z. B. Atome) und andere Eigenschaften (z. B. Energie, Impuls) gilt:

**In der Quantenmechanik ist es möglich, dass einem Quantenobjekt für klassische Teilchen klassisch wohldefinierte Eigenschaften *nicht* zugeschrieben werden können. Zum Beispiel befindet sich ein Elektron im Doppelspaltexperiment bei seiner „unbeobachteten“ Ausbreitung im Raum zu keiner Zeit an einem bestimmten Ort, d.h. es besitzt die Eigenschaft „Ort“ nicht.**

## 6.2 Messprozess und Komplementarität

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

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

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

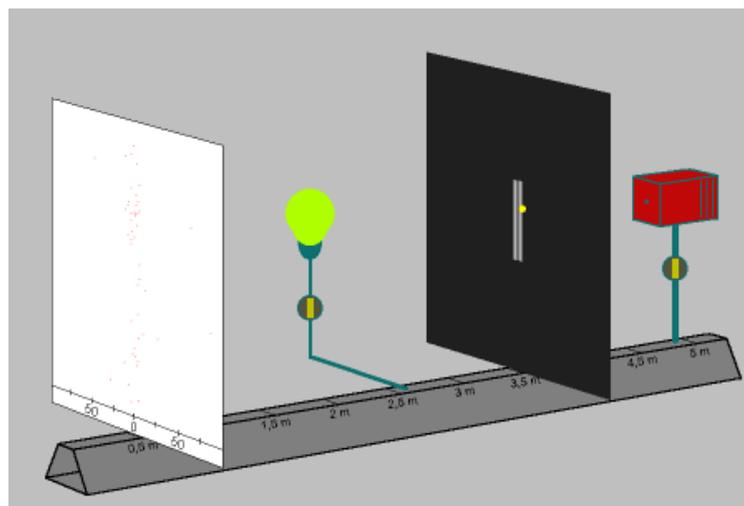


Abbildung 6.2: Ortsmessung der Elektronen durch Lichtstreuung

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

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

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

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

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

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

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

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

## 6.3 Messungen und Eigenschaften

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

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

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

Von den möglichen Messwerten (Spalt 1 oder Spalt 2) ist bei der Messung also genau *einer* ausgewählt worden. Führt man das gleiche Experiment mehrere Male hintereinander durch, wird man im Allgemeinen verschiedene Ergebnisse erhalten. Im vorliegenden Beispiel wird man ein Elektron im Mittel genauso häufig hinter Spalt 1 wie hinter Spalt 2 finden, wenn beide Spalte gleichmäßig bestrahlt werden.

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

$$P(x) \cdot \Delta x = |\psi(x)|^2 \cdot \Delta x \text{ ermitteln.}$$

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

beiden Möglichkeiten realisiert (das Elektron wird entweder hinter Spalt 1 oder hinter Spalt 2 gefunden).

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

**In der Quantenmechanik besteht ein Unterschied zwischen „eine Eigenschaft haben“ und „eine Eigenschaft messen“.**

**Zum Beispiel sind die beiden folgenden Aussagen *nicht* gleichbedeutend:**

- a) Bei einer Messung findet man das Elektron am Ort  $x$ .**
- b) Ein Elektron besitzt die Eigenschaft „Ort  $x$ “.**

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

Ein Ausweg besteht darin, dass man Ortsmessungen an einem ganzen *Ensemble* von identisch präparierten Quantenobjekten durchführt. Hier gibt es zwei Möglichkeiten:

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

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

## 6.4 Zustandsreduktion

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

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

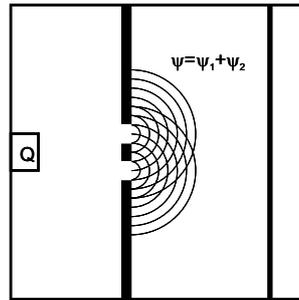
In der Quantenphysik hat eine Messung keinen solch passiven Charakter mehr. Messungen stellen einen nicht zu vernachlässigenden Eingriff in den ungestörten Ablauf des Geschehens dar; sie verändern den Zustand des gemessenen Objekts. Ein Beispiel dafür, das behandelte Doppelspaltexperiment mit Lichtquelle, haben wir schon in Abschnitt 6.2 kennengelernt. Mit ausgeschalteter Lampe ergab sich auf dem Schirm das Interferenzmuster. Führt man dagegen eine Ortsmessung an den Elektronen durch, indem man die Lampe einschaltete, ergab sich kein Interferenzmuster.

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

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

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

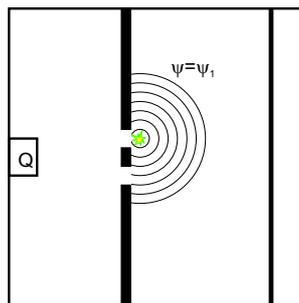
Es ist ein grundlegendes Phänomen, das der Zustandsveränderung bei einer Messung zugrunde liegt. Mit Hilfe der Wellenfunktion lässt es sich auch quantitativ diskutieren. In unserem Beispiel ist die Wellenfunktion des ungestörten Systems (also ohne Lampe)  $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$  (vgl. Gleichung (5.14)). Es handelt sich um einen Überlagerungszustand aus den beiden Wellenfunktionen  $\psi_1(x)$  und  $\psi_2(x)$  (Abbildung 6.3).



**Abbildung 6.3:** Die Wellenfunktion der Elektronen bei ausgeschalteter Lampe ist ein Überlagerungszustand aus  $\psi_1(x)$  und  $\psi_2(x)$ .

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Elektronen auf dem Schirm, ergibt sich – wie schon oben diskutiert – aus  $|\psi(x)|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2$ . Man erhält das Interferenzmuster, welches durch Gleichung (5.15) gegeben ist. Die Wellenfunktion  $\psi(x)$ , die das durch den Doppelspalt präparierte Ensemble von Elektronen beschreibt, enthält die beiden möglichen Messwerte (Spalt 1 oder Spalt 2) gleichermaßen.

Durch die Messung wird eine der beiden Möglichkeiten ausgewählt. Nach der Messung ist nur noch sie in der Wellenfunktion vertreten. Die Elektronen, die man hinter Spalt 1 findet, werden durch die Einzelspalt-Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  beschrieben (Abbildung 6.4).



**Abbildung 6.4:** Nach einer Ortsmessung (Lichtblitz), bei der das gemessene Atom hinter Spalt 1 gefunden wurde, wird es durch die Wellenfunktion  $\psi_1(x)$  beschrieben (Zustandsreduktion).

Ihr Beitrag zur Elektronenverteilung auf dem Schirm entspricht daher gerade der Einzelspalt-Verteilung  $|\psi_1(x)|^2$ . Umgekehrt werden die hinter Spalt 2 gefundenen Elektronen durch  $\psi_2(x)$  beschrieben, mit der zugehörigen Verteilung  $|\psi_2(x)|^2$ . Das Muster, das sich schließlich auf dem Schirm herausbildet ist die Summe  $P(x) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2$  der beiden Einzelspaltverteilungen; es ist durch die Abwesenheit der Interferenzstruktur gekennzeichnet.

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

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

## 6.5 Schrödingers Katze, Messprozess und Dekohärenz

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

Elektronen in einer Elektronenstrahlröhre kann man z. B. durch ein sogenanntes „Wellenpaket“ beschreiben, d. h. durch eine Wellenfunktion mit begrenzter Ausdehnung, die sich wie ein Wellenpuls ausbreitet (Abbildung 6.5).

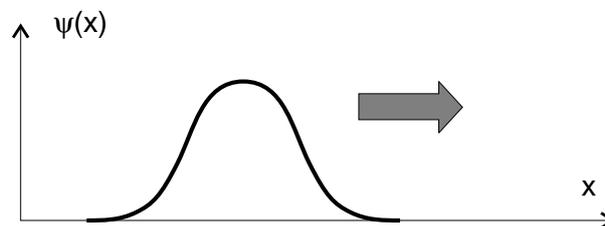


Abbildung 6.5: Wellenfunktion eines Wellenpakets

Schon früh wurde erkannt, dass der „Schwerpunkt“ eines Wellenpakets sich nach den Newtonschen Gesetzen bewegt, wenn das Wellenpaket nicht zu ausgedehnt ist, d. h. wenn die Ausdehnung des Wellenpakets klein ist gegenüber den Abständen, für die sich die potentielle Energie ändert. Ein solches Wellenpaket bewegt sich dann ähnlich einem klassischen Teilchen.

Schrödinger erkannte jedoch, dass das eigentliche Problem beim klassischen Grenzfall in den **Überlagerungszuständen** liegt. Er legte das anhand eines besonders drastischen Beispiels dar, das unter dem Namen „Schrödingers Katze“ Berühmtheit erlangte: In einem Kasten, in dem sich eine Vorrichtung zur Freisetzung eines Giftgases befindet, ist eine Katze eingesperrt (Abbildung 6.6).

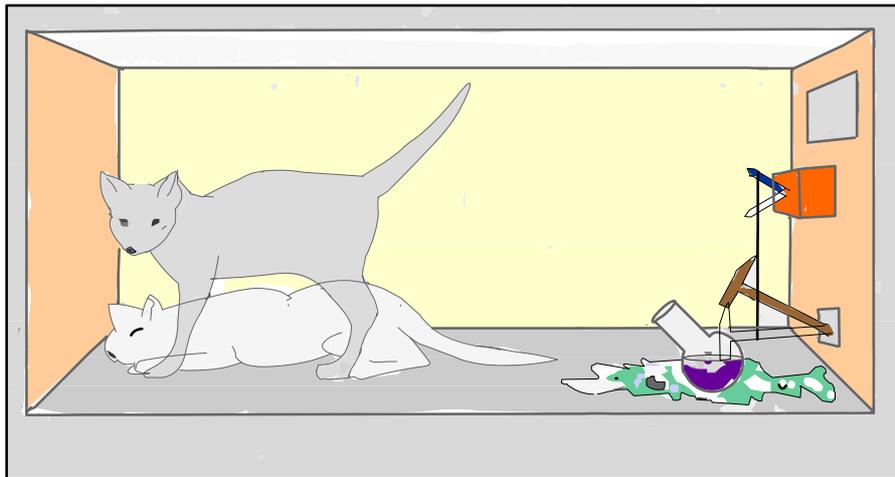


Abbildung 6.6: Schrödingers Katze

Ein Zufallsereignis (radioaktiver Zerfall eines Atoms) bestimmt, ob das Gas freigesetzt wird oder nicht. Die Apparatur soll gerade soviel radioaktive Substanz enthalten, um in einer Stunde mit 50% Wahrscheinlichkeit einen Zerfall herbeizuführen, der nach Auslösung des Mechanismus die Katze vergiftet.

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

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

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

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

Schrödingers Katzenparadoxon weist eine enge Verbindung zur Frage auf, wie eine **quantenmechanische Messung** zu beschreiben ist: Anstelle der Katze kann man sich ein Messgerät denken, das den Zerfall eines Atoms in der radioaktiven Substanz durch das Aufleuchten einer Lampe anzeigen soll. Wie im Fall der Katze schließt man, dass sich das Messgerät nach Ablauf

einer Stunde in einem Überlagerungszustand befindet, in dem die Lampe keine der Eigenschaften „leuchtet“ oder „leuchtet nicht“ besitzt. Die Quantenmechanik sagt also voraus, dass sich nach einer Messung das Messgerät in einem Zustand befindet, in dem es keinen eindeutigen Wert anzeigt. Dies steht im Widerspruch zu allen Erfahrungen mit Messgeräten.

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

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

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

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

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

In jüngster Zeit wird auch der Übergangsbereich zwischen klassischer Physik und Quantenphysik dem Experiment zugänglich. So gelang es 1996 ein Ion in einen Überlagerungszustand aus zwei räumlich um 80 nm getrennten Wellenpaketen zu bringen, deren Ausdehnung jeweils nur 7 nm betrug. Dies stellt eine Überlagerung zweier makroskopisch verschiedener Zustände dar. Die durch die Wechselwirkung mit der Umgebung verursachte Dekohärenz (der Verlust der Interferenzfähigkeit zwischen den beiden Wellenpaketen) konnte in dem Experiment im Detail verfolgt werden.



# Kapitel 7

## Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation

### 7.1 Gleichzeitige Präparation verschiedener Eigenschaften

In der klassischen Mechanik wird die Bewegung von Teilchen durch die Angabe ihrer Bahnkurve beschrieben. Ein Beispiel ist der waagerechte Wurf, bei dem Kugeln einer parabelförmigen Bahn folgen, nachdem sie von einer Abschussvorrichtung abgeschossen wurden (Abbildung 7.1).

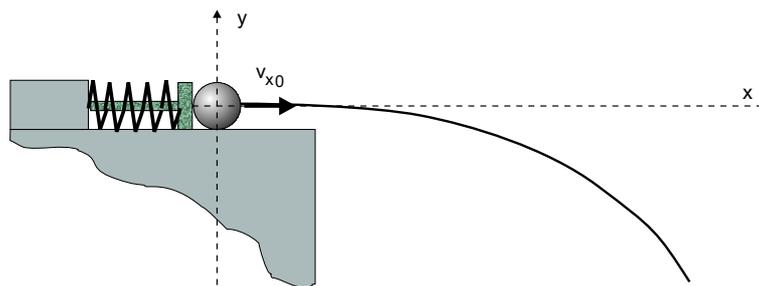


Abbildung 7.1: Präparation und Bahnkurve beim waagerechten Wurf

Die Kugeln bewegen sich immer auf der gleichen Bahn, sofern alle die gleichen Anfangsbedingungen besitzen, d. h. identische Werte des Abschussorts und der Abschussgeschwindigkeit. Man muss also eine Abschussvorrichtung bauen, mit der man Kugeln mit möglichst identischen Anfangswerten  $x_0, y_0, p_{x0}, p_{y0}$  von Ort und Impuls abschießen kann. Zum Herstellen dieser Anfangsbedingungen muss man somit an einem Ensemble von Kugeln die Eigenschaften „Ort“ und „Impuls“ gleichzeitig präparieren.

