

Atom-, Kern- und Teilchenphysik I

VO 142.086

Mario PITSCHEMANN¹

Atominstitut
TU Wien
Stadionallee 2
A-1020 Wien

Sommersemester 2020

¹mario.pitschmann@tuwien.ac.at

Vorwort

Dieses Skriptum dient zur Begleitung der zweistündigen Vorlesung „Atom-, Kern- und Teilchenphysik I“, welche im Rahmen des Bachelorstudiums der Technischen Physik an der TU Wien gelesen wird. Voraussetzung für das Verständnis der Vorlesung sind die erfolgreiche Absolvierung von Einführungsvorlesungen in die Elektrodynamik und besonders die Quantentheorie. Um das Skriptum trotzdem möglichst eigenständig zu gestalten, sind im Anhang umfangreiche Appendices beigefügt.

Darüber hinaus werden an einigen Stellen ergänzende Bemerkungen zur Vertiefung des Stoffes wiedergegeben, die mit vertikalen grauen Balken gekennzeichnet sind. Entsprechende Stellen werden in der Vorlesung nicht vorgetragen und sind daher auch nicht prüfungsrelevant.

Für die Übersetzung meiner Vorlesungsunterlagen in L^AT_EX danke ich Herrn Matthias Krennmüller.

Bei der Ausarbeitung dieser Vorlesung waren mir alle Bücher, welche im Literaturverzeichnis gelistet sind, von grösstem Nutzen und werden zur Vertiefung der Vorlesung empfohlen. Auch die Vorlesungen der vorhergehenden Vortragenden Profs. Manfried Faber und Helmut Leeb sowie Prof. Arno Rauschenbeutel waren hilfreich.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Ein-Elektronenatome	6
1.1 Die Schrödinger-Gleichung	6
1.2 Die Bewegung im kugelsymmetrischen Feld	6
1.3 Die Bewegung im Coulombfeld (Kugelkoordinaten)	10
2 Feinstruktturniveaus des Wasserstoffatoms	20
2.1 Der Spin	22
2.2 Relativistische Korrekturterme	25
2.3 Störungstheoretische Berechnung der Feinstruktturniveaus des Wasserstoffatoms	28
3 Isotopieverschiebung und Hyperfeinstruktur	35
3.1 Isotopieverschiebung	35
3.2 Hyperfeinstruktur der Atomniveaus	38
4 Strahlungsübergänge	43
4.1 Einsteins Strahlungsgesetze	43
4.2 Semiklassische Strahlungstheorie	45
5 Identische Teilchen	60
5.1 Das Prinzip der Ununterscheidbarkeit gleichartiger Teilchen	60
5.2 Die Austauschwechselwirkung	62
6 Zwei-Elektronen Atome	66
6.1 Die Schrödinger-Gleichung für Zwei-Elektronen Atome	66
6.2 Störungstheoretische Behandlung	67
7 Mehr-Elektronen Atome	77
7.1 Die Zentralfeld-Näherung bzw. Hartree-Methode	77
7.2 Die Hartree-Fock Methode bzw. Methode des selbstkonsistenten Feldes	80
7.3 Die Thomas-Fermi-Gleichung	83
7.4 Die Elektronenzustände in einem Atom	84
8 Grundlegende Kerneigenschaften	87
8.1 Kernbausteine	87
8.2 Kernradien	88

8.3	Kernmasse und Bindungsenergie	92
8.4	Spin und Momente von Kernen im Grundzustand	95
8.5	Angeregte Kerne	110
8.6	Stabilität der Kerne	111
9	Isospin und Kernkräfte	116
10	Kernmodelle	117
10.1	Das Tröpfchenmodell	117
10.2	Das Fermigasmodell	123
10.3	Das Schalenmodell	128
10.4	Das Kollektive Modell	141
10.5	Entwicklung von Kernmodellen	145
11	Kernzerfälle und Kernreaktionen	147
12	Grundlegende Teilcheneigenschaften	149
A	Mathematische Grundlagen	151
A.1	Laplace-Operator in gekrümmten Koordinaten	151
A.2	Die konfluent hypergeometrische Funktion	152
A.3	Das Integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx$	153
A.4	Das Integral $\int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}}$	155
A.5	Radius einer „leicht“ elliptischen Form	157
B	Klassische Physik und Elektrodynamik	159
B.1	Zweikörper-Problem	159
B.2	Klassische Multipolmomente	160
B.3	Quadrupolmoment eines Ellipsoids	162
B.4	Potentielle Energie einer gleichförmig geladenen Kugel	164
C	Quantenmechanische Grundlagen	166
C.1	Drehimpulsoperator in Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten	166
C.2	Entwicklung nach Potenzen von $1/c$ der Dirac-Gleichung für ein Elektron in einem äußeren Feld	168
C.3	Zeitunabhängige Störungstheorie	172
C.4	Zeitabhängige Störungstheorie	175
C.5	Das Variationsprinzip	177
C.6	Das 3-dimensionale unendliche Rechteckpotential	178
C.7	Der 3-dimensionale harmonische Oszillator	180
D	Kernphysik	184
D.1	Beziehung von Kern-Quadrupolmoment zu Q_{zz}	184
D.2	Inneres Quadrupolmoment in der Quantenmechanik	186
D.3	Massenkorrektur für den Neutronenüberschuss M_3	188

D.4 Der Massenmittelpunkt im selbstkonsistenten Feld	189
Literaturverzeichnis	191

Einleitung

Die Atom-, Kern- und Teilchenphysik ist die Wissenschaftsdisziplin, welche letztlich erforscht „was die Welt im Innersten zusammenhält“.

Der Begriff Atom geht auf den griechischen Begriff „atomos“ = „unteilbar“ zurück. Aus der Zeit um 500 v.Chr. sind uns von den griechischen Philosophen *Leukipp* (480-420 v.Chr.) und *Demokrit* (460-370 v.Chr.) die ersten Ideen über eine atomistische Struktur der Materie überliefert. Diese Philosophen waren der Ansicht, dass Materie nicht unbeschränkt teilbar ist. Die atomistische Theorie wurde u. a. von *Platon* (429-348 v.Chr.) und *Aristoteles* (384-322 v.Chr.) vertreten und war auf rein spekulativen Vorstellungen über Materie begründet. Dabei ist die Unteilbarkeit der Atome so zu verstehen, dass sie die kleinste Einheit eines Stoffes darstellen, die noch alle charakteristischen Eigenschaften (Spektrallinien, chemische Eigenschaften) besitzt.

Erst am Beginn des 19. Jahrhunderts kamen aus chemischen Untersuchungen die ersten konkreten Hinweise auf die atomistische Struktur der Materie

- **Gesetz der konstanten und multiplen Proportionen**

Joseph Louis Proust (1799) und *John Dalton* (1803)

Die Gewichtsverhältnisse zweier sich zu verschiedenen Verbindungen vereinigender Elemente stehen im Verhältnis kleiner ganzer Zahlen. Dalton verstand diese Gesetze als Folge der Verbindung verschiedener Typen vieler gleichartiger Teilchen und führte die chemische Symbolschrift ein.

- *J. Louis Gay-Lussac* (1808)

Die Volumsverhältnisse zweier sich zu verschiedenen Verbindungen vereinigender Elemente stehen im Verhältnis kleiner ganzer Zahlen.

- **Avogadrosche Hypothese** (1811)

Gleiche Volumina idealer Gase enthalten bei gleichem Druck und gleicher Temperatur gleich viele Moleküle.

Diese Gesetzmäßigkeiten konnten einfach durch die Annahme von Atomen und dem neu eingeführten Begriff von Molekülen erklärt werden. Dies führte auf das erste Atommodell von *William Prout* (1815), der die Hypothese vertrat, dass die relativen Atommassen aller chemischen Elemente Vielfache der relativen Atommasse von Wasserstoff sind und deshalb alle Elemente aus H-Atomen zusammengesetzt sind. Dies führte in weiterer Folge auf ein auf chemischen Eigenschaften beruhendes Ordnungsschema der Elemente, das **Periodische System** von *Lothar Meyer* und *Dmitrij I. Mendelejew* (1869). Etwa zur selben Zeit, im Jahre

1865, gelang es *Joseph Loschmidt*, die Anzahl der Moleküle in einem Mol zu bestimmen. Diese Zahl wird heute als Avogadrokonstante bezeichnet.

Einen weiteren Hinweis auf die Existenz von Atomen ergab sich aus den weiterführenden Untersuchungen zur Thermodynamik. Nach der Formulierung des Prinzips der Erhaltung der Energie (*J. Robert Mayer, James Prescott Joule*) war es naheliegend, den Begriff der Wärme sowie die thermodynamischen Gasgesetze als Folge atomarer Bewegungen und Stöße aufzufassen. Obwohl die ersten Ansätze durch *John Herapath* (1821) und *John James Waterston* (1846) gemacht wurden, erfolgte die wissenschaftliche Anerkennung der **kinetischen Gastheorie** erst in der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts. *Rudolf Clausius* und *James Clark Maxwell* werden als ihre Begründer angesehen; die klassische Vollendung der kinetischen Gastheorie erfolgte durch *Ludwig Boltzmann*. Dieser stellte sich in scharfem Gegensatz zum Physiker und Philosophen *Ernst Mach*, der keine Verbindung zwischen Atomvorstellung und Realität sah.

Die Verknüpfung der atomaren Struktur der Materie mit der **atomistischen Struktur von Ladungen** wurde 1833 durch *Michael Faraday* entdeckt. Auf Grund sorgfältiger Messungen der Elektrolyse der Flüssigkeiten stellte er fest:

- Die abgeschiedene Menge eines Elementes ist der transportierten Ladungsmenge proportional.
- Bei gleicher Elektrizitätsmenge werden verschiedene Elemente in äquivalenten Gewichten abgeschieden.

Daraus folgerte *Faraday*, dass es **Elementarladungen** gibt und dass diese mit der Materie verkoppelt sind. Die Entdeckung des Elektrons durch *Joseph John Thomson* (1897) und die Beobachtung, dass alle Atome Elektronen enthalten, gab die ersten Hinweise auf die Struktur der Atome. Nach dieser Vorstellung muss ein neutrales Atom ebensoviel positive Ladung wie Elektronen enthalten. Die Elektronen konnten nicht die Masse der Atome erklären und daher ging *Thomson* in seinem Atommodell von einem positiv geladenen kugelförmigen Massenkontinuum aus, in welches die Elektronen eingebettet sind. Diese Vorstellung wurde durch die Kanalstrahlexperimente von *Philipp Lenard* widerlegt. Eine weitere Klärung der Struktur der Atome ergab sich erst nach der Entdeckung der Radioaktivität durch *Henri Becquerel* (1896), die schließlich durch α -Streuexperimente von *Hans Geiger* und *Ernest Marsden* 1911 angeregt *Ernest Rutherford* zu dem nach ihm benannten **Atommodell** veranlassten.

Die Entwicklung der Atomphysik ist untrennbar mit der Entwicklung der Quantentheorie verknüpft. Als entscheidender Anstoß für die Quantentheorie ist die Formulierung des **Planck'schen Strahlungsgesetzes** durch *Max Planck* im Jahr 1900 anzusehen. Bei der Herleitung nahm *Planck* im Gegensatz zur klassischen Vorstellung an, dass die Energie harmonischer Oszillatoren nur diskrete Werte annehmen kann. Auf Grund des von *Rutherford* aufgestellten Atommodells konnte *Niels Bohr* 1913 die Grundlagen für die Quantisierung der Elektronenbahnen im Atom formulieren. *Arnold Sommerfeld* hat diese Quantisierungsvorschrift verfeinert. Damit konnten die Spektren der Atome, die von *Robert Bunsen* und *Robert Kirchhoff* um 1860 entdeckt worden waren, prinzipiell verstanden werden. Der Durchbruch der **Quantentheorie** erfolgte schließlich mit den Arbeiten von *Max Born*, *Werner Heisenberg*, *Erwin Schrödinger*, *Wolfgang Pauli* und *Paul Dirac* in den Jahren zwischen 1920 und 1930.

Einleitung

Die wichtigsten physikalischen Entdeckungen des 20. Jahrhunderts gehören zum Forschungsbereich der kleinsten Strukturen und Objekte in unserem Universum (Mikrokosmos) und ergaben, dass das Atom (griechisch: das Unteilbare) doch weiter teilbar ist:

- Das Atom besteht aus Atomkern und der Elektronenhülle (Experimenteller Nachweis: *Ernest Rutherford* 1911; Theoretisches Atommodell: *Niels Bohr*: 1913).
- Der Atomkern besteht aus zwei Teilchenarten, den Protonen und Neutronen (Experimenteller Nachweis des Neutrons: *James Chadwick* 1932).
- Protonen und Neutronen bestehen aus noch kleineren Substrukturen, den Quarks und Gluonen (Postuliert von *Murray Gell-Mann* und *George Zweig*: 1961; Experimenteller Nachweis: 1968).

Lediglich das Elektron hat sich seit seiner Entdeckung vor zirka 100 Jahren (1897) wacker als Elementarteilchen gehalten und konnte nicht mehr in weitere Untereinheiten zerlegt werden.

Die Entdeckungen des 20. Jahrhunderts bezüglich der größten Strukturen und Objekten in unserem Universum (Makrokosmos) erweiterten unseren Horizont auf ungeahnte Weise:

- Allgemeine Relativitätstheorie, in der die Gravitation als eine Wirkung des gekrümmten Raums dargestellt wird. (*Albert Einstein*, 1911: Bestätigung durch eine Sonnenfinsternis: 1919).
- Nachweis von Galaxien (*Ernst Öpik*: 1922).
- Sterne erzeugen ihre Energie durch Kernfusion (*George Gamow*: 1928).
- Galaxienflucht: Ausdehung des Weltalls (*Edwin Hubble*: 1929).
- Theorie des Urknalls: (*Ralph Alpher, George Gamow*: 1948).

Es zeigte sich überraschenderweise, dass die Kern- und Teilchenphysik nicht nur die Basis des Verständnisses der kleinsten Objekte in unserem Universum (Elementarteilchen und Kerne) liefert, sondern auch zum Verständnis der größten Strukturen und Objekte (Sterne, Galaxien, Universum) eine unabdingbare Voraussetzung ist. Ein Beispiel sind Kerne und Sterne: nicht nur produzieren Kernreaktionen die Energie, welche die Sterne zum Leuchten bringt, sondern im Inneren der Sterne wurden auch die meisten in unserem Universum existierenden Atomkerne und damit auch die chemischen Elemente erzeugt. Im Weiteren ist die Entstehung unseres Universums durch den Urknall nur mit Hilfe der Elementarteilchenphysik verständlich.

Neben der klassischen Kern- und Teilchenphysik, die sich mit den grundlegenden Kern- und Teilcheneigenschaften, Streuprozessen, Reaktionen und Zerfällen von Kernen und Teilchen, sowie Teilchenbeschleunigern und -nachweisgeräten beschäftigt, gibt es heute auch zahlreiche interdisziplinäre sowie anwendungsorientierte Gebiete der Kern- und Teilchenphysik: Nukleare und Teilchen-Astrophysik, Nukleare Geophysik, Festkörperphysik, Nuklear- und Beschleunigermedizin (Diagnostik und Therapie, z.B. Nuklearmedizin und Radioonkologie), technische Anwendungen und Energiegewinnung. Insbesondere haben sich auch aus den Beschleunigern, die zunächst nur zur Grundlagenforschung dienten, mannigfache Anwendungen

entwickelt. Neben den herkömmlichen Beschleunigern gibt es jetzt Synchrotronstrahlungs- und Neutronenspallationsquellen, die vor allem in der Untersuchung der Struktur von Stoffen in Technik, Medizin und Umwelt eingesetzt werden. Auch die Messtechnik konnte vor allem in Bezug auf Detektoren und Datenauswertung von den in der Kern- und Teilchenphysik gemachten Fortschritten profitieren. Selbst die Informationstechnologie erhält wesentliche Impulse aus der Kern- und Teilchenphysik (z.B. wurde das World Wide Web (WWW) am CERN entwickelt).

Teil I: Atomphysik

1

Ein-Elektronenatome

1.1 Die Schrödinger-Gleichung

Eine Darstellung der nicht-relativistischen Quantentheorie ist durch die **Schrödinger-Gleichung** gegeben, welche von *Erwin Schrödinger* 1926 aufgestellt wurde. Sie lautet

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (1.1)$$

mit dem Hamilton-Operator für ein Teilchen im äusseren Feld

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z), \quad (1.2)$$

ergibt das

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U(x, y, z)\Psi. \quad (1.3)$$

Für stationäre Eigenzustände ψ_n , für welche $\Psi_n = e^{-iE_nt/\hbar} \psi_n$ gilt, nimmt die **Schrödinger-Gleichung** die Gestalt

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + [E - U(x, y, z)]\psi = 0, \quad (1.4)$$

an. Zusammen mit der wahrscheinlichkeitstheoretischen Interpretation von **Max Born**, welche besagt dass $|\Psi|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Teilchens am entsprechenden Ort angibt, ergibt dies eine „vollständige“ quantenmechanische Beschreibung.

1.2 Die Bewegung im kugelsymmetrischen Feld

Als nächstes betrachten wir die Bewegung zweier Teilchen im kugelsymmetrischen Feld. Wie in der klassischen Mechanik lässt sich das 2-Körperproblem miteinander wechselwirkender Teilchen in der Quantenmechanik auf ein 1-Körperproblem reduzieren (siehe *Appendix B.1*), i.e. aus

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(r), \quad (1.5)$$

wobei sich die Indizes 1, 2 auf die entsprechenden Teilchen beziehen, erhalten wir

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r), \quad (1.6)$$

wobei Δ_R und Δ die Laplace-Operatoren bezüglich \mathbf{R} und \mathbf{r} sind und $M = m_1 + m_2$ bzw. $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ die Gesamt- bzw. reduzierte Masse sind.

Da der Hamilton-Operator in eine Summe bezüglich der kinetischen Energien zerfällt, kann man folgenden Produktansatz für die Wellenfunktion machen

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \longrightarrow \varphi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

wobei $\varphi(\mathbf{R})$ die Bewegung des Massenmittelpunktes als freie Bewegung eines Teilchens der Masse $m_1 + m_2$ beschreibt, während $\psi(\mathbf{r})$ die Relativbewegung der Teilchen als Bewegung eines Teilchens mit Masse m im kugelsymmetrischen Feld $U(r)$ beschreibt. Die Schrödinger-Gleichung

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0, \quad (1.8)$$

schreiben wir in Kugelkoordinaten (siehe *Appendix A.1*)

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0. \quad (1.9)$$

Mit dem Drehimpulsoperator $\hat{\mathbf{L}}$ (siehe *Appendix C.1*) kann dies in der Form

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \psi \right] + U(r) \psi = E \psi, \quad (1.10)$$

geschrieben werden.¹ Da der Drehimpuls bei der Bewegung im kugelsymmetrischen Feld erhalten bleibt, setzen wir an

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (1.11)$$

d.h. wir betrachten stationäre Zustände mit bestimmten l und m . Einsetzen ergibt (siehe *Appendix C.1*)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0, \quad (1.12)$$

¹Mit dem Operator für den Radialimpuls

$$\hat{p}_r \psi = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi,$$

lautet der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \right) + U(r),$$

womit er dieselbe Gestalt wie die klassische Hamilton-Funktion in Kugelkoordinaten hat.

da gilt

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm} . \quad (1.13)$$

In obiger Gleichung für R tritt keine Abhängigkeit von \hat{L}_z auf. Das entspricht der allgemeinen $(2l+1)$ -fachen Entartung der Niveaus in den Drehimpulsrichtungen.² Durch die Substitution

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} , \quad (1.14)$$

erhält man

$$\boxed{\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0 .} \quad (1.15)$$

Damit die Wellenfunktion endlich bleibt muss $\chi(0) = 0$ gelten (siehe hierzu Fußnote 5). Gleichung (1.15) entspricht formal der Schrödinger-Gleichung für eine 1-dimensionale Bewegung mit der potentiellen Energie³

$$\boxed{U_l(r) = U(r) + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{Zentrifugalenergie}} ,} \quad (1.16)$$

welche bei $r = 0$ beschränkt ist. Die Norm lautet

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr . \quad (1.17)$$

Man kann zeigen, dass bei einer eindimensionalen Bewegung in einem auf einer Seite beschränkten Bereich die Energieniveaus nicht entartet sind. Die Energien bestimmen die Lösungen von R somit vollständig, während l und m den Winkelanteil der Lösungen vollkommen festlegen. D.h. für ψ ist ein vollständiger Satz physikalischer Größen gegeben durch

$$E, l, m .$$

Für 1-dimensionale Bewegungen (und somit hier für den Radialteil) gilt der **Knotensatz**:

Die Funktion $\psi_{n_r}(x)$ zum $(n_r + 1)$ -ten Eigenwert E_{n_r} hat (für endliche Werte von x) n_r Nullstellen.

² Anders ausgedrückt besagt das, dass die Energie nicht von der Orientierung des Drehimpulses im Raum abhängt.

³ Klassisch ergibt sich für die Zentrifugalenergie $U_Z = \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}$ und somit für die radiale Komponente der entsprechenden Kraft $F_r = -\frac{\partial U_Z}{\partial r} = \frac{\mathbf{L}^2}{mr^3}$. Für ein Teilchen auf einer Kreisbahn gilt $\mathbf{L}^2 = m^2 v^2 r^2$ und wir erhalten $F_r = \frac{mv^2}{r}$.

Im kugelsymmetrischen Feld bei gegebenem l kann man die Energiewerte des diskreten Spektrums nach der Ordnungszahl n_r mittels des Knotensatzes ordnen. Das niedrigste Niveau hat $n_r = 0$. n_r gibt die Zahl der Knoten im Radialteil der Wellenfunktion für endliche r -Werte an (der Punkt $r = 0$ wird nicht mitgezählt).

<u>Bezeichnungen:</u>	n_r	...	radiale Quantenzahl						
	l	...	Nebenquantenzahl						⁴
	m	...	magnetische Quantenzahl						
sowie		$l = 0$	1	2	3	4	5	6	7
		s	p	d	f	g	h	i	k
									...

Der Grundzustand bei der Bewegung eines Teilchens in einem kugelsymmetrischen Feld ist immer der s -Zustand und darf keine Knoten haben (für $l \neq 0$ hätte der Winkelanteil welche). Wegen der positiven Zentrifugalenergie wächst der kleinstmögliche Energiewert mit zunehmendem l im Allgemeinen.

Wir wollen $R(r)$ nahe dem Koordinatenursprung bestimmen und nehmen $\lim_{r \rightarrow 0} U(r)r^2 = 0$ an. Wir machen einen Potenzreihenansatz für $R(r)$ und behalten nur den ersten Wert: $R(r) \propto r^s$. Gleichung (1.12) für $R(r)$ nach Multiplikation mit r^2 und im $\lim_{r \rightarrow 0}$ geht über in

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - l(l+1)R = 0. \quad (1.18)$$

Das ergibt sofort

$$s(s+1) = l(l+1), \quad (1.19)$$

mit den beiden Lösungen⁵

$$s = l, \quad \underbrace{-(l+1)}_{\text{divergiert für } r \rightarrow 0}. \quad (1.20)$$

D.h. wir finden für kleine r das Verhalten

$$\boxed{\lim_{r \rightarrow 0} R(r) \propto r^l.} \quad (1.21)$$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zwischen r und $r + dr$ zu finden ist somit $r^2 |R|^2 \sim r^{2(l+1)}$ und verschwindet für kleine r schneller mit wachsendem l .⁶

⁴Zur Interpretation sei angemerkt, dass l ein Maß für den Betrag des Bahndrehimpulses darstellt (genau genommen sind die Meßwerte des Betrages durch $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ gegeben). Die Komponente des Drehimpulses in Richtung der Quantisierungsachse ist durch $m\hbar$ gegeben. Da die Quantisierungsachse durch ein von außen angelegtes Magnetfeld bestimmt wird, führt dies zur entsprechenden Namensgebung. dass die Quantisierungsachse parallel zur z -Achse liegt ist reine Konvention.

⁵Für $s = -(l+1)$ ist im Falle $l \geq 1$ die Norm divergent am Ursprung. Für $l = 0$ gilt $R \sim \frac{1}{r}$ und weiters gilt $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$, im Potential findet sich jedoch keine derartige Singularität. Somit muss $s = -(l+1)$ tatsächlich ausgeschlossen werden.

⁶Das besagt, dass aufgrund der Zentrifugalkraft das Teilchen das Zentrum nicht erreichen kann, außer für $l = 0$. Für $s = -(l+1)$ hätte man das unphysikalische Ergebnis, dass das Teilchen mit steigendem Drehimpuls mit größerer Wahrscheinlichkeit im Zentrum anzutreffen ist. Diese unphysikalische Lösung ergibt sich überhaupt erst, da der Drehimpuls „quadratisch“ in der Schrödinger-Gleichung auftritt.

1.3 Die Bewegung im Coulombfeld (Kugelkoordinaten)

Wir betrachten nun als Spezialfall einer Bewegung im kugelsymmetrischen Feld die Bewegung in einem anziehenden Coulomb-Potential in Kugelkoordinaten⁷

$$U = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (1.22)$$

mit Kernladung Ze und Elektronenladung $-e$. Aus allgemeinen Überlegungen schließt man, dass negative Energiewerte diskret unendlich viele Niveaus besitzen und das Spektrum positiver Energie kontinuierlich ist. Im weiteren betrachten wir nur das erstere Spektrum.

Die Differentialgleichung (1.12) lautet nun

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} \right] R = 0, \quad (1.23)$$

mit der reduzierten Masse m . Wir verwenden im folgenden **Coulomb-Einheiten**:⁸

$$\text{Masse: } m, \quad \text{Länge: } \frac{\hbar^2}{mZe^2}, \quad \text{Zeit: } \frac{\hbar^3}{mZ^2e^4},$$

Alle anderen Einheiten lassen sich darauf zurückführen, z.B.:

$$\text{Energie: } \frac{mZ^2e^4}{\hbar^2},$$

Für den Rest des Kapitels verwenden wir, sofern nicht anders erwähnt, Coulomb-Einheiten und Gleichung (1.23) lautet in diesen Einheiten folgendermaßen⁹

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + 2 \left[E + \frac{1}{r} \right] R = 0. \quad (1.24)$$

⁷Während die Separation der Variablen in der Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten für die Bewegung in einem beliebigen kugelsymmetrischen Feld immer möglich ist, gestattet das Coulombfeld außerdem die Separation der Variablen in sogenannten parabolischen Koordinaten.

⁸Der Zusammenhang zwischen üblichen Einheiten (mit Index N) und Coulomb-Einheiten (mit Index C) ist wie folgt: Masse: $m_N = m m_C$; Länge: $r_N = \frac{\hbar^2}{mZe^2} r_C$; Zeit: $t_N = \frac{\hbar^3}{mZ^2e^4} t_C$; Energie: $E_N = \frac{mZ^2e^4}{\hbar^2} E_C$; Somit ist in Coulomb-Einheiten m_C , r_C , t_C und E_C dimensionslos.

⁹Ist m gleich der Elektronenmasse m_e und $Z = 1$ dann stimmen **Coulomb-Einheiten** mit den **atomaren Einheiten** überein. Die atomare

$$\text{Längeneinheit: } \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m - der Bohrradius}$$

$$\text{Energieeinheit: } \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = 27.21 \text{ eV}$$

$$\text{Ladungseinheit: } e = 4.80 \times 10^{-10} \text{ elektrostatische Einheiten}$$

Formal geht man zu atomaren Einheiten über indem man $e = m_e = \hbar = 1$ setzt. Für $Z \neq 1$ unterscheiden sich Coulomb- und atomare Einheiten.

1.3.1 Diskretes Spektrum

Wir führen die neuen Variablen ein

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2E}}, \quad \rho = \frac{2r}{n},$$

und erhalten damit (Strich bedeutet Ableitung nach ρ)

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \quad (1.25)$$

Für kleine ρ (d.h. Vernachlässigung von $-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho}$) findet man $R \sim \rho^l$ für die konvergente Lösung in Übereinstimmung mit dem allgemeinen Fall der Bewegung im kugelsymmetrischen Feld. Für asymptotisch große ρ lassen wir die Glieder $\sim \frac{1}{\rho}, \frac{1}{\rho^2}$ weg und erhalten

$$R'' = \frac{R}{4} \quad \text{mit den Lösungen} \quad \underbrace{R \sim e^{\rho/2}}_{\text{divergent}}, \quad R \sim e^{-\rho/2}. \quad (1.26)$$

Deshalb machen wir den Ansatz

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho). \quad (1.27)$$

Die Differentialgleichung für die neue Funktion $w(\rho)$ lautet nun

$$\rho w'' + (2l + 2 - \rho) w' + (n - l - 1) w = 0. \quad (1.28)$$

Für die Lösung $w(\rho)$ fordern wir nun:

- A) Die Lösung darf im Unendlichen nicht schneller als eine endliche Potenz von ρ divergieren
- B) Für $\rho = 0$ muss sie endlich sein

Aus B) folgt die Lösung mittels der konfluent hypergeometrischer Funktion (*Appendix A.2*)¹⁰

$$w = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho).$$

Aus A) folgt, dass das erste Argument $-n + l + 1$ eine nichtnegative ganze Zahl oder 0 sein muss, dann wird F zu einem Polynom $(n - l - 1)$ -ten Grades reduziert. Andernfalls divergiert sie wie e^ρ . Somit folgt, dass n eine positive ganze Zahlen sein muss und für gegebenes l

$$n \geq l + 1,$$

sein muss. Somit erhalten wir die diskreten Energieniveaus

$$E = -\frac{1}{2n^2} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, \dots$$

(1.29)

¹⁰Die zweite Lösung von Gleichung (1.28) divergiert für $\rho \rightarrow 0$.

Es gibt also unendlich viele Niveaus zwischen dem Grundzustand $E_1 = -\frac{1}{2}$ und $E = 0$.¹¹ Die Abstände zwischen aufeinanderfolgenden Niveaus schrumpfen mit wachsendem n und häufen sich bei $E = 0$ wo sich das diskrete Spektrum an das kontinuierliche anschließt. In den üblichen Einheiten lautet das diskrete Spektrum¹²

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}. \quad (1.30)$$

Führt man die dimensionlose **Sommerfeld Feinstrukturkonstante**

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137.04}, \quad (1.31)$$

ein, wobei c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist, so lässt sich das diskrete Spektrum auch folgendermassen schreiben¹³

$$E = -\frac{mc^2}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}. \quad (1.32)$$

Bezeichnung: $n \dots$ **Hauptquantenzahl**

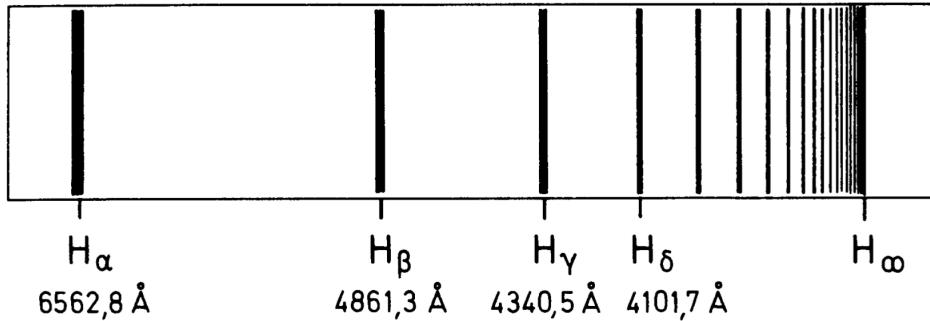


Abbildung 1.1: Balmer-Serie von Wasserstoff in Emission. Man sieht die Konvergenz der Linien bei der Seriengrenze H_∞ (Quelle: *Haken & Wolf: Atom-und Quantenphysik: Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen. Springer-Verlag, 2013*).

¹¹Es ist bemerkenswert, dass es überhaupt einen Grundzustand endlicher Energie gibt. Klassisch wäre der Zustand tiefster Energie jener mit $E \rightarrow -\infty$ in welchem das Teilchen am Kernort ruht (das erhält man auch aus dem quantenmechanisch Resultat für $\hbar \rightarrow 0$). Quantenmechanisch ist das aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation nicht möglich. Ein fix am Kernort lokalisiertes Elektron hätte unendliche Impulsunschärfe und somit unendliche Unschärfe der kinetischen Energie. Je schärfer das Elektron am Kernort lokalisiert ist desto grösser ist seine Energieunschärfe.

¹²Die Formel Gleichung (1.30) wurde 1913 von *Niels Bohr* noch vor der Schaffung der Quantenmechanik abgeleitet. Im Rahmen der Matrizengleichung wurde diese Formel 1926 von *Wolfgang Pauli* und wenige Monate später von *Erwin Schrödinger* mit Hilfe der Wellengleichung erhalten.

¹³Man muss beachten, dass Gleichung (1.32) nicht von der Lichtgeschwindigkeit c abhängt, da sie das Resultat einer nicht-relativistischen Rechnung ist. Bei der späteren Betrachtung der relativistischen Korrekturen, aus welcher sich die Feinstruktur ergibt, wird diese Darstellung besonders nützlich sein.

Es gilt $n_r = n - l - 1$.¹⁴ Für festes n kann l die Werte

$$l = 0, 1, \dots, n-1,$$

annehmen, also insgesamt n verschiedene Werte.

Die Energien hängen nur von n ab, bei gegebenen n haben unterschiedliche l dieselbe Energie. Die Energieeigenwerte sind also nicht nur bezüglich der magnetischen Quantenzahl m entartet (diese Entartung gilt bei jeder Bewegung in einem kugelsymmetrischen Feld) sondern auch bezüglich l . Letztere Entartung nennt man **zufällige** oder **Coulomb-Entartung** und ist eine Eigenart des Coulomb-Feldes. Der Entartungsgrad ergibt sich somit zu

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (1.33)$$

Die konfluent hypergeometrische Funktion mit ganzzahligen Werten für beide Parameter stimmt bis auf einen Faktor mit den verallgemeinerten Laguerreschen Polynomen überein. Für die nominierten Radialfunktionen

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1,$$

findet man (Appendix A.2)¹⁵

$$\begin{aligned} R_{nl} &= -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{-r/n} \left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{n}\right) \\ &= \frac{2}{n^{l+2}(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} (2r)^l e^{-r/n} F \left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right). \end{aligned} \quad (1.35)$$

¹⁴D.h. $-n_r$ ist genau das erste Argument der obiger konfluent hypergeometrischer Funktion.