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

prinzipielle untere Grenze für die gleichzeitige Verkleinerung der Streuungen in den Anfangsbedingungen gibt.

Das Präparieren von Eigenschaften ist auch für Quantenobjekte möglich, wie bereits gezeigt wurde (z. B. Polarisations-eigenschaft bei Photonen). Beim waagerechten Wurf reicht die Präparation einer einzelnen Größe allerdings nicht aus. Zur Herstellung gleicher Anfangsbedingungen für alle Kugeln müssen Ort und Impuls *gleichzeitig* präpariert werden, und zwar sowohl in  $x$ - als auch in  $y$ -Richtung. Dieser Umstand erscheint nicht weiter bemerkenswert. Nach allen Alltagserfahrungen kommt es einem selbstverständlich vor, dass man zwei Eigenschaften gleichzeitig herstellen kann, wenn man jede von ihnen einzeln präparieren kann.

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

## 7.2 Präparation von Ort und Impuls bei Photonen

Um die Unmöglichkeit der gleichzeitigen Präparation von Ort und Impuls zu zeigen, analysieren wir einen konkreten Versuch, beide Eigenschaften zugleich herzustellen. Als Quantenobjekte benutzen wir die Photonen eines monochromatischen Laserstrahls (Abbildung 7.2).

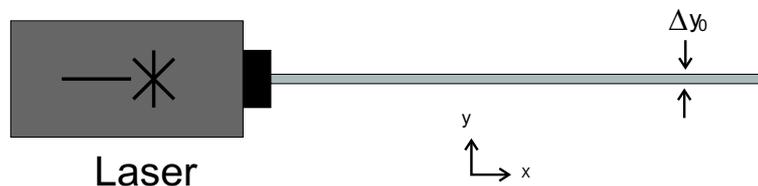


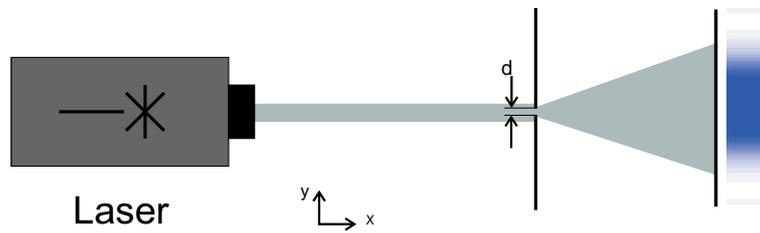
Abbildung 7.2: Strahl eines Lasers

Da der Strahl sehr gut gebündelt ist, ist die Impulskomponente  $p_y$  *senkrecht* zur Strahlrichtung für alle Photonen praktisch gleich Null (zum Begriff des Photonenimpulses vgl. Abschnitt 1.4). Sie besitzen also die Eigenschaft „Impulskomponente  $p_y = 0$ “. Würde man Messungen der Impulskomponente  $p_y$  an sehr vielen Photonen des Laserstrahls durchführen, wäre die Streuung  $\Delta p_y$  der Messwerte um den Wert  $p_y = 0$  verschwindend gering.

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

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

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



**Abbildung 7.3:** Aufweitung des Laserstrahls an einem engen Spalt

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

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

Bedeutet diese Verbesserung der Ortspräparation, dass nun Ort und Impuls gleichzeitig gut präpariert sind? Nein, denn die allmähliche Aufweitung des Strahls hinter dem Spalt zeigt, dass die Photonen nicht mehr gebündelt sind. Bei einer Messung streuen die Impulse der Photonen nun in Querrichtung. Die Photonen haben ihre Eigenschaft „Impulskomponente  $p_y = 0$ “ verloren.

Die Ortsstreuung der Photonen unmittelbar hinter dem Spalt konnte mit dem Spalt zwar verringert werden, aber damit verbunden ist leider auch eine Vergrößerung der Impulsstreuung. Ort und Impuls konnten nicht gleichzeitig präpariert werden. Dies gilt nicht nur für Photonen am Spalt, sondern es handelt sich um ein allgemeines Prinzip der Quantenmechanik:

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

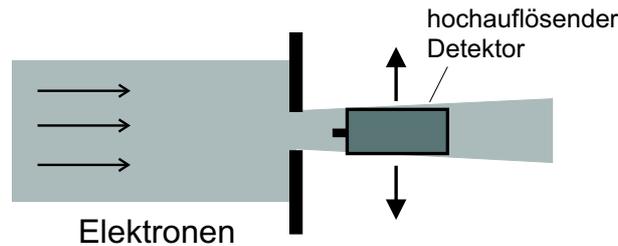
## 7.3 Ein Maß für die „Güte“ einer Präparation

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

Erinnern wir uns: Ist ein Ensemble von Quantenobjekten auf eine bestimmte Eigenschaft präpariert und führt man eine Testmessung dieser Eigenschaft durch, wird bei *jeder* Messung derselbe Wert gefunden. Die Streuung der Messwerte ist dann Null. Allerdings wird es in einem

realen Experiment kaum möglich sein, die Streuung der Messwerte exakt auf den Wert Null zu bringen. Die Präparation ist dann nicht perfekt, aber doch so gut, dass man die betreffende Eigenschaft „nahezu“ präpariert hat. Um dieses „nahezu“ quantitativ zu fassen, betrachten wir den Versuch, mit einem Spalt die Eigenschaft „Ort  $y$ “ (senkrecht zur Strahlrichtung) an einem Elektronenstrahl zu präparieren.

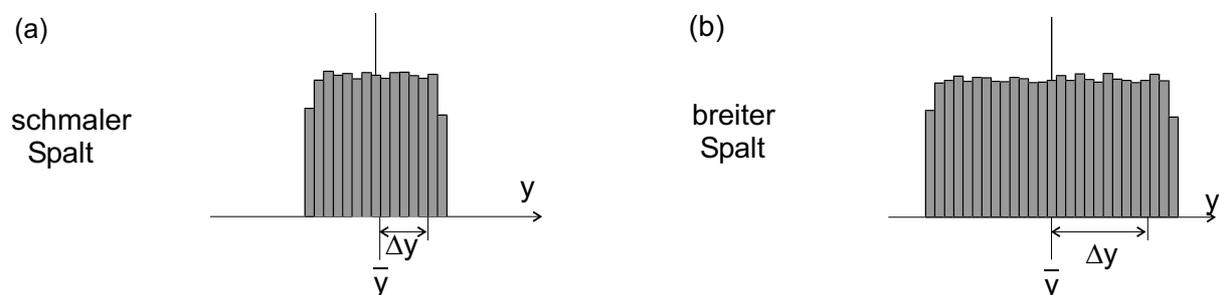
**Experiment 7.2 (Gedankenexperiment):** Ein Strahl von Elektronen fällt auf einen Spalt der Breite  $d$ . Unmittelbar hinter dem Spalt steht ein hochauflösender Detektor, der die Elektronen mit einer weit höheren Auflösung als der Spaltbreite nachweisen kann. Er registriert die Zahl der Elektronen die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



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

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

Die Verteilung der Ortsmesswerte im Fall eines schmalen Spaltes sieht wie in Abbildung 7.5 (a) aus. Die Elektronen sind gleichmäßig hinter dem Spalt verteilt. Die Standardabweichung der Ortsmesswerte ist von der Größenordnung der Spaltbreite. Wenn der Spalt relativ schmal ist, ist auch die Streuung recht klein. Bei einem breiteren Spalt weisen die Ortsmesswerte eine größere Streuung auf (Abbildung 7.5 (b)).



**Abbildung 7.5:** Verteilung der Ortsmesswerte bei verschiedenen Spalten

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

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

## 7.4 Messverfahren und Eigenschaften

Den Zusammenhang zwischen der Streuung von Messwerten und einer Eigenschaft, die ein Objekt besitzt, kann man sich anhand einer Analogie aus der klassischen Physik noch einmal plausibel machen. Wir stellen uns zwei verschiedene Sorten von Metallplatten vor, nämlich runde und quadratische (Abbildung 7.6).

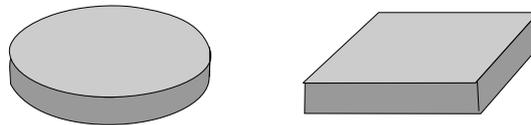


Abbildung 7.6: Runde und quadratische Platten

Die runden Platten besitzen die Eigenschaft „Durchmesser“. Den quadratischen Platten kann man eine solche Eigenschaft nicht zuschreiben, die Frage nach ihrem Durchmesser ist sinnlos.

Was passiert, wenn man trotzdem versucht, an den quadratischen Platten einen Durchmesser zu messen? Oder anders formuliert, was ist das Ergebnis, wenn man versucht, eine Eigenschaft zu messen, die dem betreffenden Objekt gar nicht zukommt? Um die Frage zu beantworten, muss man sich ein Messverfahren für die Eigenschaft „Durchmesser“ ausdenken. Man könnte z. B. ein Maßband nehmen und unter verschiedenen Winkeln den Abstand von Kante zu Kante messen (Abbildung 7.7), wobei das Maßband immer durch den Mittelpunkt gehen muss.

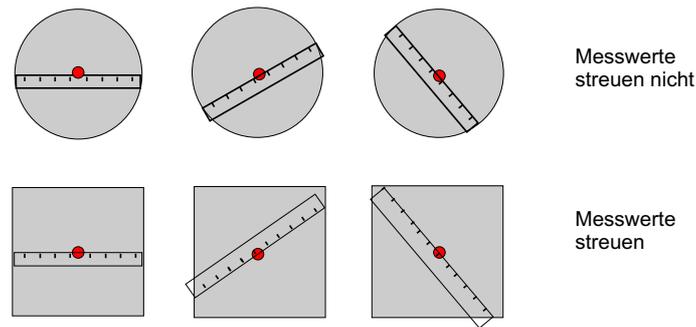


Abbildung 7.7: Messverfahren für die Eigenschaft „Durchmesser“

Für die runden Platten erhält man immer denselben Messwert. Sie besitzen die Eigenschaft „Durchmesser“. Für die quadratischen Platten streuen die Messwerte. Dies zeigt, dass diese Platten die gemessene Eigenschaft nicht besitzen.

Umgekehrt kann man nach der Eigenschaft „Seitenlänge“ fragen, die den quadratischen Platten zukommt. Diese Frage ist für die runden Platten sinnlos, weil man ihnen keine Seitenlänge zuschreiben kann. Wiederum schlägt sich dies in den Ergebnissen von Messungen nieder, die man mit einem geeigneten Messverfahren durchführen kann. Die Eigenschaft „Seitenlänge“ könnte man z. B. folgendermaßen messen: Die Platten werden gegen eine Wand gedrückt und senkrecht zur Wand wird das Lineal angelegt. Im Unterschied zu der früheren Messung bezüglich der Eigenschaft „Durchmesser“ führt man die Messung an mehreren Stellen durch (Abbildung 7.8).

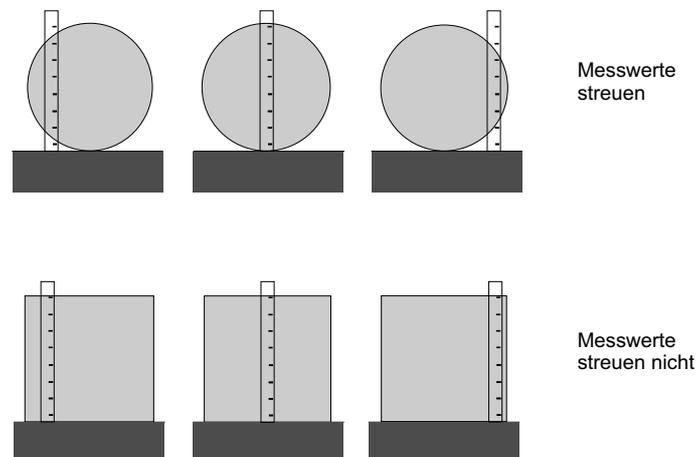


Abbildung 7.8: Messverfahren für die Eigenschaft „Seitenlänge“

Bei diesem Messverfahren streuen die Messwerte für die runden Platten, während man bei den quadratischen Platten immer denselben Messwert erhält, der die Seitenlänge der Platten angibt.

Dies zeigt, dass es schon bei makroskopischen Objekten Beispiele gibt, bei denen man mit der Zuordnung einer Eigenschaft vorsichtig sein muss. Bei Quantenobjekten muss man sich bei jeder Eigenschaft vergewissern, ob die Zuordnung sinnvoll ist. Dies wird im Allgemeinen nur durch ein erfolgreiches Präparationsverfahren sichergestellt.

Auch bei Photonen können wir nicht in allen Fällen zwei Eigenschaften gleichzeitig präparieren. So können wir keine Photonen herstellen, die gleichzeitig die Eigenschaften „waagrecht polarisiert“ und „senkrecht polarisiert“ besitzen. Dies kann man folgendermaßen einsehen: Wir präparieren zunächst Photonen mit Hilfe eines waagrecht orientierten Polarisationsfilters auf die Eigenschaft „waagrecht polarisiert“. In einem zweiten Schritt versuchen wir sie auf die Eigenschaft „senkrecht polarisiert“ zu präparieren, indem wir sie durch ein senkrecht orientiertes Polarisationsfilter schicken.