¹⁵Die ersten R_{nl} lauten explizit

$$\begin{aligned} R_{10} &= 2 e^{-r}, \\ R_{20} &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-r/2} \left(1 - \frac{r}{2}\right), \\ R_{21} &= \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-r/2} r, \\ R_{30} &= \frac{2}{3\sqrt{3}} e^{-r/3} \left(1 - \frac{2}{3}r + \frac{2}{27}r^2\right), \\ R_{31} &= \frac{8}{27\sqrt{6}} e^{-r/3} \left(1 - \frac{r}{6}\right), \\ R_{32} &= \frac{4}{81\sqrt{30}} e^{-r/3} r^2. \end{aligned} \quad (1.34)$$

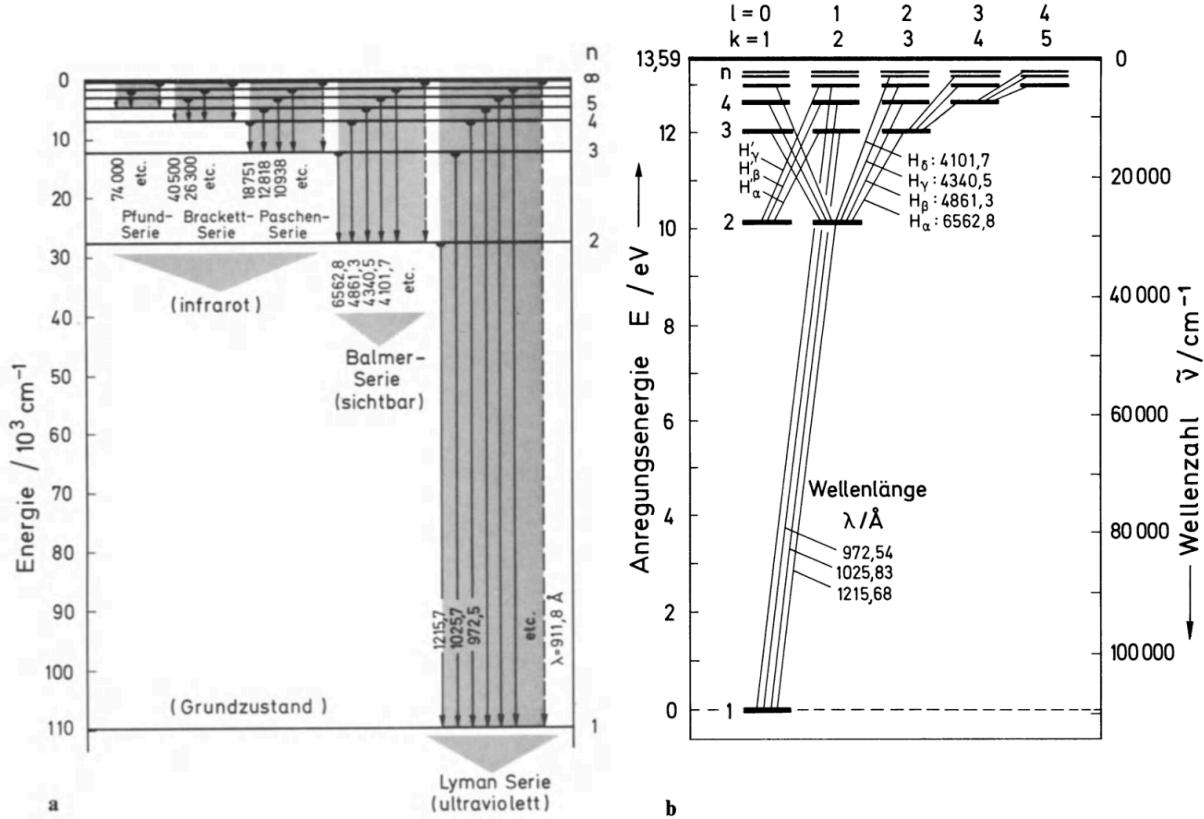


Abbildung 1.2: a) Termschema für die Linien des Wasserstoff-Spektrums und Serieneinteilung. Die Wellenlängen der Übergänge sind in Å angegeben. Die Energien können entweder als (negative) Bindungsenergien angegeben werden. Dann ist die Ionisierungsgrenze der Nullpunkt. Oder man gibt, beginnend mit dem Grundzustand, die Energien als Anregungsenergien an. Dann ist die Energie des Terms n_∞ gleich der Ionisierungsenergie. b) ist eine Darstellung der Linien des Wasserstoff-Spektrums in der Termdarstellung nach Grotian (Struktur der Materie VII, Springer Berlin 1928) (Quelle: Haken & Wolf: Atom-und Quantenphysik: Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen. Springer-Verlag, 2013).

In der Nähe des Koordinatenursprungs ist

$$R_{nl} \simeq r^l \frac{2^{l+1}}{n^{l+2}(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}, \quad (1.36)$$

da $e^{-r/n} \rightarrow 1$ und $F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right) \rightarrow 1$ gehen. Ohne Beweis haben wir für große r

$$R_{nl} \simeq (-1)^{n-l-1} \frac{2^n}{n^{n+1} \sqrt{(n+l)!(n-l-1)!}} r^{n-1} e^{-r/n}, \quad (1.37)$$

d.h. R_{10} nimmt ab $r \sim 1$ exponentiell ab, in den üblichen Einheiten ist das $r \sim \frac{\hbar^2}{mZe^2}$. Die Mittelwerte von r^k sind gegeben durch

$$\overline{r^k} = \int_0^\infty r^{k+2} R_{nl}^2 dr. \quad (1.38)$$

Ein-Elektronenatome

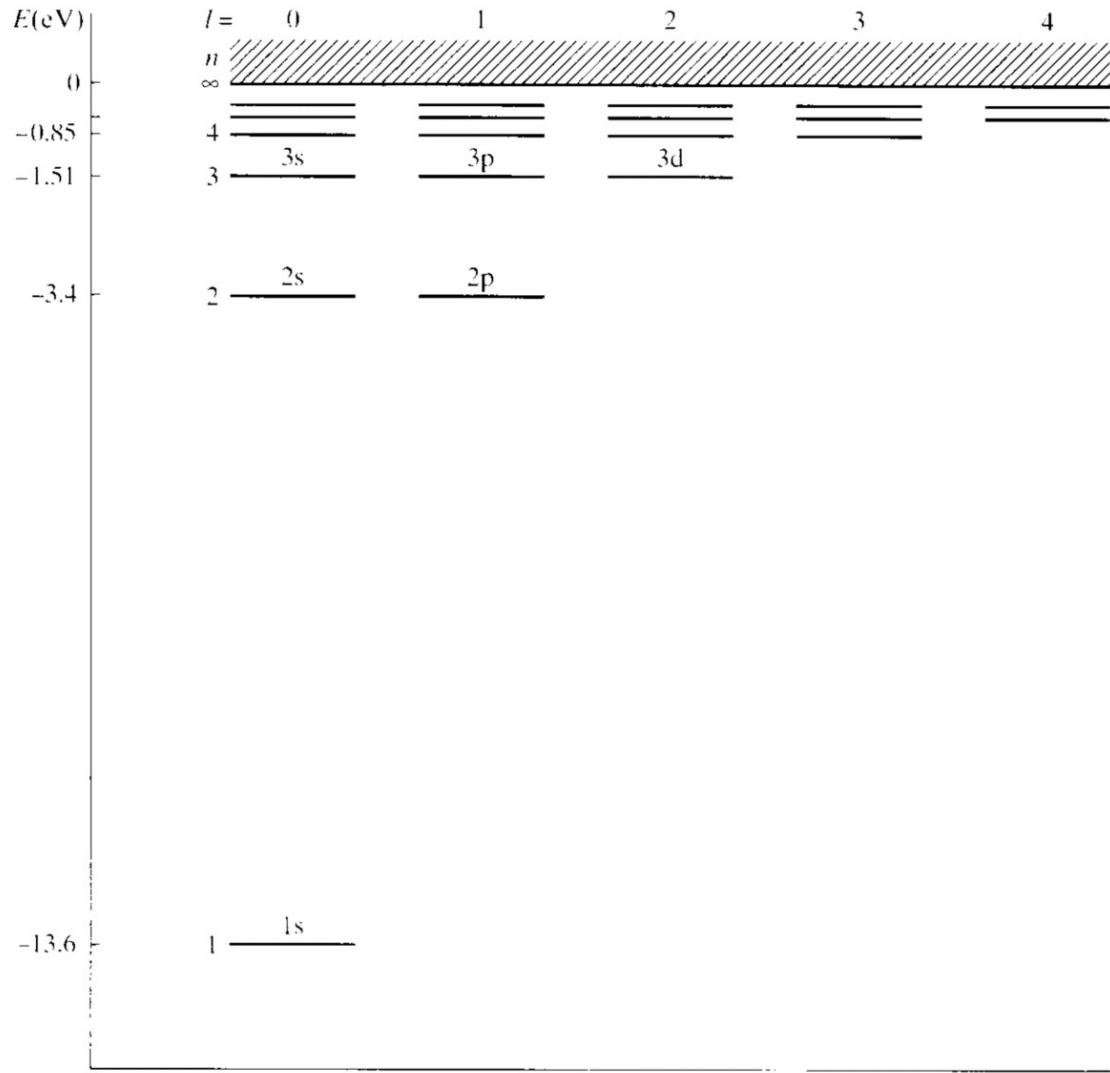


Abbildung 1.3: Energiespektrum des H-Atoms (Quelle [BJP03]).

Ohne Beweis geben wir an

$$\begin{aligned}
 \bar{r} &= \frac{1}{2} [3n^2 - l(l+1)], \\
 \overline{r^2} &= \frac{n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)], \\
 \overline{r^{-1}} &= \frac{1}{n^2}, \\
 \overline{r^{-2}} &= \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}, \\
 \overline{r^{-3}} &= \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right) (l+1)},
 \end{aligned} \tag{1.39}$$

wobei die letzte Beziehung für $l \neq 0$ gilt. Abschliessend wollen noch einige nützliche Eigen-

schaften in üblichen Einheiten ohne Beweis anführen. Für maximale $l = n - 1$ ergeben sich Kreisbahnen.

- Die radiale Verteilungsfunktion mit maximalem l , nämlich $r^2 R_{n,n-1}^2$, hat ein Maximum bei $r_{max} = \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2$. Tatsächlich stimmt r_{max} mit dem Bohrradius überein.
- Der Erwartungswert von \hat{r} bei maximalem l ergibt sich aus Gleichung (1.39) zu $\langle n, l = n - 1 | \hat{r} | n, n - 1 \rangle = \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2 \left(1 + \frac{1}{2n} \right)$ und ist größer als der Bohrradius, nähert sich letzterem für $n \rightarrow \infty$ unbeschränkt an.
- Es gilt analog dem Virialtheorem $\bar{V} = 2E$ und $\bar{T} = -E$.¹⁶

1.3.2 Die Natur der Coulomb-Entartung

Tatsächlich gibt es eine Erhaltungsgröße für die Bewegung in einem Coulombfeld $U = \alpha/r$, den sogenannten **Laplace-Runge-Lenz-Vektor**. Im klassischen Fall zeigt dieser konstante Vektor längs der großen Achse vom Brennpunkt zum Perihel (=Sonnennächster Punkt) und ist gegeben durch

$$\mathbf{A} = \alpha \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{m} \mathbf{p} \times \mathbf{L} . \quad (1.40)$$

In der Quantenmechanik in unseren Einheiten entspricht dem der Operator

$$\hat{\mathbf{A}} = -\frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) , \quad (1.41)$$

welcher mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \frac{1}{r}$ kommutiert, i.e.

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{H}] = 0 , \quad (1.42)$$

jedoch nicht mit $\hat{\mathbf{L}}^2$, i.e.

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{L}}^2] \neq 0 . \quad (1.43)$$

Die Existenz einer neuen Erhaltungsgröße, die nicht gleichzeitig mit den anderen Erhaltungsgrößen gemessen werden kann, führt zu einer zusätzlichen Entartung der Niveaus.^a In diesem Falle führt das gerade zur Coulomb-Entartung. Man kann zeigen, dass dies mit einer $SO(4)$ Symmetrie verknüpft ist.

Auch der räumliche Oszillator hat eine „höhere“ Symmetrie und zwar bezüglich unitärer Transformationen. Der besonderen Stellung des Coulomb-Feldes und des harmonischen Oszillators entspricht in der klassischen Mechanik der Sachverhalt, dass nur für diese beiden Felder geschlossene Bahnkurven für Teilchen existieren. Historisch hat das als erster *Issac Newton* entdeckt und in seinen *Principia* 1687 veröffentlicht.

¹⁶Man kann das Virialtheorem verwenden um \bar{r}^{-1} zu berechnen. Aus der Schrödinger-Gleichung ergibt sich $\bar{T} + \bar{V} = E$ und somit $\bar{r}^{-1} = -\bar{V} = -2E = \frac{1}{n^2}$.

^aEs seien \hat{f} und \hat{g} die Operatoren zweier Größen, welche erhalten sind, also beide mit dem Hamilton-Operator kommutieren ($[\hat{H}, \hat{f}] = 0$ und $[\hat{H}, \hat{g}] = 0$), jedoch nicht miteinander kommutieren ($[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$). Sei ψ ein stationärer Zustand mit bestimmten Wert von f . Dann kann ψ keinen bestimmten Wert von g haben, somit ist $\hat{g}\psi$ nicht proportional ψ , aber trotzdem Eigenfunktion des Hamilton-Operators zum selben Eigenwert E : $\hat{H}(\hat{g}\psi) = \hat{g}\hat{H}\psi = E(\hat{g}\psi)$. Zu E gibt es also mehr als eine Eigenfunktion, d.h. das Niveau ist entartet.

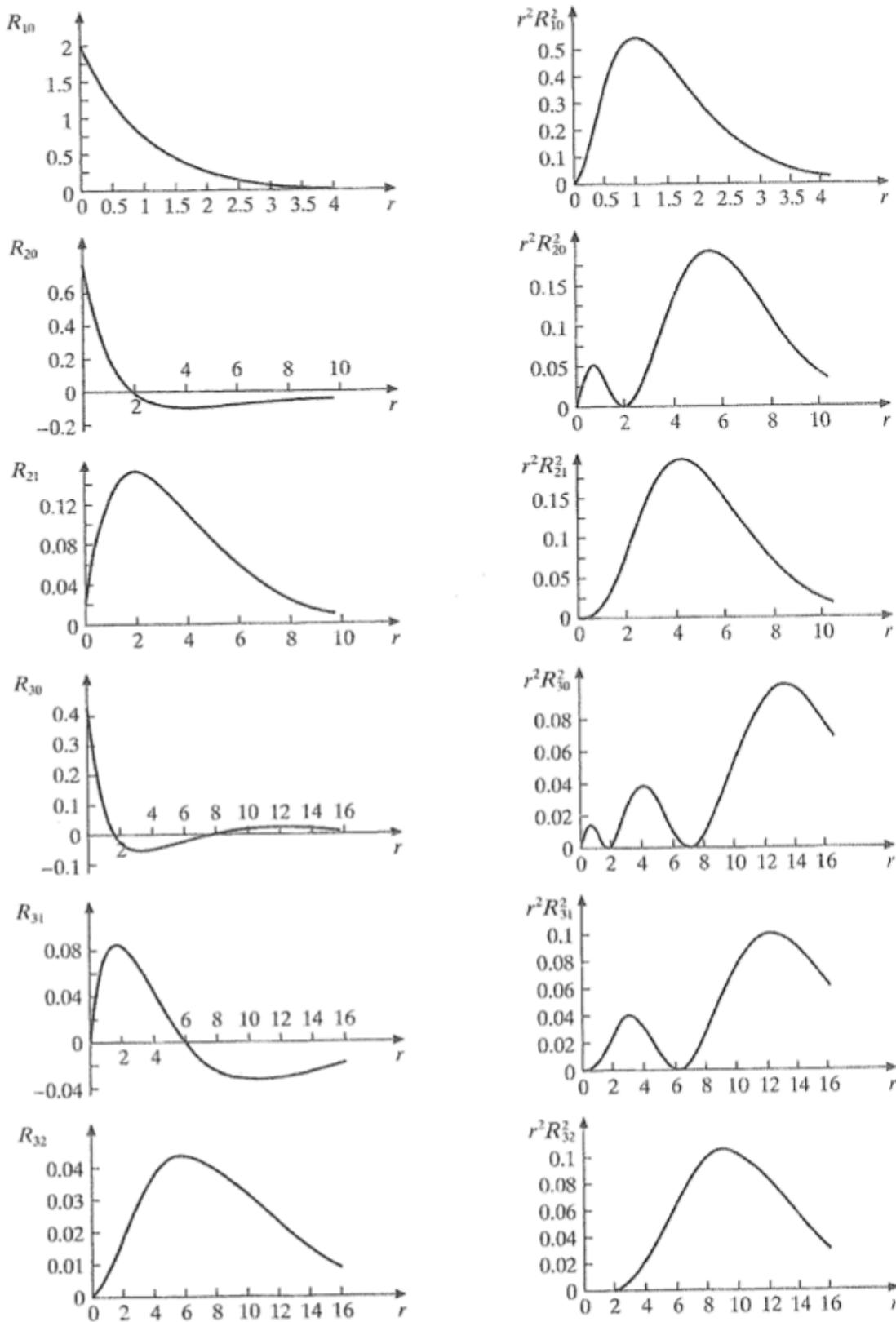


Abbildung 1.4: Radialteil der Wellenfunktionen $R_{nl}(r)$ und radial Verteilungsfunktion $r^2 R_{nl}(r)^2$ für das H-Atom (Quelle [BJP03]).

Ein-Elektronenatome

Shell	<i>Quantum numbers</i>	<i>Spectroscopic notation</i>	<i>Wave function $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$</i>	
	n	l	m	
K	1	0	0	$1s$ $\frac{1}{\sqrt{\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} \exp(-Zr/a_\mu)$
L	2	0	0	$2s$ $\frac{1}{2\sqrt{2\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (1 - Zr/2a_\mu) \exp(-Zr/2a_\mu)$
	2	1	0	$2p_0$ $\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (Zr/a_\mu) \exp(-Zr/2a_\mu) \cos \theta$
	2	1	± 1	$2p_{\pm 1}$ $\mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (Zr/a_\mu) \exp(-Zr/2a_\mu) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$
M	3	0	0	$3s$ $\frac{1}{3\sqrt{3\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (1 - 2Zr/3a_\mu + 2Z^2r^2/27a_\mu^2) \exp(-Zr/3a_\mu)$
	3	1	0	$3p_0$ $\frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (1 - Zr/6a_\mu) (Zr/a_\mu) \exp(-Zr/3a_\mu) \cos \theta$
	3	1	± 1	$3p_{\pm 1}$ $\mp \frac{2}{27\sqrt{\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (1 - Zr/6a_\mu) (Zr/a_\mu) \exp(-Zr/3a_\mu) \sin \theta \exp(\pm i\phi)$
	3	2	0	$3d_0$ $\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (Z^2r^2/a_\mu^2) \exp(-Zr/3a_\mu) (3 \cos^2 \theta - 1)$
	3	2	± 1	$3d_{\pm 1}$ $\mp \frac{1}{81\sqrt{\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (Z^2r^2/a_\mu^2) \exp(-Zr/3a_\mu) \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\phi)$
	3	2	± 2	$3d_{\pm 2}$ $\frac{1}{162\sqrt{\pi}} (Z/a_\mu)^{3/2} (Z^2r^2/a_\mu^2) \exp(-Zr/3a_\mu) \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\phi)$

Abbildung 1.5: Die vollständig normierten Wasserstoff-Wellenfunktionen entsprechend der ersten drei Schalen in üblichen Einheiten (Quelle [BJP03]).

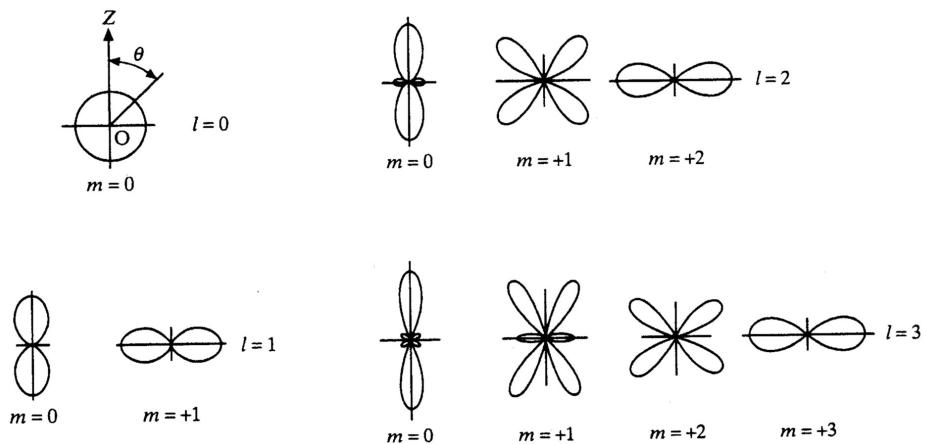


Abbildung 1.6: Polare Darstellungen der Wahrscheinlichkeitsverteilungen $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 = (2\pi)^{-1} |\Theta_{lm}(\vartheta)|^2$. Wie man erwarten würde ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit maximal orthogonal zur Richtung des Drehimpulses (Quelle [BJP03]).

2

Feinstruktturniveaus des Wasserstoffatoms

Die bisherige Beschreibung des Wasserstoffatoms mit der nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung beschreibt die beobachtbaren Spektralsterme hinreichend gut für einfache Spektalapparate. Bei steigender spektroskopischer Auflösung werden eine Reihe feinerer Effekte sichtbar. Es zeigt sich, dass bei Wasserstoff und vielen anderen Atomen bei allen Spektrallinien Doppellinien (Doublets) auftreten.

Als physikalische Ursache der Feinstruktur ergibt sich der Spin des Elektrons sowie relativistische Korrekturen. Ein Hinweis auf den Elektronenspin ergibt sich aus dem

- **Stern-Gerlach Experiment**

Hierbei wird ein Strahl elektrisch neutraler Silberatome im Vakuum durch ein stark inhomogenes Magnetfeld geschickt und anschließend auf einer Photoplatte registriert (siehe Abbildung 2.1). Das Potential eines magnetischen Momentes im Magnetfeld ist

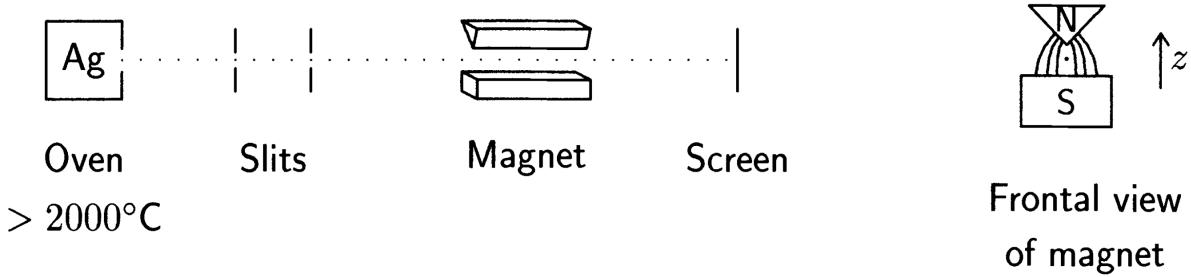


Abbildung 2.1: Der experimentelle Aufbau des Stern-Gerlach Experiments (Quelle [Sch03]).

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} . \quad (2.1)$$

Dort wo der Strahl den Magneten passiert ist das Magnetfeld in z -Richtung orientiert und die Silberatome propagieren in y -Richtung. Die Larmor-Präzession von $\boldsymbol{\mu}$ um die z -Achse ist so groß, dass lediglich zeitgemittelte Wert eine Rolle spielen. Im Zeitmittel verschwinden jedoch μ_x und μ_y und somit bleibt für das zeitgemittelte Potential

$$\langle U \rangle = -\mu_z B_z . \quad (2.2)$$

Für die Kraft ergibt sich somit

$$\mathbf{F} = -\nabla \langle U \rangle = \mu_z \nabla B_z . \quad (2.3)$$

Unter Vernachlässigung von Randeffekten verändert sich das Magnetfeld in y -Richtung nicht, somit gilt $\frac{\partial B_z}{\partial y} = 0$. Aus Symmetriegründen verschwindet $\frac{\partial B_z}{\partial x} = 0$ ebenfalls entlang des Atomstrahls. Somit verbleibt als einzige nichtverschwindende Kraftkomponente

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (2.4)$$

Aufgrund der hohen Temperatur sollten die magnetischen Momente der Silberatome gleichförmig in alle Richtungen orientiert sein, d.h. die Verteilung von μ_z sollte gleichförmig zwischen $-\mu$ und $+\mu$ sein. Nachdem der Strahl für einige Zeit gelaufen ist sollte die Verteilung am Schirm erwartungsgemäß wie in Abbildung 2.2 links aussehen.



Abbildung 2.2: **Links:** Erwartete Verteilung der Atome am Schirm. **Rechts:** Tatsächlich gemessene Verteilung der Atome am Schirm (Quelle [Sch03]).

Stattdessen wurde die Verteilung wie in Abbildung 2.2 rechts gefunden, d.h. auf der Platte erscheinen zwei in Richtung des Feldgradienten getrennte Flecke. Das Experiment zeigt also, dass es nur zwei diskrete Werte von μ_z gibt!

Würde μ_z vom Bahndrehimpuls der Elektronen herrühren, müsste es $2l + 1$, also eine ungerade Anzahl von Werten geben. (1927 führten *T. E. Phipps* und *J. B. Taylor* das Experiment mit einem neutralen Wasserstoff-Atomstrahl durch mit demselben Resultat. Im Grundzustand ist $l = 0$, was nur einen Wert ergeben dürfe!) Somit wurde von *George E. Uhlenbeck* und *Samuel A. Goudsmit* 1925 (und zuvor unpubliziert von *Ralph Kronig*) dem Elektron ein innerer Drehimpuls zugeschrieben. Man nennt diesen **Spin** mit Quantenzahl s . Damit das Stern-Gerlach-Experiment zwei Werte ergibt, muss gelten:

$$2s + 1 = 2 \quad \text{und daraus} \quad s = \frac{1}{2}. \quad (2.5)$$

- Ein weiterer Hinweis auf den Elektronenspin ist die bereits erwähnte Dublett-Aufspaltung speziell von Atomen mit nur einem Valenzelektron (insbesondere Alkalimetalle) für $l \neq 0$.
- Der Zeeman-Effekt liefert einen weiteren Hinweis auf die Existenz des Spins. Dabei kommt es zur Aufhebung der m -Entartung im externen Magnetfeld mit meist gerader Anzahl an Energietermen (normaler Zeeman-Effekt durch Bahnmagnetismus mit ungerader Anzahl an Energietermen).

2.1 Der Spin

Bereits in der klassischen Mechanik als auch in der Quantenmechanik ergibt sich die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses als Konsequenz der Isotropie des Raumes. Das weist auf den Zusammenhang zwischen Drehimpuls und Symmetrieeigenschaften bei Drehungen hin. In der Quantenmechanik wird dieser Zusammenhang zwischen Drehimpuls und Symmetrieeigenschaften bei Drehungen noch weiter vertieft. Er wird wesentlich zum Grundgehalt des Drehimpulsbegriffes, da die klassische Definition $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ ihren unmittelbaren Sinn verliert, weil Ortsvektor und Impuls nicht gleichzeitig gemessen werden können.¹

Betrachten wir ein ruhendes zusammengesetztes Teilchen (beispielsweise einen Atomkern) mit einem bestimmten inneren Zustand. Neben einer inneren Energie müssen wir dem Teilchen auch einen inneren Drehimpuls zuschreiben der von der inneren Bewegung stammt.² D.h. für die Bewegung des zusammengesetzten Teilchens müssen wir ihm neben den Ortskoordinaten noch die Projektion des inneren Drehimpulses auf eine ausgewählte Raumrichtung als diskrete Variable zuordnen.

Für obige Begriffsbildung ist es unwesentlich woher dieser Drehimpulses stammt und man gelangt so natürlich zum „Eigen“-Drehimpuls, der dem Teilchen zugeordnet werden muss unabhängig davon ob es „elementar“ oder „zusammengesetzt“ ist.

In der Quantenmechanik muß man jedem Elementarteilchen einen Eigendrehimpuls, den man auch **Spin** nennt, zuschreiben. Dieser ist nicht mit der Bahnbewegung verknüpft. Im Unterschied zum Spin nennt man den mit der Bahnbewegung verknüpften Drehimpuls den **Bahndrehimpuls**. Der Spin ist eine spezifisch quantenmechanische Eigenschaft, die im klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet und somit prinzipiell keine klassische Interpretation zuläßt. Es kann sich dabei um ein Elementarteilchen handeln oder ein zusammengesetztes Teilchen das sich bei bestimmten Erscheinungen wie ein elementares Teilchen verhält (z.B. der Atomkern in der Atomphysik).

Für Teilchen mit nichtverschwindendem Spin muss die Wellenfunktion nicht nur die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Raum angeben sondern auch die Wahrscheinlichkeit mit der ein gewisser Wert der Spinprojektion eingenommen wird. Somit wie die Wellenfunktion wie folgt erweitert

$$\psi(x, y, z) \quad \longrightarrow \quad \psi(x, y, z; \sigma),$$

mit der diskreten **Spinvariablen** σ , die einen beschränkten Satz diskreter Werte durchläuft und den Wert der Spinprojektion auf eine ausgezeichnete Raumrichtung (die z -Achse) angibt. Die $\psi(x, y, z; \sigma)$ sind ein Satz von verschiedenen Ortsfunktionen, auch **Spinkomponenten** der Wellenfunktion genannt. Es gibt

$$\int |\psi(x, y, z; \sigma)|^2 dV,$$

¹ Anders ausgedrückt beim Übergang zur Quantentheorie ist es nicht möglich auf simultane Eigenfunktionen des Ortes und Impulses zu kommen und damit des Drehimpulses. Nichtsdestotrotz kann man natürlich einen Drehimpulsoperator definieren indem man \mathbf{r} und \mathbf{p} der klassischen Drehimpuls Definition durch Operatoren ersetzt.

²Der Betrag des Drehimpulses sei L , er kann somit $2L + 1$ verschiedene Orientierungen im Raum haben.

die Wahrscheinlichkeit an, dass das Teilchen den bestimmten Wert σ hat. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem Volumenelement dV bei beliebigem Wert von σ ist

$$\sum_{\sigma} |\psi(x, y, z; \sigma)|^2 dV .$$

Man kann somit einen Spinoperator $\hat{\mathbf{s}}$ einführen, welcher nur auf die Spinvariable σ wirkt, wenn er auf die Wellenfunktion angewendet wird. Man kann sich das Teilchen im Koordinatenursprung vorstellen. Dann wirken Drehungen des Koordinatensystems nur auf die Spinvariable, da sich die Ortskoordinaten des Teilchens nicht ändern. Die Vertauschungsrelationen der Spinoperatoren kann man sich folgendermaßen überlegen.

Es zeigt sich, dass der Drehimpulsoperator im Wesentlichen gleich dem Operator für eine infinitesimale Drehung ist. Der Bahndrehimpulsooperator wirkt dabei auf Ortsfunktionen. Für den Spinoperator macht dies keinen Sinn, da er nicht auf die Ortskoordinaten wirkt. Wir betrachten stattdessen ganz allgemein Drehungen des Koordinatensystems. Die Differenz einer infinitesimalen Rotation $\delta\varphi$ um die y -Achse und anschließend $\delta\varphi$ um die x -Achse von der umgekehrten Reihenfolge entspricht einer Drehung um $\delta\varphi^2$ um die z -Achse usw. Daraus folgen ganz allgemein die Drehimpulskommutatoren, welche für den Bahndrehimpuls wie auch den inneren Drehimpuls (Spin) gelten müssen. Wir erhalten somit auch für den Spin die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{s}_k . \quad (2.6)$$

Es folgen wieder wie beim Bahndrehimpuls alle daraus resultierenden physikalischen Folgerungen. Z.B. folgt für die Eigenwerte des Quadrates des Spins

$$\mathbf{s}^2 = s(s+1)\hbar^2 . \quad (2.7)$$

Die z -Komponente durchläuft wieder die Werte

$$s\hbar, (s-1)\hbar, \dots, -s\hbar ,$$

das sind $2s + 1$ Werte. Somit hat auch die Wellenfunktion für ein Teilchen mit Spin s insgesamt $2s + 1$ Komponenten.³ Im Unterschied zum Bahndrehimpuls kann s jedoch ganz- oder halbzahlig sein.⁴ Der Gesamtdrehimpuls \mathbf{j} eines Teilchens ergibt sich durch Addition von Spin \mathbf{s} und Bahndrehimpuls \mathbf{l}

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s} .$$

Die zugehörigen Operatoren wirken auf unterschiedliche Veränderliche und vertauschen natürlich miteinander. Die Eigenwerte des Gesamtdrehimpulsoperators erhält man nach dem

³Für jede Teilchenart ist s fix vorgegeben. Beispielsweise haben Elektronen, Protonen und Neutronen Spin $1/2$, während das Higgs Boson Spin 0 hat. Im Grenzübergang zur klassischen Mechanik ($\hbar \rightarrow 0$) verschwindet somit der Spin-Drehimpuls $\hbar s$. Für den Bahndrehimpuls gibt es allerdings einen nichtverschwindenden klassischen Limes, hierbei streben $\hbar \rightarrow 0$ und $l \rightarrow \infty$, sodaß $\hbar l$ endlich bleibt.

⁴Beim Bahndrehimpuls folgte aus $\hat{l}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$ und der Eindeutigkeit der entsprechenden Eigenfunktion, dass l nur ganzzahlig sein kann.

Vektormodell genauso wie die Summe der Bahndrehimpulse zweier Teilchen. Für gegebene Werte l und s kann j die Werte $l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$ annehmen.⁵ Der Operator für den Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} mehrerer Teilchen ist die Summe der Operatoren \mathbf{j} der einzelnen Teilchen, sodaß seine Werte wieder nach dem Vektormodell bestimmt werden. Man kann \mathbf{J} wie folgt darstellen

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad \mathbf{L} = \sum_a \mathbf{l}_a, \quad \mathbf{S} = \sum_a \mathbf{s}_a.$$

Hierbei ist \mathbf{S} der **Gesamtspin** und \mathbf{L} der **gesamte** (oder **resultierende**) **Bahndrehimpuls**. Natürlich gelten für \mathbf{j} wie auch \mathbf{J} dieselben Vertauschungsrelationen wie für Bahndrehimpuls und Spin, denn diese Beziehungen sind die allgemeinen Vertauschungsregeln für einen beliebigen Drehimpuls, mit allen daraus resultierenden physikalischen Folgerungen.