Das entsprechende Experiment kann als Realexperiment oder mit Hilfe der Computersimulation „Polfilter“ durchgeführt werden.

**Experiment 7.3 (Realexperiment oder Computersimulation):** Schicken Sie Licht durch ein waagrecht orientiertes Polarisationsfilter. Die Photonen hinter dem Filter sind nun auf die Eigenschaft „waagrecht polarisiert“ präpariert (Abbildung 7.9). Der Test (vollständiger Durchgang durch ein zweites, waagrechtes Polarisationsfilter) bestätigt dies.

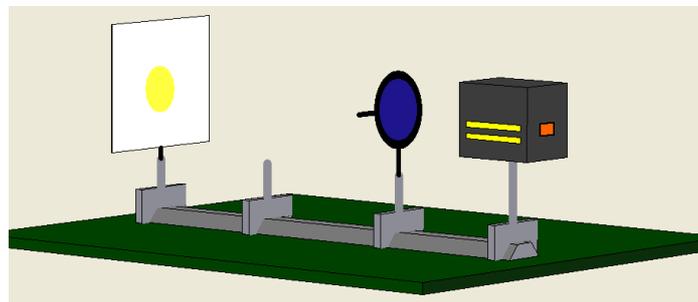


Abbildung 7.9: Waagrechte Polarisation

Nun versuchen wir diese Photonen zusätzlich auf die Eigenschaft „senkrecht polarisiert“ zu präparieren. Zu diesem Zweck schicken wir die Photonen, die wir bereits auf die Eigenschaft „waagrecht polarisiert“ präpariert haben, durch eine Apparatur, die Photonen auf die Eigenschaft „senkrecht polarisiert“ präpariert. Das ist z.B. ein zweites senkrecht orientiertes Polarisationsfilter (Abbildung 7.10).

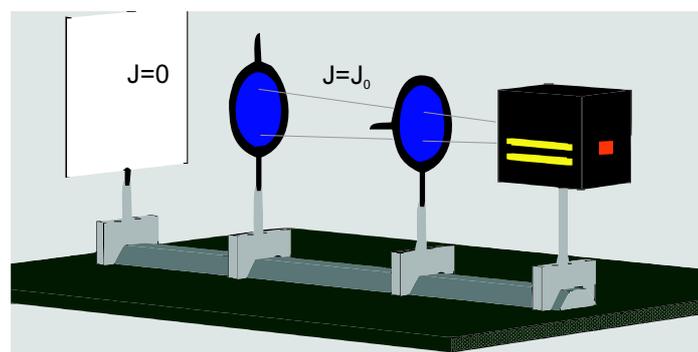


Abbildung 7.10: Waagrechte und senkrechte Polarisation

Zu beobachten ist, dass kein einziges Photon durch das zweite Filter hindurchgeht und damit kein einziges der Photonen mit der Eigenschaft „waagrecht polarisiert“ gleichzeitig auf die Eigenschaft „senkrecht polarisiert“ präparierbar ist. Die beiden Eigenschaften sind also nicht gleichzeitig präparierbar, es sind *einander ausschließende Eigenschaften*.

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

Nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation kann man an einem Ensemble von Quantenobjekten Ort und Impuls nicht gleichzeitig perfekt präparieren. Nachdem wir in Abschnitt 7.3 ein Maß für die Güte einer Präparation gefunden haben, können wir fragen, *in welchem Ausmaß* Orts- und Impulspräparation unvereinbar sind. Das bedeutet: Wenn man eine experimentelle Anordnung betrachtet, bei der Ort und Impuls nur näherungsweise präpariert werden – gibt es dann eine Grenze, wie nahe man dem Ideal einer perfekten Präparation kommen kann?

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

**Experiment 7.4 (Computersimulation):** Starten Sie das Doppelspalt-Simulationsprogramm und wählen Sie Elektronen der Energie  $E = 50$  keV. Aktivieren Sie am Schirm die Einstellung „theoretische Verteilung“. Klicken Sie nun auf die Blende und schließen einen der beiden Spalte. Sie können nun die Elektronenbeugung am Einzelspalt untersuchen. Variieren Sie die Spaltbreite zwischen 700 nm und 200 nm. Wie beim analogen Experiment mit Photonen (Abschnitt 7.2) wird der Strahl hinter dem Spalt aufgeweitet. Je schmaler der Spalt wird, desto breiter wird das Beugungsmuster (Abbildung 7.11).

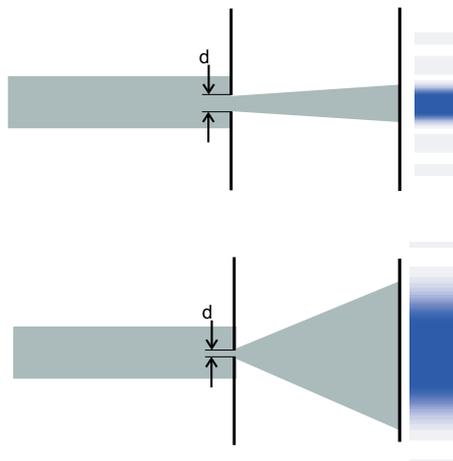


Abbildung 7.11: Elektronen am Einzelspalt

Die Güte der Orts- bzw. Impulspräparation wird durch die Streuung der Messwerte einer entsprechenden Testmessung beschrieben. An dem Ensemble von Elektronen, das durch den Spalt präpariert wird, nimmt man also – genau wie in Abschnitt 7.3 – die Verteilung der Ortsmesswerte unmittelbar hinter dem Spalt auf. Dann ersetzt man den hochauflösenden Ortsdetektor durch ein Impulsmessgerät und ermittelt damit die Verteilung der Impulsmesswerte. Beide Verteilungen werden in ein Diagramm übertragen und ihre Standardabweichungen ermittelt. So erhält man die Ortsstreuung  $\Delta y$  und die Impulsstreuung  $\Delta p_y$ .

Die Ergebnisse sind in den Abbildungen (7.12) und (7.13) gezeigt: Für einen breiten Spalt ergibt sich eine relativ große Ortsstreuung, aber eine kleine Impulsstreuung (Abbildung 7.12).

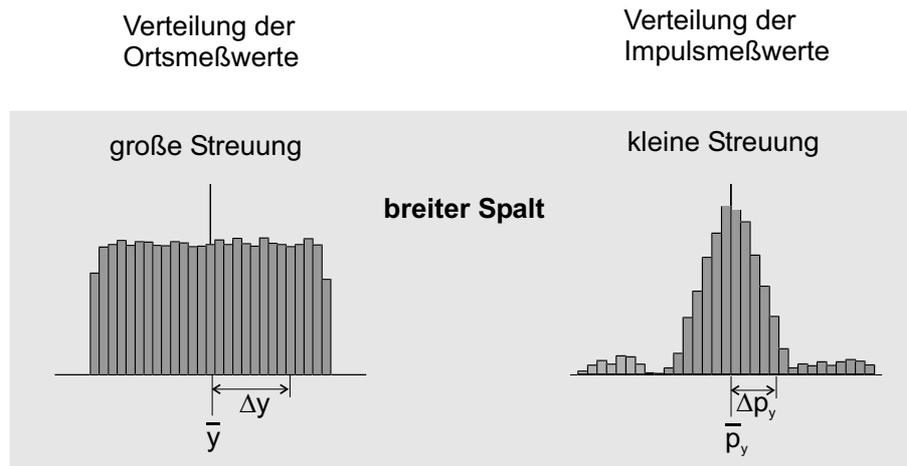


Abbildung 7.12: Verteilung der Orts- und Impulsmesswerte für einen breiten Einzelspalt

Dagegen ist bei einem schmalen Spalt die Ortsstreuung klein, aber die Impulsstreuung groß (Abbildung 7.13).

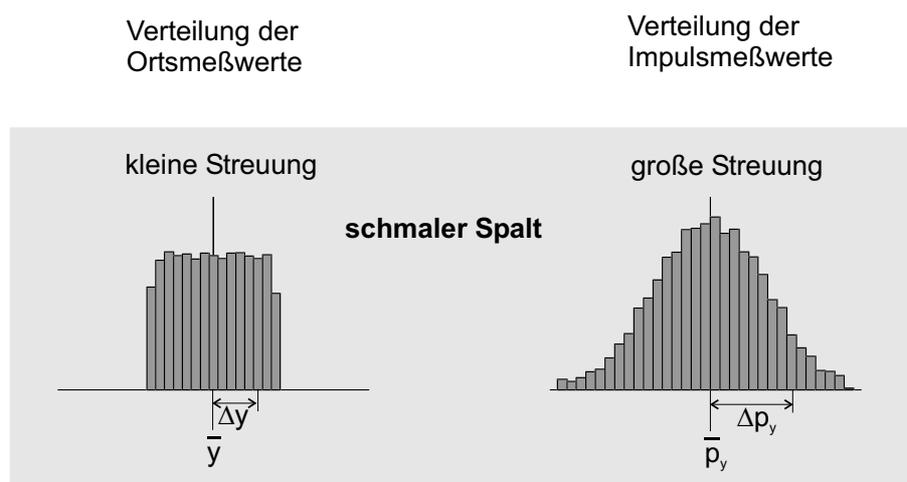


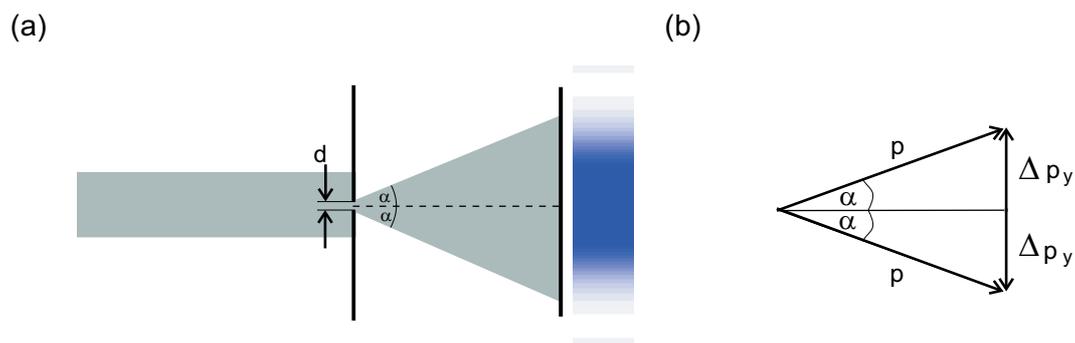
Abbildung 7.13: Verteilung der Orts- und Impulsmesswerte für einen schmalen Einzelspalt

Die beiden Streuungen scheinen im vorliegenden Beispiel reziprok miteinander verknüpft zu sein: Die Streuung der Impulsmesswerte nimmt zu, wenn die Streuung der Ortsmesswerte abnimmt und umgekehrt.

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

Durch die Beugung am Spalt verliert der Elektronenstrahl seine ursprüngliche Impulseigenschaft. Hinter dem Spalt misst man die in Abbildungen (7.12) und (7.13) gezeigten statistischen Streuungen der Querimpulse  $p_y$ . Auf dem Weg vom Spalt zum Schirm weitet sich der Strahl daher auf und bildet das beobachtete Beugungsmuster aus. Je größer die Streuung der Querimpulse ist, desto breiter wird das Beugungsbild auf dem Schirm ausfallen. Daher kann man mit der Breite des Beugungsmusters auf dem Schirm die Streuung der Impulsmesswerte am Spalt abschätzen.

Der Großteil der Elektronen wird auf dem Schirm innerhalb des Hauptmaximums der Beugungsfigur registriert, also innerhalb des Winkelbereichs zwischen  $+\alpha$  und  $-\alpha$  (Abbildung 7.14 (a)).



**Abbildung 7.14:** Abschätzung der Impulsstreuung  $\Delta p$ .

Zur Abschätzung der Streuung der Querimpulse  $\Delta p_y$  kann man sich daher auf diesen Bereich beschränken. Aus Abbildung (7.14 (b)) liest man den folgenden Zusammenhang ab:

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

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

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

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

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

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

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

Multipliziert man beide Seiten mit  $p$  und schätzt die Streuung der Ortsmesswerte  $\Delta y$  durch die Spaltbreite  $d$  ab, wird diese Gleichung zu:

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

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

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

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

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

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

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

## 7.6 Unbestimmtheitsrelation und Bahnbegriff

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

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

In einer Elektronenstrahlröhre wird der Elektronenstrahl an der Anode auf eine Breite von  $\Delta y \approx d = 0,1 \text{ mm}$  abgeblendet (Abbildung 7.15).

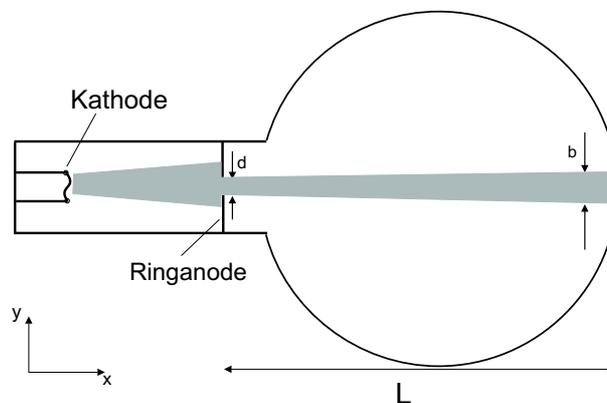


Abbildung 7.15: „Bahn“ der Elektronen in einer Elektronenstrahlröhre

Die Streuung der Impulse in  $y$ -Richtung (also in Querrichtung) ist daher mindestens

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

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

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

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

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

---

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



# Kapitel 8

## Der Weg zur Schrödinger-Gleichung

### 8.1 Mathematische Beschreibung von Quantenobjekten

Die allgemeinen Ziele der Physik lassen sich in zwei Kategorien einteilen:

Zum einen möchte man Einsicht in die grundlegenden Wirkungszusammenhänge der Naturphänomene gewinnen. Dies ermöglicht ein **qualitatives Verständnis** der betrachteten physikalischen Phänomene. Ein Beispiel dafür ist die Erkenntnis, dass die gleiche Grundkraft, die Gravitation, für das Herabfallen eines losgelassenen Steins wie auch für die Bewegung des Mondes um die Erde verantwortlich ist.

Bei der zweiten Kategorie handelt es sich um die **quantitative Beschreibung** der physikalischen Phänomene. Die Newtonsche Gleichung erlaubt es, die Bahnkurve für den geworfenen Stein und die Mondbewegung abzuleiten und aus den Anfangsbedingungen detaillierte Voraussagen über das zukünftige Verhalten der Objekte zu treffen.

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

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

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

Die Möglichkeit, Quantenobjekte mathematisch zu erfassen, obwohl ihr Verhalten anschaulich nicht verständlich erscheint, haben wir uns schon einmal zunutze gemacht: Beim Doppelspaltexperiment (Abschnitt 5.5) wurden die Elektronen durch die **Wellenfunktion**  $\psi(x, t)$  beschrieben. Sie ist eine Funktion des Ortes und der Zeit, die sich wellenmäßig ausbreitet. Beim Doppelspaltexperiment konnte das Auftreten von Interferenzerscheinungen dadurch verstanden werden, dass sich die von den beiden Spalten ausgehenden Wellen überlagern, ganz ähnlich wie es bei Wasserwellen der Fall ist. Auf der anderen Seite wurde der teilchenhafte Nachweis der Elektronen auf dem Schirm durch die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion erklärt:  $P(x) \cdot \Delta x = |\psi(x, t)|^2 \cdot \Delta x$  beschreibt die **Wahrscheinlichkeit**, ein Elektron zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  auf dem Schirm nachzuweisen. Der scheinbare Widerspruch von Wellen- und Teilchencharakter der Elektronen konnte durch die theoretische Beschreibung vollkommen aufgeklärt werden.

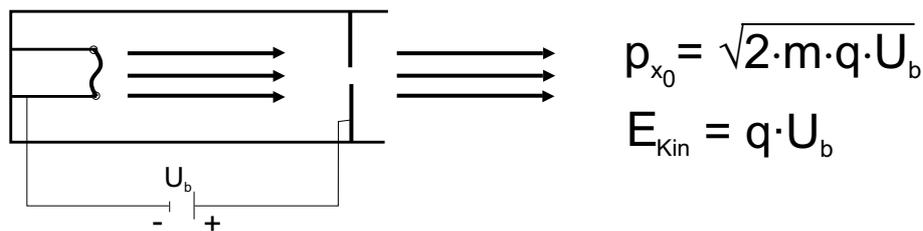
Mit der Wellenfunktion haben wir eines der zentralen Elemente zur mathematischen Erfassung von Quantenobjekten kennengelernt. Die Wellenfunktion beinhaltet die vollständige Information, die nach der Quantenmechanik über ein Quantenobjekt zu erlangen ist. Wie man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Quantenobjekt aus der Wellenfunktion berechnet, ist schon bekannt. In den folgenden Abschnitten wird sich zeigen, wie man aus ihr Aufschluss über andere physikalische Größen gewinnt und wie man sie in einfachen Fällen im Rahmen der Quantenmechanik bestimmen kann. Dabei werden wir uns auf Beispiele beschränken, die mit reelwertigen Funktionen beschrieben werden können.

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

## 8.2 Präparation von Elektronen auf bestimmten Impuls und kinetische Energie

Eine Möglichkeit, Elektronen in einen Zustand mit bestimmtem Impuls bzw. kinetischer Energie zu bringen, bietet das folgende Verfahren:

**Experiment 8.1:** Eine Kathodenstrahlröhre wird ohne angelegte Anodenspannung betrieben. Um die Kathode erscheint ein bläuliches Glimmen. Zwischen Kathode und Anode fließt kein Strom. Nach Anlegen der Beschleunigungsspannung  $U_b$  zwischen Kathode und Anode (das elektrische Feld zeigt in x-Richtung) sieht man einen geradlinigen Elektronenstrahl. Es fließt ein elektrischer Strom.



**Abbildung 8.1:** Präparation der Eigenschaften „Impuls“ und „kinetische Energie“ durch eine Beschleunigungsspannung

Die Elektronen werden durch die anliegende Spannung  $U_b$  beschleunigt (Abbildung 8.1). Der erste Teil des Versuchs zeigt, dass die Elektronen ohne die anliegende Beschleunigungsspannung keine nennenswerte kinetische Energie besitzen. Nach dem Durchlaufen der Beschleunigungsstrecke besitzen die Elektronen die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = q \cdot U_b$ . Innerhalb geringer Fehlergrenzen haben alle Elektronen, die diese Präparationsvorrichtung durchlaufen, denselben Impuls bzw. dieselbe kinetische Energie. Sie bilden daher ein Ensemble von Elektronen, das auf einen bestimmten Impuls bzw. kinetische Energie präpariert ist. Jedes einzelne Elektron, das zu diesem Ensemble gehört, besitzt die **Eigenschaft** „Impuls  $p_{x_0} = \sqrt{2 \cdot m \cdot q \cdot U}$ “ und „kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = q \cdot U$ “.

## 8.3 Wellenfunktion eines freien Elektrons

Mit dem obigen Präparationsverfahren können wir ein Ensemble von Elektronen mit bestimmtem Impuls präparieren. Wie kann man diese Elektronen mathematisch beschreiben? Wie sieht die Wellenfunktion aus, die ihnen zugeordnet ist? Die Wellenfunktion ist von der Gestalt:

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

wobei  $A$  und  $B$  Konstanten sind. Der von  $t$  abhängige Term gibt die Zeitabhängigkeit der Welle an einem bestimmten Ort wieder.

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

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

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

Mit der Abkürzung  $\hbar = h/2\pi$  erhalten wir<sup>1</sup>:

**Die Wellenfunktion, die einem auf einen bestimmten Impuls  $p_{x_0}$  präparierten Ensemble von Quantenobjekten zugeordnet ist, lautet:**

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

**Für eine bestimmte kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  ergibt sich entsprechend:**

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right) \quad (8.4)$$

## 8.4 Operatoren für physikalische Größen

Im vorausgegangenen Abschnitt wurde untersucht, wie Quantenobjekte mathematisch zu beschreiben sind. Die Vorgehensweise orientierte sich dabei an dem in Experimenten üblichen Verfahren: Um mit Quantenobjekten zu Experimentieren, muss man sie erst in den gewünschten Zustand bringen, d. h. eine *Präparation* durchführen. In unserem Fall wurden Elektronen mit einer Beschleunigungsspannung so präpariert, dass sie die Eigenschaft „bestimmten Impuls“ bzw. „bestimmte kinetische Energie“ besitzen.

Diesem experimentellen „Herstellen“ eines bestimmten Zustands durch Präparation entspricht auf der theoretischen Seite die Angabe einer **Wellenfunktion**. Dies ist in Abbildung (8.2) symbolisiert.

<sup>1</sup>Anmerkung:  $\psi_{p_x}$  beschreibt nur dann tatsächlich ein Ensemble von Elektronen, die auf Impuls präpariert sind, wenn  $B = i \cdot A$  ist, mit  $i$  der sogenannten imaginären Einheit.  $\psi_{p_x}$  ist dann keine reelwertige, sondern eine komplexe Funktion.

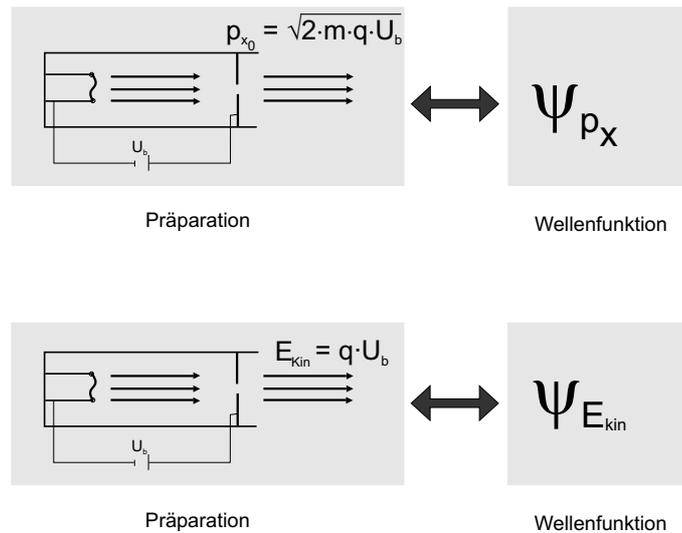


Abbildung 8.2: Präparation und Wellenfunktion

Mit der Wellenfunktion kann man ein durch Präparation hergestelltes Ensemble von Quantenobjekten **charakterisieren**. Den Elektronen, die mit einer Beschleunigungsspannung in einen Zustand mit der Eigenschaft „bestimmter Impuls  $p_{x_0}$ “<sup>2</sup> bzw. „bestimmte kinetische Energie  $E_{kin}$ “ gebracht wurden, ist zur Beschreibung die Wellenfunktion  $\psi_{p_x}$  bzw.  $\psi_{E_{kin}}$  (Gleichungen (8.3) und (8.4)) zugeordnet.

Umgekehrt kann man die folgende experimentelle Situation betrachten: Man hat ein auf kinetische Energie präpariertes Ensemble von Elektronen vorliegen und möchte den Wert der kinetischen Energie erschließen. Im Experiment geschieht dies durch eine **Messung**. Die Elektronen treffen auf ein Messgerät, dieses zeigt nach der Messung den Wert der kinetischen Energie an (Abbildung 8.3 (a)).

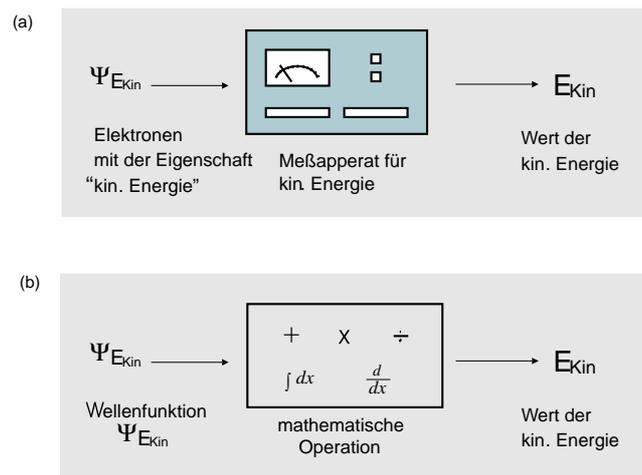


Abbildung 8.3: Analogie zwischen Messung und Anwendung eines Operators

<sup>2</sup>Der Einfachheit halber steht im Folgenden  $p_x$  für  $p_{x_0}$ .

Gleichermaßen sollte man auch aus der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ermitteln können, welchen Wert der kinetischen Energie das zugehörige Ensemble besitzt. Es sollte also möglich sein, wie in Abbildung (8.3 (b)) dargestellt, mit Hilfe einer mathematischen Operation aus der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  den Wert von  $E_{\text{kin}}$  zu erhalten. Dies leisten in der Quantenmechanik die **Operatoren**.

### Mathematischer Einschub: Operatoren

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

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

$$\hat{A}\psi \quad \text{steht für} \quad c \cdot \psi. \quad (8.5)$$

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

$$\hat{C}\psi(x) \quad \text{steht für} \quad \psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}. \quad (8.6)$$

Man kann auch kurz schreiben

$$\hat{C} = \frac{d}{dx} \quad (8.7)$$

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

## 8.5 Der Operator der kinetischen Energie

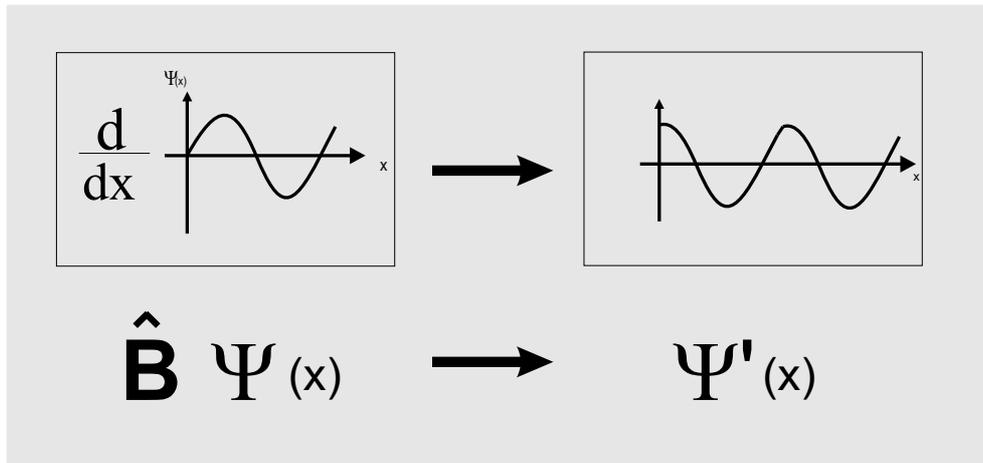
Mit dem Konzept des Operators ist es möglich, die eingangs gestellte Frage zu bearbeiten: Wie kann man aus der Wellenfunktion für auf kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  präparierte Elektronen

$$\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T}\right) \quad (8.8)$$

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

Direktes Auflösen von Gleichung (8.8) nach  $E_{\text{kin}}$  funktioniert nicht und der Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  muss den Wert des Impulses auf andere Weise liefern. Die folgende Überlegung kann uns weiterhelfen: Zunächst halten wir fest, dass die Anwendung eines Operators auf eine Wellenfunktion

wieder eine Wellenfunktion ergibt. Zum Beispiel ergibt die Anwendung des Operators  $\hat{B} = \frac{d}{dx}$  auf die Funktion  $\psi(x) = A \sin(x)$  eine neue Funktion  $A \cos(x)$ . Dies ist in Abbildung (8.4) symbolisiert.