Für den Spezialfall $s = 1/2$ kann man den Spinoperator mittels zweireihiger Matrizen angeben. Der Spinoperator $\hat{\mathbf{s}}$ ist

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (2.8)$$

mit den Pauli-Matrizen⁶

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Einige wichtige Eigenschaften der Pauli-Matrizen wollen wir nun angeben. Es gilt

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k, \quad (2.10)$$

womit man zeigen kann

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k, \quad (2.11)$$

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}. \quad (2.12)$$

Weiters gelten die Spur-Beziehungen

$$Sp(\hat{\sigma}_i) = 0, \quad (2.13)$$

$$Sp(\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j) = 2\delta_{ij}. \quad (2.14)$$

Für die Spineigenfunktionen $\chi(\sigma)$ gilt ($\sigma = \pm 1/2$)

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}^2 \chi(\sigma) &= \frac{3}{4} \hbar^2 \chi(\sigma), \\ \hat{s}_z \chi(\sigma) &= \sigma \hbar \chi(\sigma). \end{aligned} \quad (2.15)$$

⁵Beispielsweise kann ein Elektron (Spin 1/2) den Gesamtdrehimpuls $j = l \pm 1/2$ haben für $l \neq 0$ sowie $j = 1/2$ für $l = 0$.

⁶Die Spinvariablen und Pauli-Matrizen sollten nicht verwechselt werden können, da letztere mit einem $\hat{\cdot}$ gekennzeichnet sind.

Explizit in Matrixschreibweise haben wir⁷

$$\chi(1/2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi(-1/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

mit der Orthonormalität

$$\chi^\dagger(\sigma) \chi(\sigma') = \delta_{\sigma\sigma'} . \quad (2.17)$$

Somit gilt für eine allgemeine Spinfunktion

$$\chi = \alpha \chi(1/2) + \beta \chi(-1/2) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} . \quad (2.18)$$

Die Wellenfunktion nimmt im Matrizenformalismus die Form

$$\psi = \psi(x, y, z; 1/2) \chi(1/2) + \psi(x, y, z; -1/2) \chi(-1/2) = \begin{pmatrix} \psi(x, y, z; 1/2) \\ \psi(x, y, z; -1/2) \end{pmatrix} , \quad (2.19)$$

an.

Der Hamilton-Operator der nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung für das Coulomb-feld wirkt nicht auf den Spin. Daher faktorisiert die Wellenfunktion⁸

$$\psi(x, y, z; \sigma) = \varphi(x, y, z) \chi(\sigma) . \quad (2.20)$$

Es kommt somit zusätzlich zur Coulomb-Entartung in l auch noch zur Entartung bzgl. der Spinprojektion σ . Wie wir sehen werden, heben relativistische Korrekturen (Spin-Orbit Kopplung) diese Faktorisierung wieder auf.

2.2 Relativistische Korrekturterme

Für die Beschreibung relativistischer Effekte benötigt man streng genommen die **Dirac-Gleichung**, deren detaillierte Behandlung über den Rahmen dieser Vorlesung hinausgeht.

Die relativistischen Korrekturen sind im Allgemeinen klein. Somit entwickelt man die Dirac-Gleichung nur im äußeren elektrischen Feld ($\mathbf{A} = \mathbf{0}$) nach Potenzen von $1/c$ und erhält dadurch die Schrödinger-Gleichung in niedrigster Ordnung sowie die relativistischen Korrekturterme in der nächsthöheren Ordnung $1/c^2$. Hier geben wir das Resultat für den Hamilton-Operator in üblichen Koordinaten wieder⁹ (die Herleitung findet sich in *Appendix C.2*)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} - \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_e^3 c^2}}_{[1]} + \underbrace{\frac{e\hbar}{4m_e^2 c^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}}}_{[2]} + \underbrace{\frac{e\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla \cdot \mathbf{E}}_{[3]} . \quad (2.21)$$

⁷Genauer müsste man schreiben $\chi(1/2) = \psi(x, y, z; 1/2) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (und analog für $\chi(-1/2)$), da sie die Gleichungen (2.15) erfüllen. In Gleichung (2.16) sind die in diesem Zusammenhang unwesentlichen, nur von den Ortskoordinaten abhängigen Faktoren $\psi(x, y, z; 1/2)$ und $\psi(x, y, z; -1/2)$ weggelassen worden.

⁸Anders ausgedrückt ist in diesem Fall $\psi(x, y, z; 1/2) = \psi(x, y, z; -1/2) = \varphi(x, y, z)$ und die Wellenfunktion nimmt im Matrizenformalismus die Form an $\psi = \varphi(x, y, z) \chi(1/2) + \varphi(x, y, z) \chi(-1/2) = \begin{pmatrix} \varphi(x, y, z) \\ \varphi(x, y, z) \end{pmatrix}$.

⁹Der Einfluss der Mitbewegung des Kerns auf diese Korrekturen ist ein Effekt höherer Ordnung, den wir hier vernachlässigen, d.h. anstatt der reduzierten Masse verwenden wir nun die Elektronenmasse.

Die letzten drei Terme sind die gesuchten Korrekturen der Ordnung $1/c^2$, die wir nun besprechen wollen.

[1] Relativistische Korrektur zur kinetischen Energie

Dieser Term ergibt sich automatisch bei der entsprechenden Herleitung aus der Dirac-Gleichung (siehe *Appendix C.2*). Ein analoger Term erscheint auch ausserhalb der Quantentheorie in der relativistischen Mechanik als Korrektur zur kinetischen Energie. Er ergibt sich wie folgt

$$E = c \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2 - m_e c^2} \quad (2.22)$$

$$\simeq \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2}. \quad (2.23)$$

Wir sehen der erste Term ist die klassische kinetische Energie. Sie ist der einzige Beitrag der im klassischen Limes $c \rightarrow \infty$ besteht. Der zweite Term ist der erste relativistische Korrekturterm, der als Operator einen Beitrag zur Feinstruktur liefert. Natürlich gibt es unendlich viele Korrekturterme noch höherer Ordnung, deren Beitrag vernachlässigt wird.

[2] Spin-Bahn-Wechselwirkung

Dieser Term entspricht der Energie der Wechselwirkung eines bewegten magnetischen Moments mit einem elektrischen Feld.¹⁰

Entwickelt man die Dirac-Gleichung in einem äußenen elektromagnetischen Feld nach Potenzen von $1/c$, erhält man die **Pauli-Gleichung** mit dem Hamilton-Operator (die Herleitung findet sich in *Appendix C.2*)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e \Phi + \frac{e\hbar}{2m_e c} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.24)$$

Vergleichen wir dieses Resultat mit der potentiellen Energie eines magnetischen Moments im Magnetfeld¹¹

$$U = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_s^e \cdot \mathbf{B}, \quad (2.26)$$

folgt für das Elektron unmittelbar

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s^e = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (2.27)$$

¹⁰Magnetische Momente werden noch ausführlich in Kapitel 8 besprochen werden.

¹¹Wir wollen daran erinnern, dass die klassische potentielle Energie eines magnetischen Moments im Magnetfeld gegeben ist durch

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.25)$$

Verwenden wir die Energiekorrektur [2] mit dem magnetischen Moment des Elektrons $\hat{\mu}_s^e$ finden wir

$$\frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}} = -\frac{1}{2m_e c} \hat{\mu}_s^e \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (2.28)$$

Mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m_e$ entspricht das einer klassischen Energie in der Gestalt

$$-\frac{1}{2c} \mu_s^e \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{v}, \quad (2.29)$$

und somit tatsächlich der Energie der Wechselwirkung eines bewegten magnetischen Moments mit einem elektrischen Feld.¹²

Für ein kugelsymmetrisches Feld gilt

$$\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d\Phi}{dr}, \quad (2.30)$$

und mit der potentiellen Energie $U = -e\Phi$ kann dies wie folgt dargestellt werden

$$\mathbf{E} = \frac{1}{e} \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dU}{dr}. \quad (2.31)$$

Somit kann die Spin-Bahn-Wechselwirkung geschrieben werden als

$$\frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{e}{2m_e^2c^2} \hat{s} \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2m_e^2c^2r} \frac{dU}{dr} \hat{s} \cdot \hat{\mathbf{l}}. \quad (2.32)$$

[3] Darwin-Term

Dieser Term ist nur ungleich Null in den Punkten in denen sich die Ladungen befinden, welche das äußere Feld erzeugen. Für das Coulombfeld einer Punktladung Ze im Ursprung gilt $\Phi = \frac{Ze}{r}$ und somit

$$\Delta\Phi = -4\pi Ze \delta^{(3)}(\mathbf{r}), \quad (2.33)$$

und damit für den entsprechenden Energieterm

$$\frac{e\hbar^2}{8m_e^2c^2} \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{Ze^2\hbar^2\pi}{2m_e^2c^2} \delta^{(3)}(\mathbf{r}). \quad (2.34)$$

¹²Dieses Resultat kann auf den ersten Blick unnatürlich erscheinen. Denn im mit dem Teilchen mitbewegten Bezugssystem tritt ein Magnetfeld $\mathbf{B} = \frac{1}{c} \mathbf{E} \times \mathbf{v}$ auf, indem das magnetische Moment die Energie $-\mu_s^e \cdot \mathbf{B} = -\frac{1}{c} \mu_s^e \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{v}$ haben müsste. Letztere Überlegung berücksichtigt jedoch nicht, dass das mit dem Teilchen mitbewegte Bezugssystem kein Inertialssystem ist. Der fehlende Faktor 1/2 („Thomas-Faktor“, *Llewellyn Thomas*, 1926) ergibt sich bei korrekter Berücksichtigung der Relativitätstheorie. Unsere Herleitung aus der Dirac-Gleichung nach Appendix C.2 entspricht den allgemeinen Forderungen nach relativistischer Invarianz weshalb hier das korrekte Resultat mit dem Faktor 1/2 herauskommt.

2.3 Störungstheoretische Berechnung der Feinstrukturniveaus des Wasserstoffatoms

Nun berechnen wir die relativistischen Korrekturen zu den Energieniveaus eines Wasserstoffatoms, für ein Elektron im Coulomb-Feld eines festgehaltenen Kerns. Die Geschwindigkeit des Elektrons ist $v/c \sim \alpha \ll 1$, somit reicht die Störungstheorie mit den drei Störoperatoren [1], [2] und [3] sowie den nichtrelativistischen Wellenfunktionen des ungestörten Zustandes aus. Um etwas allgemeiner zu rechnen, nehmen wir im Kern die Ladung Ze , verlangen jedoch $Z\alpha \ll 1$. Die Störoperatoren haben wir nun auf die Form gebracht

$$\hat{V} = -\underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_e^3c^2}}_{[1]} + \underbrace{\frac{Z\alpha\hbar}{2m_e^2cr^3}\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}}}_{[2]} + \underbrace{\frac{Z\alpha\hbar^3\pi}{2m_e^2c}\delta^{(3)}(\mathbf{r})}_{[3]} . \quad (2.35)$$

Als nächstes ermitteln wir die Energiekorrektur gemäß der zeitunabhängigen Störungstheorie. In der Reihe

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots , \quad (2.36)$$

sind $E^{(0)}$ die Energieniveaus des ungestörten Problems, also die bereits bekannten Lösungen der Schrödinger-Gleichung in Gleichung (1.32). Die erste Korrektur zur Energie $E^{(1)}$ ergibt sich zu (siehe *Appendix C.3*)

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle = \overline{\hat{V}} , \quad (2.37)$$

d.h. der Mittelwert wird mit den Wellenfunktionen des ungestörten Problems ermittelt. Für das ungestörte Problem haben wir korrekterweise die reduzierte Masse m verwendet, während wir für den Störoperator der Einfachheit halber den Kern als unendlich schwer angenähert haben. Somit erscheint in \hat{V} die Elektronenmasse m_e anstatt der reduzierten Masse m . Daher ersetzen wir in \hat{V} nun m_e einfach durch m , was einer kleinen Korrektur einer kleinen Korrektur entspricht und somit bei der anvisierten Genauigkeit vernachlässigbar ist.

Wir besprechen nun einzeln die Beiträge der drei Störoperatoren.

[1] Wie bereits erwähnt, werden für die Berechnung des Mittelwertes die Eigenfunktionen der nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung verwendet. An sich müsste man hierbei die Säkulargleichung verwenden, da die Eigenfunktionen entartet sind. Bezüglich dem Operator [1] sind die Eigenfunktionen jedoch schon diagonal und wir können bereits so wie im Fall der nichtentarteten Störungstheorie vorgehen.

Aus der nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom in Coulomb-Einheiten

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \frac{1}{r} \right) \psi = E \psi , \quad (2.38)$$

erhalten wir¹³

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi = 2 \left(E + \frac{1}{r} \right) \psi , \quad (2.40)$$

und da $E = -\frac{1}{2n^2}$ (siehe Gleichung (1.29)) folgt

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi = \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{n^2} \right) \psi . \quad (2.41)$$

Als nächstes berechnen wir den Mittelwert von $\hat{\mathbf{p}}^4$, i.e.¹⁴

$$\int \psi^* \hat{\mathbf{p}}^4 \psi dV = \int \psi^* \left(\frac{4}{r^2} - \frac{4}{n^2 r} + \frac{1}{n^4} \right) \psi dV . \quad (2.42)$$

Das ergibt sofort

$$\overline{\hat{\mathbf{p}}^4} = 4 \overline{r^{-2}} - \frac{4}{n^2} \overline{r^{-1}} + \frac{1}{n^4} , \quad (2.43)$$

wobei wir die Norm der Wellenfunktion berücksichtigt haben. In Gleichung (1.39) haben wir bereits folgende Mittelwerte explizit angegeben

$$\overline{r^{-1}} = \frac{1}{n^2} , \quad \overline{r^{-2}} = \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} . \quad (2.44)$$

Für den Mittelwert von $\overline{\hat{\mathbf{p}}^4}$ in den üblichen Einheiten ergibt sich somit¹⁵

$$\overline{\hat{\mathbf{p}}^4} = (mZ\alpha c)^4 \left(\frac{4}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} - \frac{3}{n^4} \right) . \quad (2.45)$$

Für die Energieverschiebung aufgrund des Operators \hat{V}_1 finden wir somit in den üblichen Einheiten

$$E_1^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_1 | \psi^{(0)} \rangle = -\frac{\overline{\hat{\mathbf{p}}^4}}{8m^3c^2} , \quad (2.46)$$

¹³In den üblichen Einheiten entspricht das

$$\hat{\mathbf{p}}^2\psi = 2m \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi . \quad (2.39)$$

¹⁴Aus der Hermitezität von $\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{\mathbf{p}}^{2\dagger}$ (bzw. $\hat{\mathbf{p}}^{2T} = \hat{\mathbf{p}}^{2*}$) und mit $\hat{\mathbf{p}}^2\psi = \Phi = \left(\frac{2}{r} - \frac{1}{n^2} \right) \psi$ folgt

$$\int \psi^* (\hat{\mathbf{p}}^4 \psi) dV = \int \psi^* (\hat{\mathbf{p}}^2 \Phi) dV = \int \Phi (\hat{\mathbf{p}}^{2T} \psi^*) dV = \int \Phi (\hat{\mathbf{p}}^{2*} \psi^*) dV = \int \Phi (\hat{\mathbf{p}}^2 \psi)^* dV = \int \Phi \Phi^* dV ,$$

und somit Gleichung (2.42).

¹⁵Wir erinnern daran, dass beim Übergang einer Größe der Einheit Impuls⁴ von Coulomb- zu üblichen Einheiten mit einem Faktor $\left(\frac{mZe^2}{\hbar} \right)^4 = (mZ\alpha c)^4$ multipliziert werden muss.

und letztlich

$$E_1^{(1)} = -\frac{mc^2}{2} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (2.47)$$

[2] Die entarteten Eigenzustände, welche wir bislang verwendet haben sind nicht diagonal im Operator $\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}}$.¹⁶ Für die Berechnung des Erwartungswertes gehen wir zu einer anderen Basis über. Wir führen zuerst den Gesamtdrehimpuls $\hat{\mathbf{j}}$ ein

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (2.48)$$

Quadrieren liefert nun

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (2.49)$$

womit wir erhalten¹⁷

$$\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2). \quad (2.50)$$

Anstatt der alten Basis mit den Quantenzahlen n, l, m_l, σ hat die neue Basis die Quantenzahlen n, j, m_j, l . Der radiale Teil mit Quantenzahl n faktorisiert in beiden Basen.¹⁸ Der Operator $\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ ist in der neuen Basis diagonal, womit wir für den Eigenwert $\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$ ¹⁹ sofort finden

$$\mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) & \text{für } l \neq 0, \\ 0 & \text{für } l = 0. \end{cases}$$

Für den Erwartungswert von $\frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ gilt

$$\overline{\frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}} = \overline{r^{-3}} \overline{\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}, \quad (2.51)$$

er faktorisiert also in zwei separate Mittelwerte. In Gleichung (1.39) haben wir bereits folgenden Mittelwert für $l \neq 0$ explizit angegeben

$$\overline{r^{-3}} = \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1)}. \quad (2.52)$$

¹⁶Wir erinnern daran, dass die bislang verwendeten Zustände diagonal (d.h. Eigenzustände) bzgl. der Quadrate der Drehimpulse als auch deren z -Komponenten sind. Sie sind also diagonal bzgl. $\hat{s}_z \hat{l}_z$, nicht jedoch bzgl. $\hat{s}_x \hat{l}_x$ oder $\hat{s}_y \hat{l}_y$.