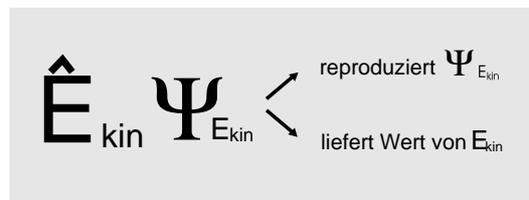
**Abbildung 8.4:** Veranschaulichung der Wirkung eines Operators am Beispiel der Differentiation

Von welcher Gestalt könnte die Wellenfunktion sein, die sich durch Anwenden des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ergibt? Die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  repräsentiert ein Ensemble von Elektronen, das die Eigenschaft „kinetische Energie“ *besitzt*. Die plausibelste Annahme ist, dass der Operator  $\hat{E}_{\text{kin}}$  diese Wellenfunktion weitgehend unverändert lässt (Als Analogie denke man an den Newtonschen Prismenversuch in Kapitel 2 zurück (Abbildung 2.3): Das mit Prisma und Blende auf die Eigenschaft „Wellenlänge“ präparierte Licht wurde in einem zweiten Prisma nicht weiter aufgefächert; es blieb unverändert.). Da die Wellenfunktion (8.8) nur bis auf konstante Faktoren festgelegt ist, ist dies dann der Fall, wenn  $\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{E_{\text{kin}}}$  sich von  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  höchstens um einen konstanten Vorfaktor unterscheidet, also *proportional* zu  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  ist:

$$\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{E_{\text{kin}}} \sim \psi_{E_{\text{kin}}}. \quad (8.9)$$

Wir stellen also an den Operator der kinetischen Energie zwei Forderungen (Abbildung 8.5):

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



**Abbildung 8.5:** Wirkung des Operators  $\hat{E}_{\text{kin}}$  auf die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$ .

Eine mathematische Operation, welche die Sinus- und Kosinusfunktionen in der Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}$  reproduziert, ist die *Ableitung*. Die Differentiation von  $\sin(x)$  führt zu  $\cos(x)$ , die nochmalige Ableitung wieder zurück zu  $-\sin(x)$ . Analoges gilt für  $\cos(x)$ .

Nach einmaliger Ableitung von  $\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t)$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) &= \frac{d}{dx} \left[ A \cdot \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) + B \cdot \cos \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right] \\ &= \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \left[ A \cdot \cos \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) - B \cdot \sin \left( \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \right]. \end{aligned}$$

Da durch das einmalige Differenzieren die Wellenfunktion  $\psi_{E_{\text{kin}}}(x, t)$  noch nicht bis auf konstante Faktoren reproduziert ist, ist erneutes Ableiten nötig:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{E_{\text{kin}}}(x, t) = \frac{-2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}}(x, t). \quad (8.10)$$

Damit ist die erste der beiden Forderungen erfüllt. Multiplizieren wir beide Seiten der Gleichung (8.10) mit  $-\hbar^2/(2m)$ , ergibt sich:

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

Der Operator, der auf der linken Seite dieser Gleichung auf die Wellenfunktion wirkt, erfüllt beide Forderungen, die wir an den Operator der kinetischen Energie gestellt haben.

**Der Operator der kinetischen Energie ist**

$$\hat{E}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}. \quad (8.12)$$

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

$$\hat{E}_{\text{kin}} \psi_{E_{\text{kin}}} = E_{\text{kin}} \cdot \psi_{E_{\text{kin}}} \quad (8.13)$$

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

## 8.6 Eigenwertgleichung

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

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

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

$$\psi_{\text{Gauß}}(x) \sim e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (8.14)$$

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

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

$$\hat{E}_{\text{kin}}\psi_{\text{Gauß}}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{(x-x_0)^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2} \right) e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (8.15)$$

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

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

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

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

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

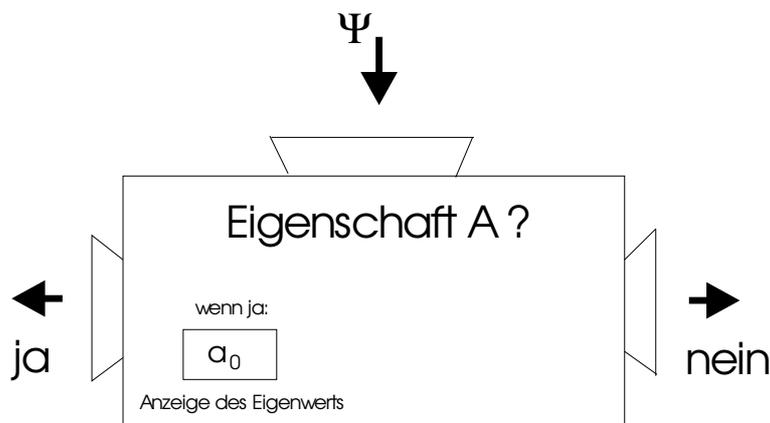
▷ **Wenn die Wellenfunktion die Eigenwertgleichung**

$$\hat{E}_{\text{kin}} \psi(x) = E_{\text{kin}} \cdot \psi(x) \quad (8.16)$$

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

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

Natürlich gilt dies nicht nur für die Eigenschaft „kinetische Energie“, sondern auch für alle anderen dynamischen Eigenschaften (z. B. Impuls). Zu jeder dynamischen Eigenschaft  $A$  gehört ein Operator  $\hat{A}$ . Man kann entscheiden, ob Quantenobjekte, die durch eine Wellenfunktion  $\psi$  beschrieben werden, die Eigenschaft  $A$  besitzen, indem man die zugehörige Eigenwertgleichung  $\hat{A}\psi = a_0\psi$  betrachtet. Man kann die Eigenwertgleichung anschaulich als eine Art „Maschine“ auffassen (Abbildung 8.6).



**Abbildung 8.6:** Eigenwertgleichung als Maschine

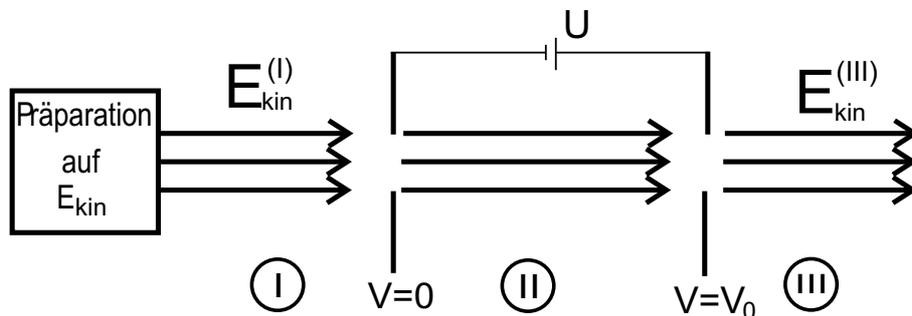
Wenn man eine Wellenfunktion  $\psi$  in die Maschine „füttert“, zeigt sie an, ob Quantenobjekte im Zustand  $\psi$  die Eigenschaft  $A$  besitzen oder nicht. Dazu wird getestet, ob  $\hat{A}\psi$  proportional zu  $\psi$  ist. Lautet die Antwort „ja“, zeigt die Maschine zusätzlich den Wert von  $A$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

## 8.7 Operator der Gesamtenergie

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

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

Um auf die Gesamtenergie zu kommen, reicht es nicht mehr aus, wie bisher freie Elektronen zu betrachten. Wir müssen Elektronen in einem **Potential** untersuchen. Dazu betrachten wir einen möglichst einfachen Fall: Elektronen bewegen sich in einem konstanten Potential und werden auf einer kurzen Strecke beschleunigt. Anschließend ist das Potential wieder konstant (Abbildung 8.7).



**Abbildung 8.7:** Auf kinetische Energie präparierte Elektronen durchlaufen nochmals eine Beschleunigungsspannung

**Experiment 9.1 (Gedankenexperiment):** Wir betrachten Elektronen, die auf feste kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^{(I)}$  präpariert worden sind (indem sie z. B. eine Beschleunigungsspannung durchlaufen haben, vgl. Abschnitt 8.2). In der Region I in Abbildung (8.7) besitzen sie diese Eigenschaft. Der Elektronenstrahl durchläuft nun eine *weitere* Beschleunigungsspannung  $U$  (Region II in Abbildung (8.7)), so dass die Elektronen anschließend in Region III eine andere kinetische Energie  $E_{\text{kin}}^{(III)}$  besitzen.

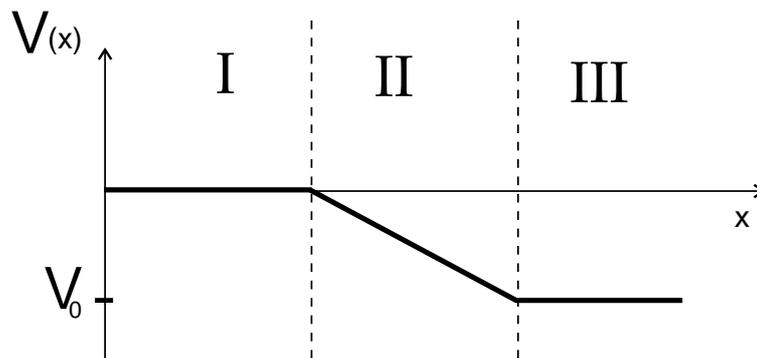


Abbildung 8.8: Potentialverlauf in den Regionen I – III.

Der Potentialverlauf ist in Abbildung (8.8) dargestellt. In den Regionen I und III hat das Potential einen konstanten Wert, denn es wirkt keine Beschleunigungsspannung. Insgesamt gilt:

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

Mit Hilfe dieser Beziehungen können wir uns die Wellenfunktion von Quantenobjekten in einem konstanten Potential (also in der Region III) erschließen. Wir nutzen dazu aus, dass die Elektronen sowohl in der Region I als auch in der Region III die Eigenschaft „bestimmte kinetische Energie“ besitzen. Die Wellenfunktion für Elektronen mit dieser Eigenschaft ist nach Gleichung (8.4) bekannt. In Region III gilt demnach:

$$\psi^{(III)}(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}^{(III)}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(III)}}\right) + B \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}^{(III)}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(III)}}\right). \quad (8.17)$$

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

$$E_{\text{ges}} = \underbrace{E_{\text{kin}}^{(I)} + 0}_{\text{Gesamtenergie in der Region I; } V(x)=0} = \underbrace{E_{\text{kin}}^{(III)} + V_0}_{\text{Gesamtenergie in der Region III}} \quad (8.18)$$

gilt. Für die kinetische Energie in Region III ergibt sich somit:

$$E_{\text{kin}}^{(III)} = E_{\text{ges}} - V_0. \quad (8.19)$$

Setzt man dies in die Wellenfunktion  $\psi^{(III)}(x, t)$  ein, so erhält man als Ergebnis für die **Wellenfunktion für ein Ensemble von Elektronen im konstanten Potential  $V_0$** :

$$\psi^{(III)}(x, t) = A \cdot \sin \left( \frac{\sqrt{2m(E_{\text{kin}} - V_0)}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) + B \cdot \cos \left( \frac{\sqrt{2m(E_{\text{kin}} - V_0)}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T} \right) \quad (8.20)$$

Mit diesem Resultat können wir zur nächsten Frage kommen: Was ist der **Operator der Gesamtenergie**? Gesucht ist ein Operator, der bei Anwendung auf die Wellenfunktion (8.20) den Wert der Gesamtenergie liefert. Er soll die Gleichung

$$\hat{E}_{\text{ges}} \psi^{(III)} = E_{\text{ges}} \cdot \psi^{(III)} \quad (8.21)$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi^{(III)} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi^{(III)}. \quad (8.22)$$

Multiplikation mit  $\frac{\hbar^2}{2m}$  liefert:

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

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

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

Wir können an diesem Resultat durch Vergleich mit Gleichung (8.21) den Operator der Gesamtenergie ablesen. Es ist der in eckigen Klammern stehende Ausdruck. In unserem Beispiel handelte es sich um ein räumlich konstantes Potential:  $V(x) = V_0 = \text{const}$  für  $x$  in der Region III. Das Ergebnis gilt aber auch für allgemeinere Potentiale, wenn man  $V_0$  durch  $V(x)$  ersetzt.

**Der Operator der Gesamtenergie ist**

$$\hat{E}_{\text{ges}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (8.25)$$

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

## 8.8 Die Grundgleichung der Quantenmechanik

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

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

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

$$\hat{E}_{\text{ges}} \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (8.26)$$

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x). \quad (8.27)$$

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

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

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

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

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

Bisher haben wir Eigenwertgleichungen als eine „Maschine“ benutzt, um nachzuprüfen, ob eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  die entsprechende Eigenschaft besitzt (vgl. Abbildung 8.6). Statt sich nun verschiedene Wellenfunktionen auszudenken und eine nach der anderen durchzuprobieren, kann man versuchen, die Schrödinger-Gleichung *direkt* zu lösen, um diejenigen Wellenfunktionen zu finden, die Ensembles mit der Eigenschaft „Gesamtenergie“ beschreiben. Dabei geht man folgendermaßen vor:

### 1. Analyse der physikalischen Situation

Der erste Schritt besteht darin, das Potential  $V(x)$  zu finden, das auf die betrachteten Quantenobjekte einwirkt. Als Beispiel betrachten wir das **Wasserstoffatom**: Hier bindet ein lokalisierter Kern genau ein Elektron durch die Coulomb-Kraft an sich. Das Potential, in dem sich das Elektron befindet, ist also das Coulomb-Potential (Abbildung 8.9):

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (8.29)$$

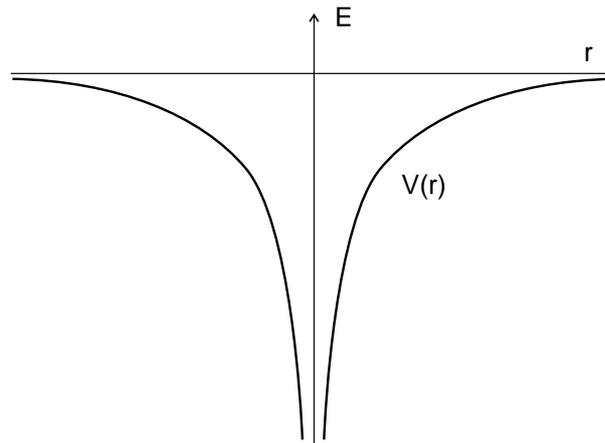


Abbildung 8.9: Coulomb-Potential

### 2. Einsetzen des Potentials in die Schrödinger-Gleichung

Das Potential wird nun in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Man erhält eine Gleichung, die  $\psi(x)$  erfüllen muss, damit es die Eigenschaft „Gesamtenergie“ besitzt.

### 3. Lösen der Schrödinger-Gleichung

In der Schrödinger-Gleichung  $\hat{E}_{\text{ges}} \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x)$  ist nur der Operator  $\hat{E}_{\text{ges}}$  vorgegeben. Die Wellenfunktion  $\psi(x)$  und auch der Eigenwert  $E_{\text{ges}}$  sind zunächst noch unbekannt. Sie müssen durch *Lösung der Eigenwertgleichung* aufgefunden werden (vgl. Abbildung 8.10).

Eigenfunktion (gesucht)

$$\hat{E}_{\text{ges}} \Psi_{E_{\text{ges}}} = E_{\text{ges}} \cdot \Psi_{E_{\text{ges}}}$$

Operator der Gesamtenergie (bekannt)      Eigenwert gesucht

The diagram shows the Schrödinger equation  $\hat{E}_{\text{ges}} \Psi_{E_{\text{ges}}} = E_{\text{ges}} \cdot \Psi_{E_{\text{ges}}}$  enclosed in a grey box. Above the box, the text 'Eigenfunktion (gesucht)' has two arrows pointing to the wave function  $\Psi_{E_{\text{ges}}}$  on both sides of the equation. Below the box, an arrow points from the text 'Operator der Gesamtenergie (bekannt)' to the operator  $\hat{E}_{\text{ges}}$ , and another arrow points from 'Eigenwert gesucht' to the energy value  $E_{\text{ges}}$ .

**Abbildung 8.10:** Vorgehensweise beim Lösen der Schrödinger-Gleichung

Da der Operator der Gesamtenergie die Anweisung zur Differentiation nach  $x$  enthält, handelt es sich bei der Schrödinger-Gleichung um eine **Differentialgleichung**, d. h. um eine Gleichung, in der neben  $\psi(x)$  noch die Ableitungen  $\psi''(x)$  (und ggf.  $\psi'(x)$ ) vorkommen. Das Lösen einer solchen Gleichung ist oft nicht einfach. Daher muss man sich oft auf vereinfachte Modelle beschränken oder zu Näherungsverfahren greifen.

Das Lösen der Schrödinger-Gleichung für den hier betrachteten Fall des Wasserstoffatoms (d. h. ein Elektron im Coulomb-Potential) ist mit unseren mathematischen Methoden nicht zu bewältigen. Wir müssen uns daher auf einfachere Systeme beschränken, zu Näherungsverfahren greifen oder numerische Methoden benutzen. Im folgenden Abschnitt wird mit dem unendlich hohen Potentialtopf ein System betrachtet, für das wir die Schrödinger-Gleichung lösen können. Das Wasserstoff-Atom wird in Abschnitt 13 behandelt, wo wir ein Näherungsverfahren benutzen.

# Kapitel 10

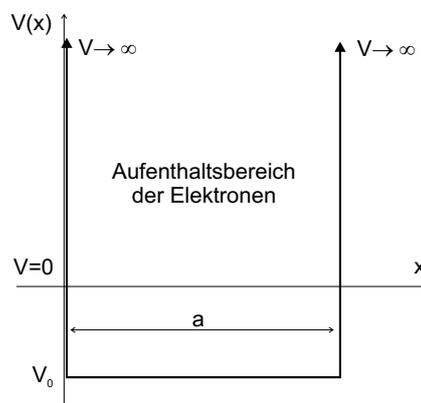
## Potentiale

### 10.1 Elektronen im Potentialtopf

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

Quantenobjekte zeigen eine Reihe von neuen, verblüffenden Effekten, wenn sie in einen beschränkten Raumbereich „eingesperrt“ werden. Dazu gehört die **Quantisierung der Energie**. Um dieses Phänomen zu verstehen, soll zuerst ein einfaches Modell für gebundene Elektronen betrachtet werden. Danach können wir dann zu komplizierteren und realistischeren Systemen übergehen.

Als Prototyp für gebundene Systeme, an dem alle wesentlichen Züge schon klar erkennbar sind, betrachten wir Elektronen, die in einem **Potentialtopf** gebunden sind; so bezeichnet man den in Abbildung (10.1) gezeigten Potentialverlauf.



**Abbildung 10.1:** Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Ein Elektron ist in einen Raumbereich der Breite  $a$  eingesperrt, aus dem es nicht entkommen kann: Die „Wände“ des Potentialtopfs bilden eine undurchdringliche Barriere; das Potential geht dort gegen Unendlich. Im Innern des Potentialtopfs (d. h. für  $0 \leq x \leq a$ ) sollen dagegen auf die Elektronen keine Kräfte einwirken. Das Potential besitzt hier einen konstanten Wert  $V_0$ .

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

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x), \quad (10.1)$$

oder nach Umformung:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \psi(x). \quad (10.2)$$

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

$$\psi(x) = A \cdot \sin(Bx) \quad (10.3)$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -B^2 \psi(x). \quad (10.4)$$

Das Einsetzen in Gleichung (10.2) führt auf die folgende Bestimmungsgleichung für  $B$ :

$$-B^2 \cdot \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \cdot \psi(x). \quad (10.5)$$

Diese Gleichung ist dann erfüllt, wenn gilt:

$$-B^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0) \quad (10.6)$$

oder

$$B = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{ges}} - V_0)}. \quad (10.7)$$

Das Ergebnis dieser Rechnung ist also die Funktion

$$\psi(x) = A \cdot \sin \left( \frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} x \right), \quad (10.8)$$

die die Differentialgleichung (10.1) erfüllt. Eine analoge Rechnung zeigt, dass die Kosinusfunktion

$$\psi(x) = A \cdot \cos \left( \frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} x \right) \quad (10.9)$$

ebenfalls eine Lösung ist.

Die Differentialgleichung (10.1) bezieht sich nur auf das Innere des Potentialtopfs. Damit  $\psi(x)$  wirklich eine Lösung der Schrödingergleichung darstellt, müssen die Potentialwände bei  $x = 0$  und  $x = a$  berücksichtigt werden. Sie garantieren, dass ein Elektron nicht in den Außenraum eindringen kann. Die Wahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2 \cdot \Delta V$ , ein Elektron dort zu finden, ist Null. Als zusätzliche Bedingung an die Wellenfunktion ist also zu stellen, dass sie im Außenraum des Potentialtopfs und an seinen Wänden zu Null wird. Insbesondere gilt somit als **Randbedingung**:

$$\psi(x = 0) = 0 \quad \text{sowie} \quad \psi(x = a) = 0. \quad (10.10)$$

Diese Randbedingungen sind die gleichen wie bei einer bei  $x = 0$  und  $x = a$  eingespannten Saite. Im Fall der Saite bildeten sich **stehende Wellen** aus. Nur bestimmte Wellenlängen sind zulässig, denn nur sie „passen“ in das Intervall der Länge  $a$ . Etwas Analoges gilt für die Wellenfunktion  $\psi(x)$ . Die Randbedingungen (10.10) stellen eine zusätzliche Forderung an die Wellenfunktionen (10.8) und (10.9) dar, die nur *bestimmte Energiewerte* der Elektronen im Potentialtopf zulassen.

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

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

$$\frac{\sqrt{2m(E_{\text{ges}} - V_0)}}{\hbar} a = n \cdot \pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (10.11)$$

oder aufgelöst nach  $E$ :

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (10.12)$$

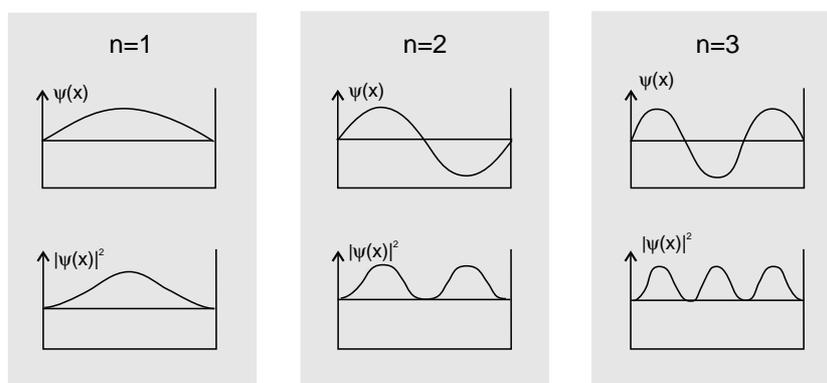
Die Energie der Elektronen im Potentialtopf kann nur die durch diese Gleichung zugelassenen Werte annehmen. Dies ist ein ganz zentrales Ergebnis der Quantenmechanik, welches allgemeine Gültigkeit besitzt: **Gebundene Elektronen können nur bestimmte Werte der Energie annehmen.** Im Fall des Potentialtopfs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

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

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 + V_0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (10.13)$$

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

Die Wellenfunktionen für die Zustände mit  $n = 1, 2, 3$  sind in Abbildung (10.2) oben dargestellt. Die Analogie mit den stehenden Wellen bei der eingespannten Saite ist offensichtlich. Unten in der Abbildung sind die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten  $|\psi(x)|^2$  aufgetragen.



**Abbildung 10.2:** Wellenfunktionen (oben) und Wahrscheinlichkeitsdichten (unten) für die ersten drei Zustände im Potentialtopf

Als Letztes muss die bisher noch unbestimmte Konstante  $A$  in der Wellenfunktion (10.8) festgelegt werden. Berücksichtigt man die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von  $|\psi(x)|^2$ , muss man die Forderung stellen, dass man bei einer Messung das Elektron mit Sicherheit *irgendwo* im Potentialtopf finden muss. Integriert man die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(x)|^2$  über die gesamte Breite des Potentialtopfs, muss sich daher die Wahrscheinlichkeit 1 ergeben:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (10.14)$$

Die Wellenfunktion wird somit „normiert“.

**Auswertung des Integrals:** Um das Integral zu berechnen, vereinfachen wir zuerst das Argument der Wellenfunktion (10.8) mit Hilfe von Gleichung (10.11). Die Wellenfunktion wird damit

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (10.15)$$

Wir haben also

$$\int_0^a A^2 \cdot \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right) dx \quad (10.16)$$

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

$$A^2 \left[ \frac{1}{2} x - \frac{a}{4\pi n} \sin \frac{2\pi n x}{a} \right]_{x=0}^a. \quad (10.17)$$

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

$$A^2 \cdot \frac{1}{2} a. \quad (10.18)$$

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

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (10.19)$$

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

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

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{n\pi}{a} x \right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (10.20)$$



# Kapitel 12

## Atome

### 12.1 Was sind Atome?

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

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

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

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

## 12.2 Linienspektren

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

**Experiment 10.1:** Untersuchen Sie mit einem Taschenspektroskop zuerst das auf einer weißen Wand reflektierte Tageslicht. Sie sehen eine kontinuierliche Verteilung aller Spektralfarben. Beobachten Sie anschließend das Licht verschiedener Leuchtstoffröhren und einer Quecksilberdampfampe. Hier werden sie einzelne Linien bestimmter Farben finden. Man nennt ein solches Spektrum ein **diskretes** oder **Linienspektrum**.