¹⁷ $\hat{\mathbf{j}}$ ist die neue Erhaltungsgröße da $[\hat{H}, \hat{\mathbf{j}}] = [\hat{V}, \hat{\mathbf{j}}] \propto [\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{j}}] = 0$. Analog zeigt man, dass $\hat{\mathbf{l}}^2$ und $\hat{\mathbf{s}}^2$ erhalten sind im Gegensatz zu $\hat{\mathbf{l}}$ und $\hat{\mathbf{s}}$.

¹⁸In der alten Basis war der Teil, welcher von l, m_l, σ abhängt $Y_{lm_l} \chi(\sigma)$.

¹⁹Für den Mittelwert $\overline{\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}$ gilt natürlich $\overline{\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}} = \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}$.

Für den Erwartungswert von $\frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ folgt damit letztlich²⁰

$$\frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \left(\frac{mZ\alpha c}{\hbar} \right)^3 \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + 1 \right)} & \text{für } l \neq 0, \\ 0 & \text{für } l = 0. \end{cases}$$

Für die Energieverschiebung aufgrund des Operators \hat{V}_2 finden wir somit in den üblichen Einheiten

$$E_2^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_2 | \psi^{(0)} \rangle = \overline{\frac{Z\alpha\hbar}{2m_e^2 c r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{l}}}, \quad (2.53)$$

und letztlich

$$E_2^{(1)} = \begin{cases} \frac{mc^2}{4} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \frac{1}{l \left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + 1 \right)} & \text{für } l \neq 0, \\ 0 & \text{für } l = 0. \end{cases}$$

[3] Hier verwenden wir wieder die alte Basis mit den Quantenzahlen n, l, m_l, σ und finden

$$\overline{\delta^{(3)}(\mathbf{r})} = |\psi_{nlm_l\sigma}(0)|^2. \quad (2.54)$$

Wir sehen aus Gleichung (1.36) sehen können, kommt ein nichtverschwindender Beitrag nur von $l = 0$, denn nur dann verschwindet die Wellenfunktion am Ursprung nicht aufgrund der Zentrifugalenergie. Wir haben in Coulomb-Einheiten

$$|\psi_{n00\sigma}(0)|^2 = R_{n0}^2(0) Y_{00}^2 \quad (2.55)$$

$$= \frac{1}{4\pi} R_{n0}^2 \quad (2.56)$$

$$= \frac{1}{\pi n^4} \frac{(n-1)!}{[n!]^3} (L_n^1(0))^2. \quad (2.57)$$

Aus Appendix A.2 finden wir

$$L_n^1(0) = -n e^z z^{-1} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} e^{-z} z^n \Big|_{z=0} = -nn!, \quad (2.58)$$

und erhalten somit wenn wir von Coulomb- zu den üblichen Einheiten übergehen²¹

$$|\psi_{n00\sigma}(0)|^2 = \frac{m^3 c^3 (Z\alpha)^3}{\hbar^3} \frac{1}{\pi n^3}, \quad (2.59)$$

²⁰Wir erinnern daran, dass beim Übergang einer Größe der Einheit Länge⁻³ von Coulomb- zu üblichen Einheiten mit einem Faktor $\left(\frac{mZe^2}{\hbar^2} \right)^3 = \left(\frac{mZ\alpha c}{\hbar} \right)^3$ multipliziert werden muss.

²¹Wir erinnern daran, dass die Dimension der Wellenfunktion Länge^{-3/2} ist. Das ergibt sich unmittelbar aus der Norm $\int |\psi|^2 dV = 1$. Beim Übergang einer Größe der Einheit Länge⁻³ (wie in diesem Fall $|\psi|^2$) von Coulomb- zu üblichen Einheiten muss mit einem Faktor $\left(\frac{mZe^2}{\hbar^2} \right)^3 = \left(\frac{mZ\alpha c}{\hbar} \right)^3$ multipliziert werden.

und weiters

$$\overline{\delta^{(3)}(\mathbf{r})} = \frac{m^3 c^3 (Z\alpha)^3}{\hbar^3} \frac{1}{\pi n^3} \delta_{l0}. \quad (2.60)$$

Für die Energieverschiebung aufgrund des Operators \hat{V}_3 finden wir somit in den üblichen Einheiten

$$E_3^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V}_3 | \psi^{(0)} \rangle = \frac{\overline{Z\alpha\hbar^3\pi}}{2m_e^2c} \delta^{(3)}(\mathbf{r}), \quad (2.61)$$

und letztlich

$$E_3^{(1)} = \frac{mc^2}{2} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \delta_{l0}. \quad (2.62)$$

[1]+[2]+[3] Zuletzt addiert man alle drei Terme [1],[2] und [3] um die gesamte Energieverschiebung

$$E^{(1)} = E_1^{(1)} + E_2^{(1)} + E_3^{(1)}, \quad (2.63)$$

zu erhalten. Man verwendet dabei $j = l \pm \frac{1}{2}$ für $l \neq 0$ und $j = \frac{1}{2}$ für $l = 0$, und findet nach mehreren einfachen Umformungen²²

$$E^{(1)} = -\frac{mc^2}{2} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (2.64)$$

Wir sehen, dass das Endresultat nur mehr von n und j abhängt. Die Abhängigkeit von l ist nicht mehr gegeben. Es gilt somit, dass die Energie gesenkt wird und zwar umso mehr, je kleiner n, j und je größer Z ist. Für die gesamte Energie finden wir somit²³

$$E^{(0)} + E^{(1)} = E^{(0)} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (2.65)$$

Bei der nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung für das Coulombfeld gibt es neben der Coulomb-Entartung in l auch eine Entartung bzgl. der Spinrichtung σ . Hier finden wir jedoch, dass die Spin-Bahn-Wechselwirkung die Entartung beinahe aufhebt. Es verbleiben noch zweifach entartete Niveaus mit gleichem n und j aber verschiedenen $l = j \pm \frac{1}{2}$ (dabei sind nur die Niveaus mit dem bei gegebenen n größtmöglichen Wert $j = j_{max} = l_{max} + \frac{1}{2} = n - \frac{1}{2}$ nicht entartet).

So ergibt sich folgende Reihenfolge der Wasserstoffniveaus

$$\begin{aligned} & 1s_{1/2}; \\ & \underbrace{2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}}; \\ & \underbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}}, \underbrace{3p_{3/2}, 3d_{3/2}}, 3d_{5/2}; \\ & \dots \end{aligned} \quad (2.66)$$

²²Das ergibt je nach Vorzeichen von j und verschwindenden oder nichtverschwindendem l drei Fallunterscheidungen. In allen drei Fällen ergibt sich dasselbe Endresultat.

²³Wir bemerken, dass es natürlich noch weitere Energiebeiträge höherer Ordnung gibt ($E^{(2)}, E^{(3)}, \dots$), die wir vernachlässigen da sie noch kleiner sind.

Feinstrukturniveaus des Wasserstoffatoms

Ein Niveau mit Hauptquantenzahl n spaltet in n Feinstrukturniveaus auf (siehe Abbildung 2.3).

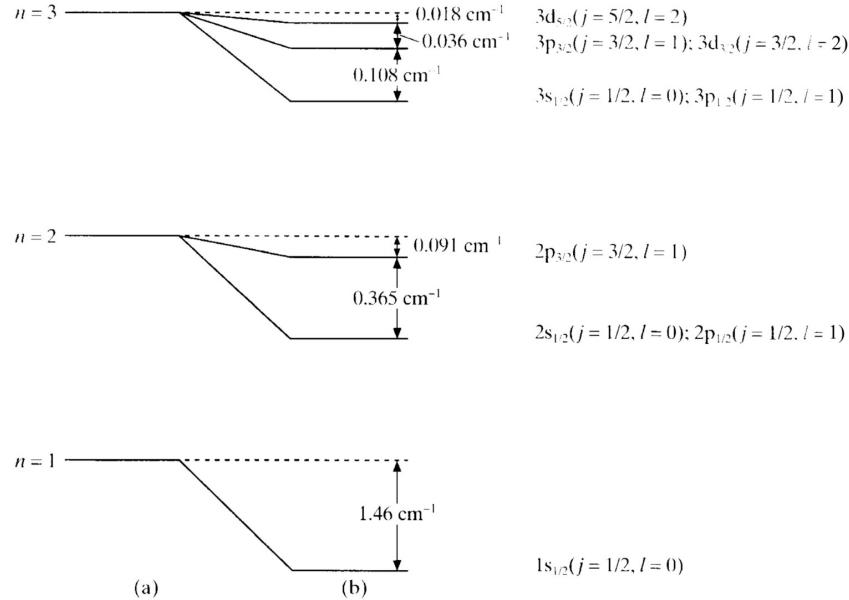


Abbildung 2.3: Feinstruktur des Wasserstoffatoms. Die nicht-relativistischen Niveaus werden in der linken Spalte gezeigt (a) und die aufgespaltenen Niveaus in der rechten Spalte (b) und zwar für $n = 1, 2$ und 3 . Zur besseren Verständlichkeit ist die Skalierung in jedem Diagramm unterschiedlich (Quelle [BJP03]).

In Abbildung 2.4 sind die einzelnen Beiträge der drei besprochenen Terme detailliert. Ähnlich

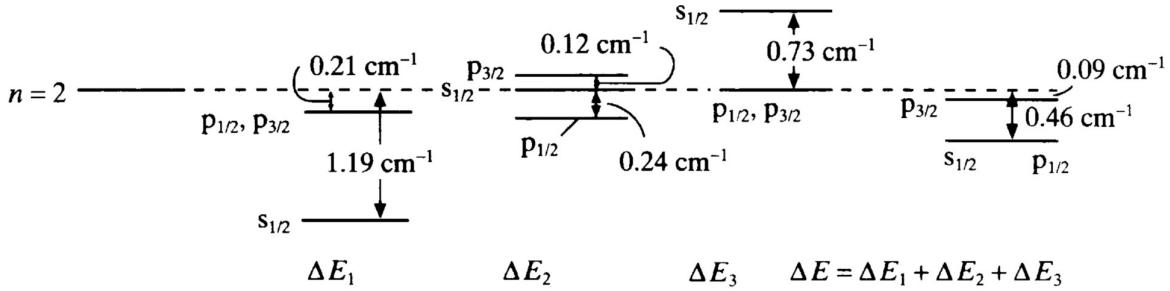


Abbildung 2.4: Die Beiträge ΔE_1 , ΔE_2 , ΔE_3 der Aufspaltung des $n = 2$ Niveaus des Wasserstoffatoms (Quelle [BJP03]).

zum nicht-relativistischen Fall gibt es auch im relativistischen Fall eine Erhaltungsgröße analog dem Laplace-Runge-Lenz-Vektor, welche für die verbleibende zweifache Entartung verantwortlich ist. Sogenannte **Strahlungskorrekturen** (**Lamb-Verschiebung** oder **Lamb-Shift**), die in der Dirac-Gleichung für das Einelektronenproblem nicht berücksichtigt werden, heben diese verbleibende Entartung letztlich auf (Abbildung 2.5).

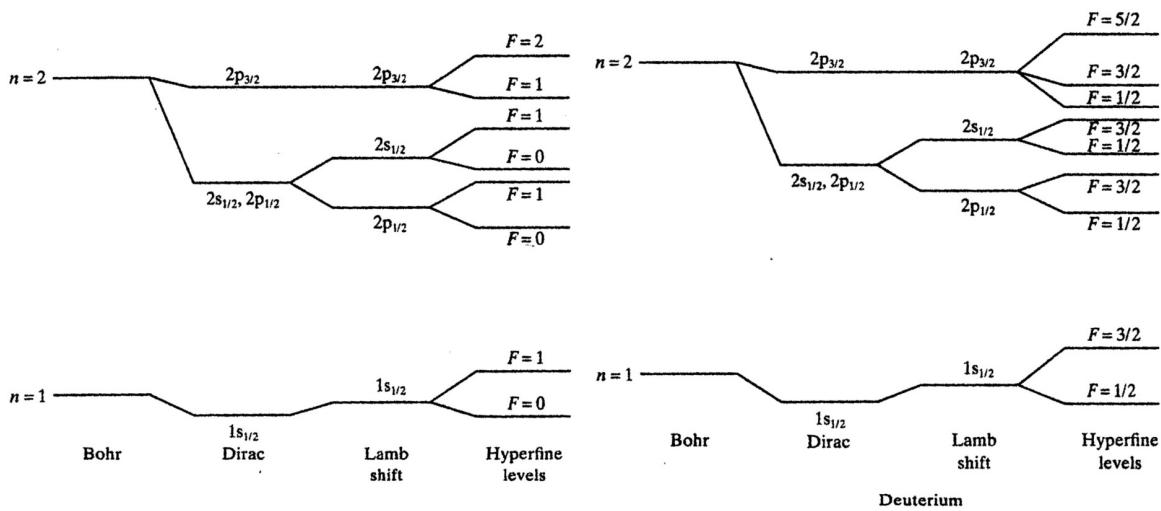


Abbildung 2.5: Niveaupartung der $n = 1$ und $n = 2$ Niveaus im Wasserstoff und Deuterium. Die Aufspaltungen sind nicht maßstabsgerecht sondern von der linken Seite des Diagramms zur rechten Seite hin vergrößert (Quelle [BJP03]).

3

Isotopieverschiebung und Hyperfeinstruktur

3.1 Isotopieverschiebung

Die spezifischen Eigenschaften der Kerne (endliche Masse, Ausdehnungen, Spin) unterscheiden sich von den festen punktförmigen Kraftzentren eines Coulomb-Felds, die wir bislang für die Beschreibung der Atomkerne verwendet haben. Dieser Unterschied wirkt sich auf die Energieniveaus der Atomelektronen aus.

Ein solcher Effekt ist die sogenannte Isotopieverschiebung der Niveaus, das ist die Änderung der Energieniveaus von einem Isotop eines Elementes zu einem anderen. Von Interesse ist hierbei nicht die Energieänderung eines Niveaus, sondern die Änderung der Differenzen zwischen den Niveaus, die als Spektrallinien beobachtet werden. Deshalb braucht man nicht die Energie der ganzen Elektronenhülle eines Atoms betrachten, sondern nur denjenigen Teil, in welchem sich das Elektron, das an dem betreffenden Spektralübergang beteiligt ist, befindet.¹

In **leichten Atomen** ist die Hauptursache der Isotopieverschiebung die endliche Kernmasse. Man geht zuerst von einem Atom mit unendlich schweren Kern aus und betrachtet die Kernbewegung als Störung mit dem Operator²

$$\hat{V} = \frac{1}{2M} \left(\sum_i \hat{\mathbf{p}}_i \right)^2, \quad (3.2)$$

wobei M die Kernmasse und $\hat{\mathbf{p}}_i$ die Elektronenimpulse sind. Die Isotopieverschiebung aufgrund

¹Dies führte zur Entdeckung des schweren Wasserstoffs Deuteriums. Man fand zu jeder Linie im Spektrum des Wasserstoffs einen Begleiter. Die entsprechende Intensität war dem jeweiligen Gehalt an Deuterium proportional.

²Im Massenmittelpunktsystem des Atoms ist die Summe aus Kernimpuls und der Elektronenimpulse gleich Null: $\mathbf{p}_K + \sum_i \mathbf{p}_i = \mathbf{0}$. Daher gilt für die gesamte kinetische Energie

$$\frac{\mathbf{p}_K^2}{2M} + \frac{1}{2m_e} \sum_i \mathbf{p}_i^2 = \frac{1}{2M} \left(\sum_i \mathbf{p}_i \right)^2 + \frac{1}{2m_e} \sum_i \mathbf{p}_i^2. \quad (3.1)$$

dieses Effektes wird in erster Ordnung Störungstheorie durch den Mittelwert³

$$\boxed{\Delta E_1 - \Delta E_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right) \overline{\left(\sum_i \hat{\mathbf{p}}_i \right)^2},} \quad (3.3)$$

gegeben. Für die Mittelung verwendet man daher die Wellenfunktionen, die sich für den entsprechenden Atomzustand mit unendlich schwerem Kern ergeben (Die Indizes 1 und 2 beziehen sich auf die jeweiligen Isotope).

Für den sehr einfachen Spezialfall eines Atoms mit nur einem Elektron haben wir diesen Effekt der endlichen Kernmasse bereits vollständig berücksichtigt, indem wir das entsprechende Zweikörperproblem gelöst haben. Für die entsprechenden Energieniveaus haben wir in Gleichung (1.32) den folgenden Ausdruck gefunden⁴

$$E = -\frac{mc^2}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}. \quad (3.4)$$

Betrachten wir einen Kern mit A Nukleonen der Masse m_N so finden wir für die reduzierte Masse

$$m_A = \frac{Am_N m_e}{Am_N + m_e} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{Am_N}} \simeq m_e - \frac{m_e^2}{Am_N}. \quad (3.5)$$

Die relative Energieverschiebung zweier benachbarter Isotope mit A und $A+1$ Nukleonen ist daher

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{m_{A+1} - m_A}{m_A} \simeq \frac{m_e}{Am_N} - \frac{m_e}{(A+1)m_N} = \frac{m_e}{A(A+1)m_N}. \quad (3.6)$$

Der Effekt ist also am stärksten zwischen Wasserstoff ($A=1$) und Deuterium ($A=2$) und dort etwa $\Delta E/E \simeq m_e/(2m_N) \sim 1/4000$. Bei schwereren Kernen wird die relative Energieverschiebung zunehmend kleiner und nimmt für große A nach Gleichung (3.6) mit etwa $1/A^2$ ab.⁵

In **schweren Atomen** ist die endliche Kernausdehnung der Hauptbeitrag zur Isotopieverschiebung. Dieser Effekt ist praktisch nur für äußere Elektronen⁶ im s -Zustand merklich, da nur für sie die Wellenfunktion für $r \rightarrow 0$ nicht verschwindet, im Gegensatz zu Wellenfunktionen mit $l \neq 0$.⁷ Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein solches Elektron im „Kernvolumen“ ist deshalb relativ groß.⁸

³Wir bemerken, dass die Wellenfunktionen des ungestörten Systems, welche für die Mittelung verwendet werden, die Lösungen für einen unendlich schweren Kern sind. Deshalb sind die Mittelwerte $\overline{\left(\sum_i \hat{\mathbf{p}}_i \right)^2}$ für beide Isotope gleich.