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

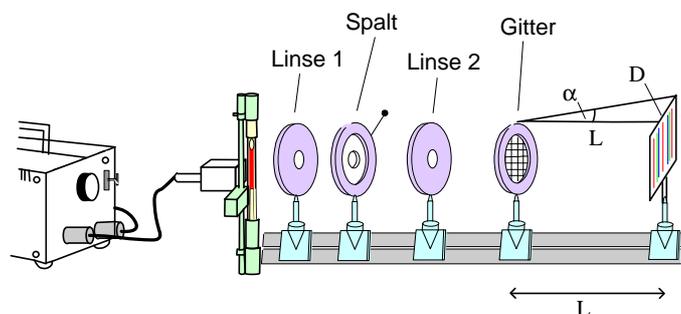


Abbildung 12.1: Aufbau zur Vermessung des Wasserstoffspektrums

**Experiment 10.2:** Eine Balmer-Lampe sendet das Licht von atomarem Wasserstoff aus. Die Lichtquelle wird nach Abbildung (12.1) mit Linse 1 scharf auf einen Spalt abgebildet. Dann wird durch Verschieben der Linse 2 ein scharfes Spaltbild auf dem Schirm erzeugt. Zwischen Linse 2 und dem Schirm wird ein Rowland-Gitter mit der Gitterkonstanten  $g$  eingefügt. Die Spektrallinien des Wasserstoffs werden auf dem Schirm sichtbar (Abbildung 12.2).



Abbildung 12.2: Linienspektrum des Wasserstoffs

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

Nicht alle Spektrallinien liegen im sichtbaren Bereich. Mit speziellen Detektoren lassen sich auch im ultravioletten und infraroten Bereich Linien nachweisen. Man stellt fest, dass man viele Spektrallinien in Gruppen zusammenfassen kann, die man **Serien** nennt. Die Linien einer Serie rücken zum kurzwelligen Ende des Spektrums immer dichter zusammen (in Abbildung 12.2 auf der rechten Seite).

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

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

$$f = f_{\text{Ry}} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (12.1)$$

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

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

**$m = 2$ : die in Abbildung (12.2) abgebildete Balmer-Serie, teilweise im Sichtbaren,**

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

**$m = 4$ : Brackett-Serie im Infraroten.**

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

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

## 12.3 Das Bohrsche Atommodell

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



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

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

Die den Kern umkreisenden Elektronen erinnern an die Planeten, die um die Sonne laufen. Statt der Gravitationskraft übernimmt die Coulomb-Kraft die Rolle der Zentripetalkraft. Doch abgesehen von dieser relativ konventionellen Vorstellung enthält das Bohrsche Atommodell auch schon revolutionäre Züge, die mit der klassischen Mechanik auf keinen Fall vereinbar erscheinen.

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

**Der Drehimpuls  $L = m \cdot v \cdot r$  ist ein Vielfaches von  $\hbar$ . Damit ist auch die Energie in Atomen *quantisiert*. Die Elektronen im Atom können nur in Zuständen mit ganz bestimmten Werten ihrer Energie existieren (den sogenannten *stationären Zuständen*).**

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

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

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

$$h \cdot f = E_n - E_m. \quad (12.2)$$

Die Linienspektren kommen also in Bohrs Modell dadurch zustande, dass das Atom nur ganz bestimmte Energiewerte annehmen kann. Das Licht, das bei den Übergängen zwischen den verschiedenen stationären Zuständen emittiert wird, spiegelt die quantisierte Struktur der Energieniveaus im Atom wider. Mit den Resultaten, die er über die Lage der Energieniveaus beim Wasserstoff machte, konnte Bohr die Balmer-Formel reproduzieren. Dies war die große Leistung des Bohrschen Modells: Erstmals konnte man ein Linienspektrum mit einem physikalischen Modell quantitativ beschreiben (wir werden das Wasserstoff-Spektrum in Kapitel 13 aus einem echt quantenmechanischen Modell herleiten).

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

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

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

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

## 12.4 Abschied vom Bohrschen Atommodell

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

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

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

$$\Delta p \geq \frac{h}{4\pi \Delta x}. \quad (12.3)$$

In Abschnitt 7.3 wurde  $\Delta p$  als Standardabweichung der statistischen Verteilung von Impulsmesswerten definiert:

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2. \quad (12.4)$$

Es muss  $\langle p \rangle = 0$  gelten, denn sonst würde eine mittlere Bewegung der Elektronen relativ zu den (ruhenden) Atomkernen feststellbar sein. Es gilt also  $\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2$  und somit

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m}. \quad (12.5)$$

Setzen wir nun die Ungleichung (12.3) für die Impulsstreuung ein, erhalten wir als Mindestwert der mittleren kinetischen Energie der Elektronen:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle \geq \frac{h^2}{32\pi^2 m (\Delta x)^2}. \quad (12.6)$$

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

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle \geq \frac{(6,6 \cdot 10^{-34})^2 (\text{Js})^2}{32\pi^2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg} \cdot 10^{-22} \text{m}^2} = 95 \text{ eV}. \quad (12.7)$$

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

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

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

**Experiment 10.3 (Franck-Hertz-Versuch):** Eine evakuierte Dreielektrodenröhre (Abbildung 12.3) enthält einen Tropfen Quecksilber.

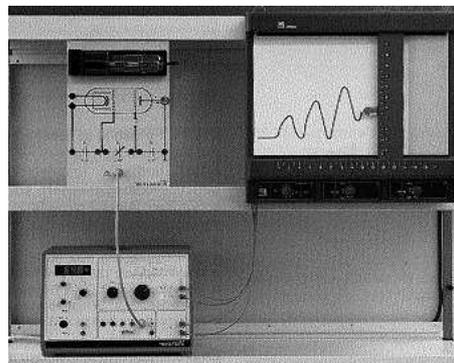
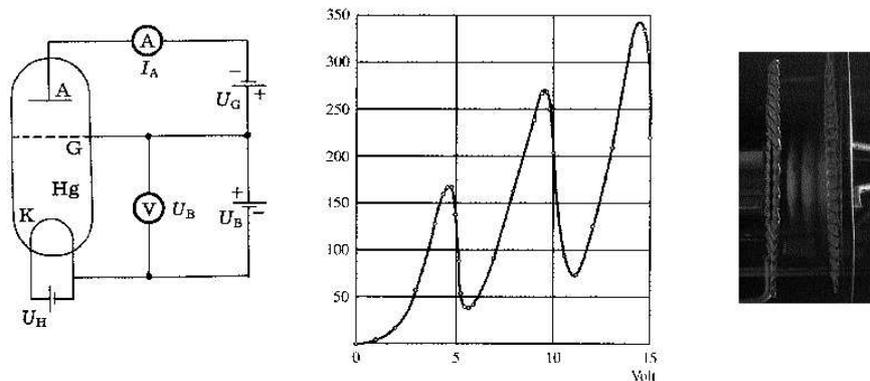


Abbildung 12.3: Franck-Hertz-Versuch

Zur Erzeugung eines bestimmten Quecksilberdampfdrucks (etwa 0,02 bar) wird die Röhre in einem elektrischen Ofen erhitzt. Die von der Glühkathode ausgehenden Elektronen werden zwischen der Kathode und dem Gitter durch eine Spannung  $U_B$  beschleunigt (Abbildung 12.4 (a)). Die kinetische Energie, die sie unmittelbar vor dem Gitter erreichen, ist

$$\frac{1}{2}mv^2 = e \cdot U_B. \quad (12.8)$$

Diese Energie befähigt die Elektronen, gegen eine zwischen Gitter und Anode anliegende Bremsspannung  $U_G$  (etwa 1,5 V) anzulaufen. Die Elektronen, die an der Anode ankommen, werden mit Hilfe eines Messverstärkers als Anodenstrom  $I_A$  nachgewiesen. Die Stromstärke wird mit einem  $x$ - $y$ -Schreiber gegen die Beschleunigungsspannung  $U_B$  aufgetragen. Man erhält die in Abbildung (12.4 (b)) aufgetragene Kurve. Die Maxima der Kurve liegen um jeweils  $\Delta U_B = 4,9$  V voneinander entfernt.



**Abbildung 12.4:** (a) Verschaltung der Franck-Hertz-Röhre, (b) Versuchsergebnis, (c) Leuchtschichten bei einer Neon-Röhre

Steigert man die Beschleunigungsspannung, so wächst nach (12.8) die kinetische Energie der Elektronen. Es wäre daher zu erwarten, dass bei wachsender Beschleunigungsspannung der Anodenstrom immer weiter ansteigt. Zunächst passiert das auch. Die Quecksilbergas-Atome werden zwar von Elektronen „bombardiert“, können aber keine Energie von ihnen aufnehmen. Ist die Beschleunigungsspannung jedoch so groß, dass die Elektronen kurz vor dem Gitter eine kinetische Energie von 4,9 eV erreichen, passiert etwas anderes: Nun sind die Atome bei einem Zusammenstoß mit einem Elektron in der Lage, Energie von diesem aufzunehmen. Die Atome werden *angeregt*. Die Elektronen, die ihre Energie bei dem Stoß abgegeben haben, haben nun nicht mehr genügend Energie, um die Gegenspannung zwischen Gitter und Anode durchlaufen zu können. Der Anodenstrom sinkt auf ein Minimum ab (Abbildung 12.4 (b)).

Steigert man die Beschleunigungsspannung weiter, steigt der Anodenstrom zunächst wieder an, um bei  $\Delta U_B = 9,8$  V auf ein zweites Minimum abzusinken. Die Elektronen haben nun schon nach der Hälfte des Weges ein Quecksilberatom angeregt. Nach der Kollision werden sie erneut beschleunigt und können kurz vor dem Gitter ein *zweites* Quecksilberatom anregen. Abbildung (12.4 (c)) gibt ein visuelles Bild der aufeinanderfolgenden Beschleunigungs- und Anregungsprozesse: Nach jeder Anregung strahlen die Atome die Anregungsenergie in Form von Licht wieder ab, so dass man Leuchtschichten in Bereichen der Röhre sieht, wo die Atome angeregt werden. In den Bereichen dazwischen werden die Atome nicht angeregt.

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

## 12.6 Dreidimensionaler Potentialtopf und Orbitale

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

In unserer kurzen Einführung in die theoretische Beschreibung von Quantenobjekten, die im letzten Kapitel gegeben wurde, ergaben sich jedoch quantisierte Energien auf ganz natürliche Weise: Bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung für den unendlich hohen Potentialtopf erhielten wir ohne weitere Annahmen das Ergebnis, dass Elektronen in einem Potentialtopf nur ganz bestimmte Werte der Energie annehmen können (Gleichung (10.13)). In der Quantenmechanik muss die Energiequantisierung also nicht postuliert werden; sie ergibt sich aus der Theorie.

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

Die beiden Systeme weisen demnach strukturelle Ähnlichkeiten auf. In einer ersten Näherung können wir den unendlich hohen Potentialtopf daher als „Modell-Atom“ betrachten und an ihm diskutieren, wie sich eingesperrte Elektronen verhalten (eine genauere Behandlung des Wasserstoff-Atoms wird im folgenden Abschnitt gegeben). In Kapitel 10 des Lehrtextes wurde der Potentialtopf nur in einer Dimension behandelt. Um Atome im dreidimensionalen Raum zu modellieren, betrachten wir einen dreidimensionalen Potentialwürfel, bei dem das Potential im Inneren eines Würfels der Kantenlänge  $a$  den Wert  $V_0$  hat, während es ausserhalb unendlich groß wird (Abbildung 12.5).<sup>1</sup>

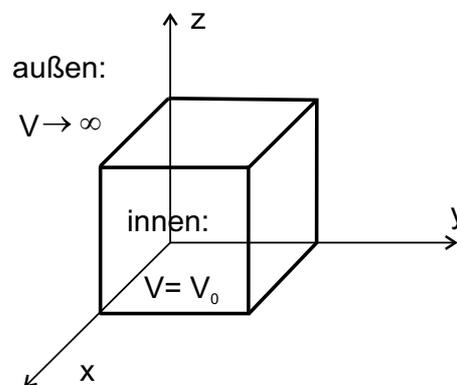


Abbildung 12.5: Dreidimensionaler Potentialwürfel

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

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x) \quad (12.9)$$

lautet (vgl. (8.28)). Statt die Argumente, die zu dieser Gleichung führten, für drei Raumdimensionen zu wiederholen, versuchen wir, mit einer einfachen Überlegung die richtige Gleichung zu erraten. Elektronen in drei Raumdimensionen werden durch eine Wellenfunktion  $\psi(x, y, z)$  beschrieben, die von den drei Koordinaten  $x$ ,  $y$  und  $z$  abhängt. Alle drei Koordinaten sollten gleichberechtigt in die Schrödinger-Gleichung eingehen, denn physikalisch ist keine von ihnen vor den anderen ausgezeichnet. Die einfachste Möglichkeit, die Gleichung (12.9) in dieser Weise zu verallgemeinern, ist

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E_{\text{ges}} \cdot \psi(x, y, z). \quad (12.10)$$

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

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

$$\sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \quad (n_x = 1, 2, 3, \dots) \quad (12.11)$$

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

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

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

Das Produkt aller drei Funktionen erfüllt also alle Randbedingungen, die durch die unendlich hohen Wände am Rand des Potentialwürfels gestellt werden. Die Frage ist: Erfüllt es auch die Schrödinger-Gleichung (12.10)? Um dies zu überprüfen, setzen wir den Ansatz

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \quad (12.12)$$

in die Schrödinger-Gleichung (12.10) ein. Nach Ausführen der Ableitungen erhalten wir:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{n_x^2 \pi^2}{a^2} - \frac{n_y^2 \pi^2}{a^2} - \frac{n_z^2 \pi^2}{a^2} \right) + V_0 \right] \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = E_{\text{ges}} \cdot \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z). \quad (12.13)$$

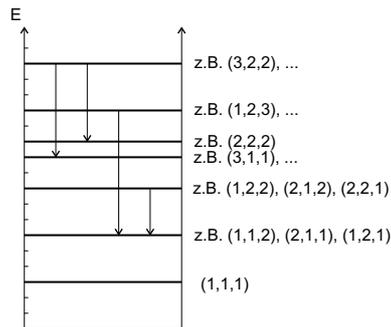
Damit die Gleichung erfüllt ist, muss gelten:

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + V_0 \quad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots). \quad (12.14)$$

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

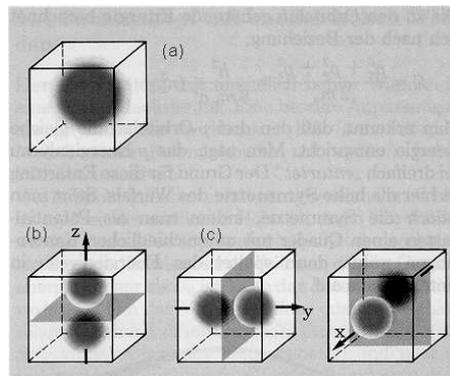
Der hervorstechendste Unterschied zum eindimensionalen Fall ist, dass die Wellenfunktionen und die Energieeigenwerte von drei **Quantenzahlen**  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  gekennzeichnet werden statt von einer einzigen. Die drei Quantenzahlen können unabhängig voneinander alle Werte der natürlichen Zahlen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

In Abbildung (12.6) sind die möglichen Energiewerte, die den verschiedenen Quantenzahlen  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  entsprechen, aufgetragen. Man nennt ein solches Diagramm ein Termschema. Man sieht, dass ein einfaches Modell wie der dreidimensionale Potentialtopf schon ein relativ komplexes Schema von Energieniveaus liefert. Jedem Übergang zwischen zwei Energieniveaus entspricht gemäß der Gleichung  $hf = E_n - E_m$  eine Linie im Linienspektrum. Einige mögliche Übergänge sind in Abbildung (12.6) eingetragen.