⁴Natürlich können wir hier die Energiekorrekturen der Feinstruktur vernachlässigen, da dies wiederum nur eine kleine Korrektur einer kleinen Korrektur entspricht.

⁵Zwischen nichtbenachbarten Isotopen mit A und $A+n$ Nukleonen (wobei $n \geq 2$ ist) ist der Effekt natürlich noch stärker als bei unmittelbar benachbarten Isotopen.

⁶Wir betrachten äußere Elektronen da diese für die Spektroskopie besonders relevant sind.

⁷Wir werden die Wellenfunktionen von Atomen mit mehreren Elektronen im Kapitel 7 untersuchen. Wie dort gezeigt werden wird, ist das effektive Potential für die Elektronen in sehr guter Näherung kugelsymmetrisch. Somit können alle Resultate aus der Sektion 1.2 angewendet werden.

⁸In der folgenden Rechnung werden die relativistischen Effekte in der Elektronenbewegung nahe am Kern nicht berücksichtigt und sie gilt daher nur unter der Bedingung $Z\alpha \ll 1$.

Die Änderung der Elektronenenergie gegenüber dem Wert in einem Coulomb-Feld Ze/r ist gegeben durch⁹

$$\Delta E = -e \int \left(\varphi - \frac{Ze}{r} \right) \psi^2(r) dV , \quad (3.7)$$

wobei $\varphi(r)$ das tatsächliche elektrostatische Potential des Kernfeldes ist und nicht das Coulomb-Potential einer Punktladung Ze . Die Wellenfunktion des Elektrons ist $\psi(r)$ (im s -Zustand ist sie kugelsymmetrisch und reell¹⁰). Die Integration wird zwar formal über den ganzen Raum erstreckt, aber $\varphi - Ze/r$ ist tatsächlich nur innerhalb des Kernvolumens von Null verschieden. Die Wellenfunktion eines s -Zustandes strebt für $r \rightarrow 0$ gegen einen konstanten Grenzwert (siehe Gleichung (1.21)). Dieser Grenzwert wird praktisch schon ausserhalb des Kerns angenommen. Man kann somit ψ^2 aus dem Integral ziehen und $\psi(r)$ durch seinen Wert bei $r = 0$ ersetzen, der für das Coulomb-Feld einer Punktladung berechnet wird.¹¹

Umformen und verwenden der Identität $\Delta r^2 = 6$ ergibt

$$\begin{aligned} \Delta E &= -e \psi^2(0) \int \left(\varphi - \frac{Ze}{r} \right) dV \\ &= -\frac{1}{6} e \psi^2(0) \int \left(\varphi - \frac{Ze}{r} \right) \Delta r^2 dV \\ &= -\frac{1}{6} e \psi^2(0) \int r^2 \Delta \left(\varphi - \frac{Ze}{r} \right) dV . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Es wurde hierbei verwendet, dass der Oberflächenterm im Unendlichen verschwindet. Wir verwenden weiters, dass für alle r

$$\begin{aligned} \Delta \frac{1}{r} &= -4\pi\delta(\mathbf{r}) , \\ r^2\delta(\mathbf{r}) &= 0 . \end{aligned} \quad (3.9)$$

und nach der Poisson-Gleichung

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho , \quad (3.10)$$

mit ρ der Dichteverteilung der elektrischen Ladung im Kern gilt. Verwenden wir das in Gleichung (3.8) erhalten wir letztlich

$$\Delta E = \frac{2\pi}{3} \psi^2(0) Ze^2 \overline{r^2} , \quad (3.11)$$

⁹Das ergibt sich ganz einfach aus der Störungstheorie zur ersten Ordnung $\Delta E = E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle = \hat{V}$ mit dem Störoperator $\hat{V} = -e \left(\varphi - \frac{Ze}{r} \right)$.

¹⁰Die Kugelsymmetrie ergibt sich da die entsprechende Eigenfunktion proportional zur Kugelflächenfunktion Y_{00} ist und diese eine Konstante ist (also nicht von ϑ und ϕ abhängt). Der Bahndrehimpuls gibt auch die Änderung der Wellenfunktion bei Drehungen vor, für $l = 0$ bedeutet das keine Änderung und somit Kugelsymmetrie. Die Wellenfunktion wird komplex für nichtverschwindende Quantenzahl m , wie man aus den Kugelflächenfunktionen leicht heraus liest. Für den s -Zustand ist aber $m = 0$ und die Wellenfunktion somit reell.

¹¹Die Wellenfunktion für das Coulomb-Feld einer Punktladung entspricht gerade der Wellenfunktion des ungestörten Problems $|\psi^{(0)}\rangle$ in Fussnote 9.

mit

$$\overline{r^2} = \frac{1}{Ze} \int \rho r^2 dV , \quad (3.12)$$

als mittlerem Quadrat des Kernradius hinsichtlich der Protonen. Man findet leicht, dass bei homogener Protonenverteilung im Kern $\overline{r^2} = 3R^2/5$ bei einem geometrischen Kernradius R gilt. Die Isotopieverschiebung eines Niveaus ergibt sich als Differenz von Gleichung (3.11) für zwei Isotope (die Indizes 1 und 2 beziehen sich auf die jeweiligen Isotope)

$$\boxed{\Delta E_1 - \Delta E_2 = \frac{2\pi}{3} \psi^2(0) Ze^2 \left(\overline{r_1^2} - \overline{r_2^2} \right)} . \quad (3.13)$$

Unter Verwendung des in Kapitel 7 noch kurz zu besprechenden Thomas-Fermi-Modells kann man zeigen, dass für große Ordnungszahlen $\psi(0) \sim \sqrt{Z}$ und somit $\Delta E \sim R^2 Z^2$ gilt. Für Atome mit einem Elektron und homogener Protonenverteilung ergibt sich¹²

$$\left| \frac{\Delta E}{E} \right| \sim \frac{Z^2 R^2}{a_B^2 n} \sim \frac{Z^2}{a_B^2 n} r_N^2 Z^{2/3} \sim 10^{-10} \frac{Z^{8/3}}{n} .$$

3.2 Hyperfeinstruktur der Atomniveaus

Die Hyperfeinstruktur ist die Aufspaltung der Atomniveaus aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen mit dem Kernspin. Die entsprechenden Abstände der Niveaus sind viel kleiner als die Feinstrukturabstände. Die Hyperfeinstruktur muss daher für jede Feinstrukturkomponente getrennt behandelt werden.

Der Gesamtdrehimpuls eines Atoms (zusammen mit dem Kern) ist gegeben durch

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I} , \quad (3.14)$$

wobei \mathbf{J} der Gesamtdrehimpuls der Elektronenhülle eines Atoms ist und \mathbf{I} der Kernspin ist, welcher sich aus Bahndrehimpuls und Spin der Nukleonen zusammensetzt.¹³ Jede Hyperfeinstrukturkomponente wird durch einen bestimmten Wert für F gekennzeichnet. Gemäß der allgemeinen Additionsvorschriften für Drehimpulse nimmt F die Werte an

$$F = J + I, J + I - 1, \dots, |J - I| . \quad (3.15)$$

Jedes Niveau mit gegebenen J spaltet sich in

$$\begin{aligned} 2I + 1, & \quad \text{für } I < J , \\ 2J + 1, & \quad \text{für } J < I , \end{aligned} \quad (3.16)$$

¹²Für „exotische“ Atome wie myonischen Wasserstoff, der aus einem Proton und Myon besteht, ist der Effekt verstärkt. Das liegt daran, dass der entsprechende „Bohr-Radius“ a_B (der die reduzierte Masse beinhaltet) bedeutend kleiner ist, beim myonischen Wasserstoff etwa 200 Mal kleiner als für gewöhnlichen Wasserstoff.

¹³Der Kernspin wird noch ausführlich in Kapitel 8 besprochen werden.

Komponenten auf.¹⁴ Der mittlere Abstand der Elektronen im Atom ist groß gegenüber dem Kernradius. Die Hauptrolle bei der Hyperfeinstrukturaufspaltung spielt die Wechselwirkung der Elektronen mit den niedrigsten Kernmultipolmomenten. Diese sind das magnetische Dipol- und elektrische Quadrupolmoment (Wie in Kapitel 8 gezeigt werden wird, ist das mittlere elektrische Dipolmoment gleich Null).

Der Operator für magnetische Dipolwechselwirkung ist gegeben durch

$$\hat{V}_{IJ} = \frac{a}{\hbar^2} \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \quad (3.17)$$

(analog der Spin-Bahn-Wechselwirkung der Elektronen) wobei die Konstante a charakteristisch für den betreffenden (nicht durch die Hyperfeinstruktur aufgespaltenen) Term ist und somit von I und J , nicht jedoch von F , abhängt. Zur Berechnung der Energieverschiebung kann man ganz analog zur Spin-Bahn-Wechselwirkung vorgehen. Man müsste wieder die Säkulargleichung verwenden, allerdings kennen wir schon die Wellenfunktionen, in denen der Operator $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$ diagonal ist. Das sind die Wellenfunktionen mit bestimmten Werten von F . Bei der Mittelung in einem solchen Zustand kann man den Operator $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}$ durch seinen Eigenwert

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{\hbar^2}{2} (F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)), \quad (3.18)$$

ersetzen. Somit erhalten wir zu erster Ordnung Störungstheorie die Energieverschiebung

$$\Delta E = \overline{\hat{V}_{IJ}} = \frac{a}{2} (F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)). \quad (3.19)$$

Für alle Hyperfeinstrukturkomponenten eines Feinstrukturniveaus sind die Werte für I und J gleich, d.h. die letzten beiden Terme ergeben eine für alle Hyperfeinstrukturkomponenten gleiche Energieverschiebung. Allerdings sind wir nur an der relativen Niveauverschiebung der Hyperfeinstrukturkomponenten interessiert. Vernachlässigen wir diese konstante Energieverschiebung erhalten wir

$$\Delta E_F = \frac{a}{2} F(F+1). \quad (3.20)$$

Die Abstände zwischen benachbarten Komponenten (die durch die Zahlen F und $F-1$ bestimmt werden) ergeben die sogenannte **Intervall-Regel**¹⁵

$$\Delta E_F - \Delta E_{F-1} = aF. \quad (3.21)$$

Die Hyperfeinaufspaltung für Wasserstoff und Deuterium ist in Abbildung 2.5 wiedergegeben.

Die Wechselwirkung mit dem elektrischen Quadrupol (und damit auch die von ihr verursachte Niveauaufspaltung) ist etwa 15 mal kleiner, wir wollen sie hier nicht betrachten.

Der Effekt der magnetischen Hyperfeinstrukturaufspaltung ist für äußere Elektronen im s -Zustand besonders ausgeprägt, da diese eine große Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe haben.

¹⁴ Anders ausgedrückt ergeben sich die Hyperfeinstrukturniveaus durch die verschiedenen Möglichkeiten zwei konstante Drehimpulse \mathbf{I} und \mathbf{J} quantenmechanisch miteinander zu addieren. Diese Anzahl an Möglichkeiten ist gleich der Anzahl an Hyperfeinstrukturniveaus.

¹⁵ Bei der Intervall-Regel hätte sich die konstante Energieverschiebung ohnehin weggekürzt, d.h. man erhält sie auch unmittelbar aus Gleichung (3.19).

Als nächstes berechnen wir die Hyperfeinstrukturaufspaltung für ein Atom mit einem äußeren s -Elektron (*Enrico Fermi*, 1930). Dieses Elektron wird durch die kugelsymmetrische Wellenfunktion $\psi(r)$ für die Bewegung im **selbstkonsistenten Feld^a** der übrigen Elektronen und des Kerns beschrieben.^b Für ein Atom mit nur einem Elektron ist $\psi(r)$ die bereits bekannte Wellenfunktion (siehe Gleichung (1.35)).

Den Operator der Wechselwirkung zwischen Elektron und Kern setzen wir als $-\hat{\mu} \cdot \hat{B}$ an, wobei $\hat{\mu} = \mu \frac{\hat{\mathbf{I}}}{\hbar I}$ das magnetische Kernmoment und \hat{B} das Magnetfeld (im Koordinatenursprung) der Elektronen ist.^c Von der Elektrodynamik wissen wir

$$\hat{B} = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{j}}_e}{r^2} dV , \quad (3.22)$$

wobei $\hat{\mathbf{j}}_e$ der Stromdichteoperator für den Strom infolge des bewegten Elektronenspins und $\mathbf{r} = \mathbf{n} r$ der Ortsvektor vom Mittelpunkt zum Volumenelement dV ist. Der Stromdichteoperator $\hat{\mathbf{j}}_e$ ergibt sich aus dem Stromdichteoperator \mathbf{j} aus *Appendix C.2* (Gleichung (C.7)) folgendermassen $\chi^*(\sigma) \hat{\mathbf{j}}_e \chi(\sigma) = -e \mathbf{j}$.^d In unserem Fall ergibt sich die 2-komponentige Wellenfunktion in Gleichung (C.7) als $\varphi = \psi(r) \chi(\sigma)$, wobei $\psi(r)$ die s -Wellenfunktion ist. Wir erhalten unter Verwendung der Orthogonalität von χ

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m_e} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) + \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \psi^* \psi + \frac{\hbar}{2m_e} \nabla \times (\psi^2 \chi^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi) . \quad (3.23)$$

Da ψ reell ist^e und $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ ^f folgt sofort

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2m_e} \nabla \times (\psi^2 \chi^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \chi) , \quad (3.24)$$

und damit

$$\hat{\mathbf{j}}_e = -\frac{e\hbar}{2m_e} \nabla \times (\psi^2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}) . \quad (3.25)$$

Mit dem Bohrschen Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ lässt sich das wie folgt umformen^g

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}_e &= -\mu_B c \nabla \times (\psi^2 \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ &= -\frac{2\mu_B c}{\hbar} \nabla \times (\psi^2 \hat{\mathbf{s}}) . \end{aligned} \quad (3.26)$$

Mit

$$\begin{aligned} \nabla \times (\psi^2 \hat{\mathbf{s}}) &= (\nabla \psi^2(r)) \times \hat{\mathbf{s}} \\ &= \left(\frac{d\psi^2}{dr} \nabla r \right) \times \hat{\mathbf{s}} \\ &= \frac{d\psi^2}{dr} \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{s}} , \end{aligned} \quad (3.27)$$

ergibt sich

$$\hat{\mathbf{j}}_e = -\frac{2\mu_B c}{\hbar} \frac{d\psi^2}{dr} \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{s}} . \quad (3.28)$$

Für das Magnetfeld im Koordinatenursprung finden wir somit

$$\hat{\mathbf{B}} = \frac{1}{c} \int \frac{1}{r^2} \mathbf{n} \times \left(-\frac{2\mu_B c}{\hbar} \frac{d\psi^2}{dr} \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{s}} \right) dV . \quad (3.29)$$

Verwenden wir $\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{s}}) = \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}) - \hat{\mathbf{s}}$ und führen Kugelkoordinaten ein ($dV = r^2 dr d\Omega$) ergibt sich

$$\hat{\mathbf{B}} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \int_0^\infty \frac{d\psi^2}{dr} dr \int_{[4\pi]} (\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}) - \hat{\mathbf{s}}) d\Omega . \quad (3.30)$$

Für das Raumwinkelintegral erhalten wir^h

$$\int_{[4\pi]} (\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{s}}) - \hat{\mathbf{s}}) d\Omega = -\frac{8\pi}{3} \hat{\mathbf{s}} . \quad (3.34)$$

Für das Magnetfeld erhalten wir somitⁱ

$$\hat{\mathbf{B}} = -\frac{16\pi\mu_B}{3\hbar} \psi^2(0) \hat{\mathbf{s}} . \quad (3.35)$$

Somit finden wir letztlich für den Wechselwirkungsoperator $\hat{V}_{IS} = -\hat{\mu} \cdot \hat{\mathbf{B}}^j$

$$\boxed{\hat{V}_{IS} = \frac{16\pi\mu\mu_B}{3\hbar^2 I} \psi^2(0) \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}} . \quad (3.36)$$

Wenn der Gesamtdrehimpuls des Atoms $J = S = \frac{1}{2}$ ist, ergibt die Hyperfeinstrukturaufspaltung ein Dublett ($F = I \pm \frac{1}{2}$).^k Mit den Gleichungen (3.20) und (3.36) finden wir für den Abstand zwischen den beiden Niveaus eines Doublets

$$\boxed{E_{I+1/2} - E_{I-1/2} = a \left(I + \frac{1}{2} \right) \\ = \frac{8\pi}{3I} \mu\mu_B (2I+1) \psi^2(0)} . \quad (3.37)$$

Da wie bereits erwähnt wurde $\psi(0)$ proportional zu \sqrt{Z} ist, nimmt diese Aufspaltung proportional zur Ordnungszahl Z zu.^l

^aDie Methode des selbstkonsistenten Feldes wird in Kapitel 7 besprochen werden.