**Abbildung 12.6:** Termschema des dreidimensionalen Potentialtopfs

Der stationäre Zustand mit der niedrigsten Energie (also der Grundzustand) ist durch die Quantenzahlkombination  $n_x = n_y = n_z = 1$  gegeben. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi_{111}(x, y, z)|^2$  ist in Abbildung (12.7 (a)) dargestellt. Sie hat im Zentrum des Potentialtopfs einen Bauch, der einer maximalen Aufenthaltswahrscheinlichkeit entspricht.



**Abbildung 12.7:** Wahrscheinlichkeitsdichten beim dreidimensionalen Potentialtopf

Für die Quantenzahlkombinationen

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

ergeben sich die in Abbildung (12.7 (b) – (d)) dargestellten Wahrscheinlichkeitsdichten. Alle drei Zustände besitzen die gleiche Energie. Auffällig sind die Ebenen mit  $|\psi|^2 = 0$ , für die die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron zu finden, Null wird. Man bezeichnet sie als Knotenflächen.

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

# Kapitel 13

## Das Wasserstoff-Atom

### 13.1 Energiewerte des Wasserstoff-Atoms durch Kastenpotential-Näherung

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

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

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (13.1)$$

des Kerns aufhält (Abbildung 13.1).

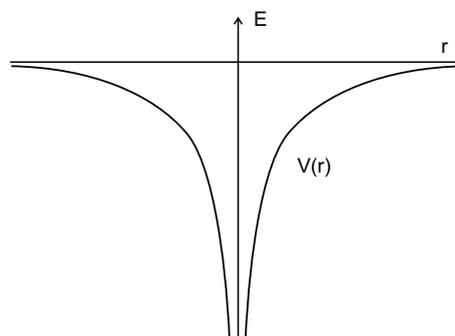


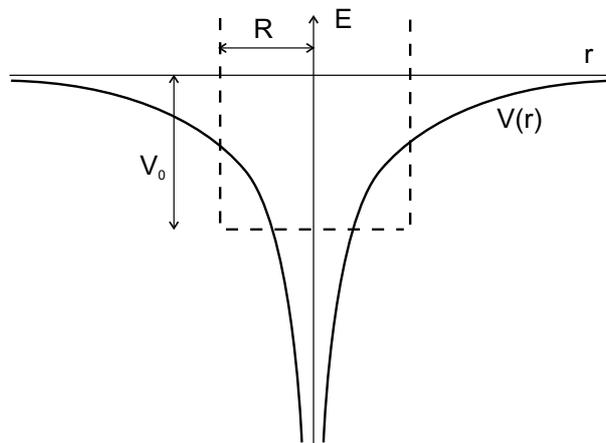
Abbildung 13.1: Coulomb-Potential

Man kann die Energieniveaus des Elektrons durch Lösung der Schrödinger-Gleichung in diesem Potential ermitteln.

Es stellt sich heraus, dass die Lösung dieses Problems unsere mathematischen Mittel bei weitem überschreitet. Ein Ausweg besteht darin, das Coulomb-Potential durch ein Potential anzunähern, das sich einfacher behandeln lässt. Auf diese Weise sind wir schon im letzten Abschnitt bei unserer ersten Näherung des im Potentialtopf eingesperren Elektrons vorgegangen. Nur hatte sich da gezeigt, dass die Näherung offensichtlich zu grob war, um die beobachteten Spektren zu erklären.

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

Wie bei unserem groben Modell des eingesperren Elektrons wählen wir einen dreidimensionalen kastenförmigen Potentialtopf mit unendlich hohen Potentialwänden. Anders als vorher passen wir den Potentialtopf dem Coulomb-Potential aber nun besser an: Wir variieren die Breite  $2R$  und die Energiedifferenz  $V_0$  zwischen dem „Boden“ des Potentialtopfs und dem Energienullpunkt (Abbildung 13.2).



**Abbildung 13.2:** Coulomb-Potential und Modellpotential

Diese Parameter werden so gewählt, dass der Potentialtopf möglichst gut auf das Coulomb-Potential „passt“.

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

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

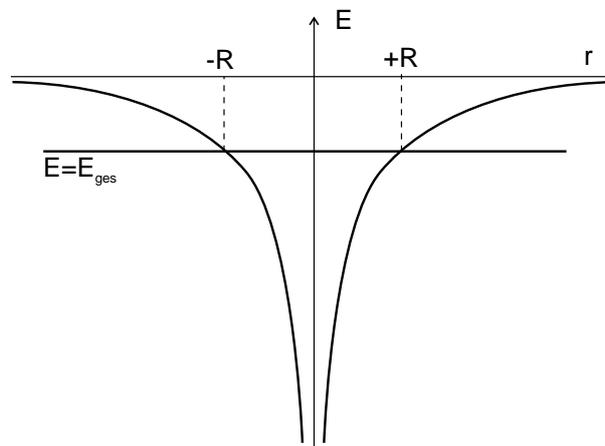
In der klassischen Physik kann sich eine in einem Coulomb-Potential gebundene Ladung (Energie  $E_{\text{ges}} < 0$ ) nicht beliebig weit nach außen bewegen. Wie im Gravitationsfeld (z. B. beim senkrechten Wurf) gibt es in einem gewissen Abstand  $R$  einen Umkehrpunkt. Er ist dadurch gekennzeichnet, dass die kinetische Energie Null ist; die Gesamtenergie  $E_{\text{ges}}$  ist dann gleich der potentiellen Energie (Abbildung 13.3):

$$E_{\text{ges}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}, \quad (13.2)$$

oder, nach  $R$  aufgelöst:

$$R = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}. \quad (13.3)$$

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



**Abbildung 13.3:** Lage der Umkehrpunkte

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

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

Innerhalb des Potentialtopfs hat das Potential einen konstanten Wert  $V_0$ . Wir müssen nun eine geeignete Abschätzung für  $V_0$  finden. Es liegt nahe,  $V_0$  so zu wählen, dass es die „mittlere Tiefe“ des Coulomb-Potentials darstellt. Hier ergibt sich zunächst eine Schwierigkeit, weil das Coulomb-Potential am Nullpunkt divergiert. Wie soll man in diesem Fall eine „mittlere Tiefe“ bestimmen? Es handelt sich jedoch nicht um eine echte Divergenz, denn durch die endliche Ausdehnung des Kerns wird das Potential am Rand des Kerns „abgeschnitten“ und nimmt einen endlichen Wert an.<sup>1</sup>

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

Aus der Abbildung (13.3) kann man ersehen, dass der Wert von  $V_0$  negativ und betragsmäßig größer als  $E_{\text{ges}}$  sein muss. Wir erhalten eine Abschätzung, indem wir festlegen, dass  $V_0$  den Wert des Coulomb-Potentials an der Stelle  $\frac{1}{2}R$  hat (Abbildung 13.4).

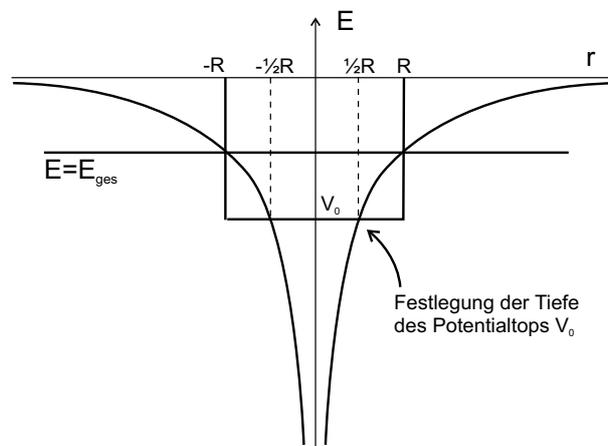


Abbildung 13.4: Festlegen von  $V_0$

Es gilt demnach (Einsetzen der Formel für  $R$ ):

$$V_0 = V\left(r = \frac{1}{2}R\right) = V\left(r = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}\right). \quad (13.4)$$

Benutzen wir den Ausdruck (13.1) für das Coulomb-Potential, ergibt sich

$$V_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot 2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0 E_{\text{ges}}}{e^2} \quad (13.5)$$

und das Endergebnis für  $V_0$  lautet:

$$V_0 = 2 \cdot E_{\text{ges}} = -2 \cdot |E_{\text{ges}}|. \quad (13.6)$$

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

### (c) Bestimmen der Energiewerte

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

$$R = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |E_{\text{ges}}|} \quad (13.7)$$

ist. Die Energieniveaus eines Elektrons im dreidimensionalen Potentialtopf haben wir bereits vorher berechnet (Gleichung (12.14) mit  $a = 2R$ ):

$$E_{\text{ges}} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2R)^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) + V_0. \quad (13.8)$$

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

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

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

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

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

$$-E_{\text{ges}} = \frac{3}{8} \cdot \pi^2 \frac{\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2}{me^4} \cdot n^2 E_{\text{ges}}^2,$$

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

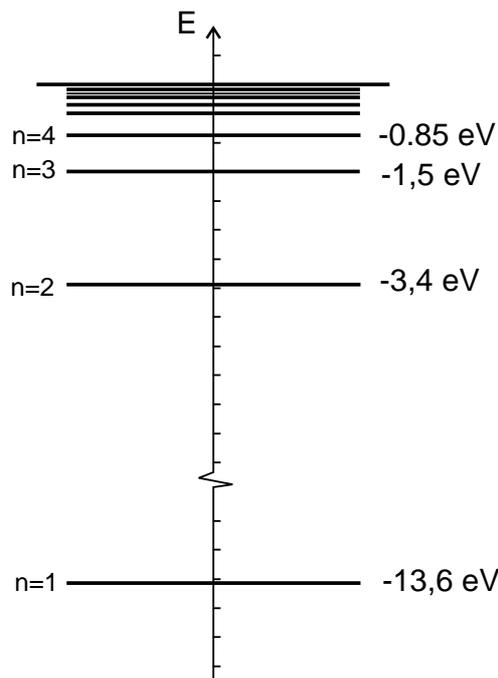
$$E_{\text{ges}} = -\frac{16}{3 \cdot \pi^2} \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (13.9)$$

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

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

$$E_{\text{ges}} \sim -\frac{1}{n^2}. \quad (13.10)$$

Für alle Zustände gilt  $E_{\text{ges}} < 0$ , d. h. sie sind gebunden. Je größer  $n$  wird, um so höher ist die Energie. Für große  $n$  rücken die Energiewerte immer dichter zusammen und nähern sich dem Wert  $E_{\text{ges}} = 0$  (Abbildung 13.5).



**Abbildung 13.5:** Termschema des Wasserstoffatoms

Diese Eigenschaften unseres Modells werden von der exakten quantenmechanischen Rechnung bestätigt.

Die Energiewerte, die sich mit der exakten Form des Potentials ergeben, unterscheiden sich vom Ergebnis unserer Modellrechnung um einen konstanten Faktor  $\frac{16}{3 \cdot \pi^2} \approx 0,54$ . Das korrekte Ergebnis für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms ist:

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

$$E_{\text{ges}} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (13.11)$$

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

Schließlich können wir die berechneten Energiewerte noch mit dem beobachteten Spektrum des Wasserstoffatoms verknüpfen (Balmer-Spektrum, Abbildung 12.2). Licht wird emittiert, wenn das Atom einen Übergang zwischen zwei Zuständen (z. B. von  $n = n_1$  nach  $n = n_2$ ) macht. Nach Gleichung (12.2) ist die Photonenenergie  $h \cdot f$  dabei gleich der Differenz der beiden Energiewerte. Daraus erhalten wir:

$$h \cdot f = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \quad (13.12)$$

Das entspricht genau der Balmer-Formel (12.1). Den Wert der Rydberg-Frequenz können wir durch Vergleich der beiden Formeln bestimmen:

$$f_{\text{Ry}} = \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3\epsilon_0^2} = 3,2898 \cdot 10^{15} \text{ Hz}, \quad (13.13)$$

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