^bDie Rechnung setzt voraus, dass $Z\alpha \ll 1$ erfüllt ist (siehe Fußnote 8).

^cDas magnetische Kernmoment wird ausführlich in Kapitel 8.4.1 behandelt.

^dDer Faktor $-e$ ergibt sich, da \mathbf{j} eine Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist und somit noch mit der Ladung multipliziert werden muss um eine Ladungsstromdichte zu ergeben. Für $\hat{\mathbf{j}}_e$ wollen wir einen Operator im Spinraum aber nicht im Ortsraum. Daher muss nur mehr mit der Spinwellenfunktion χ gemittelt werden. Bzgl. der Ortsfunktion ist $\hat{\mathbf{j}}_e$ kein Operator mehr sondern bereits gemittelt.

^eDas hängt damit zusammen, dass der erste Term in \mathbf{j} einen Beitrag vom Bahndrehimpuls erhält, der natürlich im s -Zustand nicht vorhanden ist. Somit kommt von einem Elektron im s -Zustand ein Beitrag lediglich vom dritten Term in \mathbf{j} , der von der Spinbewegung herrührt.

^fMan muss beachten, dass kein Hintergrundfeld \mathbf{A} vorhanden ist. Im Ruhesystem erzeugt das Atom nur ein elektrisches Feld. Davon unabhängig erzeugt das Elektron allerdings ein Magnetfeld.

^gDas Bohrsche Magneton wird noch ausführlich in Kapitel 8 besprochen werden.

^hDa $\int_{[4\pi]} n_i n_j d\Omega$ ein symmetrischer Tensor 2. Stufe ist, muss er proportional δ_{ij} sein

$$\int_{[4\pi]} n_i n_j d\Omega = \alpha \delta_{ij}. \quad (3.31)$$

Kontraktion mit δ_{ij} liefert

$$\int_{[4\pi]} \mathbf{n}^2 d\Omega = 4\pi = 3\alpha, \quad (3.32)$$

und somit

$$\int_{[4\pi]} n_i n_j d\Omega = \frac{4\pi}{3} \delta_{ij}. \quad (3.33)$$

ⁱDabei haben wir verwendet, dass $\lim_{r \rightarrow \infty} \psi^2(r) = 0$.

^jBetrachtet man den Operator vor der Mittelung über die Raumwellenfunktion, dann erhält man

$$\hat{V}_{IS}^O = \frac{16\pi\mu\mu_B}{3\hbar^2 I} \delta(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}.$$

^kSofern $F \geq 1/2$ ist.

^lWie im Kapitel 8 besprochen werden wird, setzt sich der Kernspin jeweils aus Bahndrehimpuls und Spin all seiner Protonen und Neutronen zusammen. Weiters wird dort gezeigt werden, dass zum magnetischen Moment des Kerns zwar die Spins der Protonen und Neutronen als auch der Bahndrehimpuls der Protonen beiträgt, nicht jedoch der Bahndrehimpuls der Neutronen (Das liegt daran, dass das Neutron keine elektrische Ladung besitzt, was für die „elektromagnetische Grösse“ magnetisches Moment relevant ist, nicht jedoch für die „mechanische Grösse“ Kernspin). Da die Niveauverschiebung von der Wechselwirkung des magnetischen Moments mit dem Magnetfeld herröhrt, bedeutet dies dass der Bahndrehimpuls der Neutronen zur Niveauverschiebung nicht (direkt) beiträgt. Der Wechselwirkungsoperator \hat{V}_{IS} ist zwar proportional zum Kernspin, allerdings auch proportional zum Faktor μ des magnetischen Momentes wo dieser Umstand berücksichtigt wird. Somit geht der Kernspin nur ein um die Richtung bzw. Orientierung vorzugeben. Das erkennt man deutlich in Gleichung (3.36) wo nur die Richtung $\hat{\mathbf{I}}/I$ des Kernspins auftritt.

4

Strahlungsübergänge

Wir betrachten im Folgenden nur schwache Kopplungen zwischen einem Atom und seinem umgebenden Strahlungsfeld. In diesem Fall beeinflussen Atom und Feld ihre jeweilige Konstitution in erster Näherung nicht und somit separiert die Gesamtwellenfunktion von Atom und Feld in das Produkt der Wellenfunktionen des ungestörten Atoms und Feldes.¹

4.1 Einsteins Strahlungsgesetze

Die Strahlungsenergiedichte eines schwarzen Körpers ist durch das Plancksche Strahlungsgesetz gegeben

$$\rho(\omega) d\omega = \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/kT} - 1)} . \quad (4.1)$$

Für dessen Herleitung ging Planck von der Annahme aus, dass der die Strahlung erzeugende Oszillator diskrete Energieniveaus mit gleichen Abständen zwischen den Niveaus besitzt. Dass dabei Licht in Photonen bestimmter Energie emittiert wird, ging dabei überhaupt nicht ein. Tatsächlich dachte Planck ursprünglich, dass Materie Energie nur in Quanten absorbieren und emittieren kann. Licht betrachtete er jedoch als nicht quantisiert. Für Einstein hingegen waren nicht bloß die Oszillatoren der Materie quantisiert, sondern Licht selbst bestand für ihn aus Quanten (Photonen), welche man in einem gewissen Sinn wie Teilchen mit Energie $\hbar\omega$ betrachten kann.

Einstein nahm an, dass Plancks Formel richtig ist² und verwendete sie, um neue Erkenntnisse über die Wechselwirkung von Strahlung mit Materie zu erhalten. Er betrachtete unter den vielen möglichen Atomniveaus zwei beliebige m und n (siehe Abbildung 4.1). Er nahm weiters an, dass wenn Licht der richtigen Frequenz auf ein Atom scheint, dieses vom Atom absorbiert wird und das Atom vom Zustand n zu m übergeht. Für die Übergangswrscheinlichkeit pro Zeiteinheit dieses Vorgangs nahm er natürlich eine Abhängigkeit von den spezifischen beiden Niveaus an, aber auch, dass diese proportional zur Lichtintensität bzw. Strahlungsenergiedichte des einfallenden Lichtes ist. Die Proportionalitätskonstante hierfür

¹Das Atom hat in erster Näherung somit dieselben Energieniveaus bzw. denselben strukturellen Aufbau in der Anwesenheit des Strahlungsfeldes wie im feldfreien Raum.

²Nach Plancks Herleitung zeigte Bohr, dass jedes System aus Atomen Energieniveaus hat, welche nicht notwendigerweise gleichen Abstand zwischen den Niveaus haben müssen so wie Plancks Oszillator. Mit zunehmenden quantenmechanischen Erkenntnissen bestand somit die Notwendigkeit die ursprüngliche Herleitung von Planck neu zu überdenken.

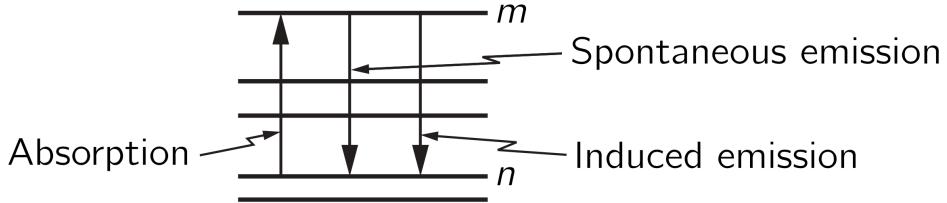


Abbildung 4.1: Übergänge zwischen zwei Energieniveaus eines Atoms (Quelle [FLS11a]).

nennen wir B_{mn} , um festzuhalten dass es sich hierbei nicht um eine universelle Naturkonstante handelt, sondern dass eine explizite Abhängigkeit von den beiden Niveaus besteht.

Für die Emission von Licht und den damit verbundenen Übergang von m zu n nahm Einstein zwei Prozesse an. Bei der **spontanen Emission** würde ein Photon emittiert und ein Übergang $m \rightarrow n$ stattfinden, ohne dass Licht anwesend ist. Bereits in der klassischen Physik existiert ein analoger Prozess, wenn ein angeregter Oszillator seine Energie nicht beibehält, sondern in Form von Strahlung abgibt. Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, dass ein Atom von m zu n geht sei A_{nm} . Sie hängt von den Niveaus m und n ab, aber nicht davon ob Licht auf das Atom scheint oder nicht. Einstein ging noch weiter und nahm an, dass Emission auch durch die Anwesenheit von Licht beeinflusst wird und zwar wenn Licht der richtigen Frequenz auf das Atom scheint, dieses eine erhöhte Rate für die Emission eines Photons hat, welche proportional zur einfallenden Lichtintensität bzw. Strahlungsenergiedichte ist, mit der Proportionalitätskonstanten B_{nm} . Diesen dritten Prozess nennt man **induzierte** oder **stimulierte Emission**.

Als nächstes betrachten wir eine Gleichgewichtssituation bei einer Temperatur T . Im Zustand n befinden sich N_n Atome und analog in m sind N_m Atome. Die Anzahl der Atome die pro Zeiteinheit von n nach m übergehen ist gegeben durch

$$R_{n \rightarrow m} = N_n B_{mn} \rho(\omega), \quad (4.2)$$

wobei $B_{mn} \rho(\omega)$ die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit für ein einzelnes Atom angibt.³ Analog für die Übergänge von m zu n haben wir

$$R_{m \rightarrow n} = N_m (A_{nm} + B_{nm} \rho(\omega)), \quad (4.3)$$

wobei nun $A_{nm} + B_{nm} \rho(\omega)$ die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit für ein Atom angibt. Mit Einstein nehmen wir an, dass im thermischen Gleichgewicht $R_{m \rightarrow n} = R_{n \rightarrow m}$ ist. Das stellt zumindest eine Möglichkeit dar jedes Atomniveau gleichbesetzt zu halten.⁴

Darüber hinaus kennen wir das Verhältnis von N_m/N_n , welches gleich $e^{-(E_m - E_n)/kT}$ ist. Einstein nahm an, dass nur Licht effektiv Übergänge von n zu m induzieren kann, dessen Frequenz der Energiedifferenz entspricht. Somit setzen wir $E_m - E_n = \hbar\omega$ in all unseren

³ Anders ausgedrückt gibt das Zeitintegral $\int_0^T B_{mn} \rho(\omega) dt$ die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass sich ein einzelnes Atom zur Zeit T im Zustand m befindet falls es zur Zeit 0 im Zustand n war.

⁴ Das ist nicht die einzige Möglichkeit wie man alle Atomniveaus gleich besetzt halten kann, aber so geschieht es tatsächlich. Dass im thermischen Gleichgewicht jeder Prozess mit seinem exakten Umkehrprozess im Gleichgewicht ist, nennt man **detailliertes Gleichgewicht (Detailed Balance)**.

Gleichungen und erhalten

$$N_m = N_n e^{-\hbar\omega/kT}. \quad (4.4)$$

Setzt man beide Übergangsraten gleich erhält man

$$N_n B_{mn} \rho(\omega) = N_m (A_{nm} + B_{nm} \rho(\omega)), \quad (4.5)$$

bzw.

$$B_{mn} \rho(\omega) e^{\hbar\omega/kT} = A_{nm} + B_{nm} \rho(\omega). \quad (4.6)$$

Das ergibt für die Energiedichte

$$\rho(\omega) = \frac{A_{nm}}{B_{mn} e^{\hbar\omega/kT} - B_{nm}}. \quad (4.7)$$

Aus dem Vergleich mit Plancks Formel fand Einstein einiges, von dem er nicht wusste wie man es direkt berechnet. Er fand, dass $B_{mn} = B_{nm}$, d.h. die induzierte Emissionswahrscheinlichkeit und Absorptionswahrscheinlichkeit müssen gleich sein. Ausserdem fand er

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \quad (4.8)$$

Kennt man beispielsweise die Absorptionsrate für ein Niveau, erhält man daraus die spontane und induzierte Emissionsrate und umgekehrt.

Um die absolute spontane Emissionsrate bzw. die anderen Übergangsraten für irgendeinen spezifischen atomaren Übergang tatsächlich zu berechnen, braucht es natürlich Wissen über die inneren Vorgänge im Atom. Das ermöglicht erst die **Quantenelektrodynamik (QED)**, welche 11 Jahre nach Einsteins ursprünglichen Überlegungen von 1916 entdeckt wurde.

4.2 Semiklassische Strahlungstheorie

Eine vollständige Behandlung der Strahlungstheorie ist nur im Rahmen der **Quantenelektrodynamik (QED)** möglich, bei der sowohl das elektromagnetische Feld wie auch die Materie quantisiert sind. Hier hingegen betrachten wir die semiklassische Strahlungstheorie, in welcher quantisierte Materie in Wechselwirkung mit einem klassischen elektromagnetischen Feld im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie der nicht-relativistischen Quantentheorie behandelt wird. Auch wenn damit die QED nicht vollständig ersetzt werden kann, können Resultate zu niedrigster Ordnung, welche physikalisch relevant sind, damit besonders einfach erhalten werden.

Der erweiterte Hamilton-Operator für ein Elektron mit Ladung $-e$ in einem elektromagnetischen Feld ist gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U. \quad (4.9)$$

Wir wählen die **Coulomb-Eichung** $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ (auch **Strahlungseichung** oder **transversale Eichung** genannt) und setzen das skalare Potential $\Phi = 0$, was stets möglich ist falls

das elektromagnetische Feld keine Quellen hat.⁵ Weiters vernachlässigen wir den Term proportional \mathbf{A}^2 , da wir nur schwache Felder betrachten. Somit erhalten wir für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung⁶

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{ie\hbar}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla + U(r) \right\} \Psi . \quad (4.10)$$

Das elektromagnetische Feld ist hier klassisch, somit kann \mathbf{A} an jedem Raum-Zeit Punkt ohne jegliche Unschärfe mittels der Maxwell-Gleichungen im Vakuum

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 , \quad (4.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 0 , \quad (4.12)$$

angegeben werden. Für $\Phi = 0$ ergeben sich die elektromagnetischen Felder aus dem Vektorpotential folgendermaßen⁷

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} . \quad (4.13)$$

Setzen wir die beiden Ausdrücke aus Gleichung (4.13) in die erste Gleichung von (4.12) ein, finden wir

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -\Delta \mathbf{A} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} . \quad (4.14)$$

In der Coulomb-Eichung muss das Vektorpotential daher die folgenden beiden Gleichungen erfüllen

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= \mathbf{0} , \\ \nabla \cdot \mathbf{A} &= 0 . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Wir werden sehen, dass diese semiklassische Beschreibung die Wirkung eines externen Strahlungsfeldes auf ein Teilchen (Absorption und induzierte Emission) richtig wiedergibt, nicht jedoch die Wirkung des Teilchens auf das Feld (spontane Emission). Der Grund für die richtigen Resultate bei ersteren Phänomenen liegt am Korrespondenzprinzip. Wenn das Strahlungsfeld quantisiert ist, wird es als Ansammlung quantisierter Oszillatoren betrachtet wobei der n -te angeregte Zustand des Oszillators n Photonen im elektromagnetischen Feld

⁵Wir bemerken, dass im Potential U das skalare Coulomb-Potential des Kerns steckt. Dies wird jedoch dem Atom zugeordnet, sodass beim quellfreien Strahlungsfeld das skalare Potential Null gesetzt werden kann.

⁶Wie bemerken, dass ohne Eichfixierung der Term linear in \mathbf{A} proportional zu $\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla$ wäre. Angewendet auf die Wellenfunktion ergibt das $(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla)\Psi = (\nabla \cdot \mathbf{A})\Psi + 2\mathbf{A} \cdot \nabla\Psi$. Aufgrund unserer Wahl der Coulomb-Eichung verbleibt lediglich der Term $2\mathbf{A} \cdot \nabla\Psi$.

⁷In der Coulomb-Eichung ist mit Gleichung (4.13) die erste Gruppe der Maxwell-Gleichungen (4.11) als auch die zweite Gleichung von (4.12) automatisch erfüllt.

beschreibt. Für hohe n (viele Photonen oder intensiver Strahl) erlaubt das Korrespondenzprinzip eine klassische Beschreibung des Feldes. Für intensive äussere Strahlen erwarten wir somit, dass die semiklassische Beschreibung richtige Resultate liefert. Dass wir dennoch den Term mit \mathbf{A}^2 vernachlässigen können, liegt daran dass das Korrespondenzprinzip beim Oszillator bereits bei niedrigen Werten von n gilt. Somit müssen die Resultate für starke äussere Strahlen ebenso für schwache Strahlen gelten.

Diese Überlegungen gelten nicht für die spontane Emission. Diese tritt unabhängig davon ein ob ein externes Feld ursprünglich anwesend ist, d.h. eine beschleunigte Ladung emittiert Strahlung unabhängig davon ob sie in einem externen Feld ist oder nicht. Es muss zumindest ein Quantum an Strahlung emittiert werden, damit ist der Effekt nichtlinear bzgl. dem Feld⁸ und die Anwendung des Korrespondenzprinzips kann nicht auf einfache Weise auf die Aussendung eines einzelnen Quants ausgeweitet werden. Für eine vollständig befriedigende Theorie brauchen wir die QED. Nichtsdestotrotz können wir mit den Einstein Koeffizienten die richtige Wahrscheinlichkeit für die spontane Emission erhalten.

Zur Beschreibung der Absorption von äusserer Strahlung oder induzierten Emission in Anwesenheit eines Strahlungsfeldes muss man das externe Feld spezifizieren, d.h. Lösungen von Gleichung (4.15) finden. Für praktische Anwendungen braucht man sich nur mit zwei Arten von externen Feldern auseinandersetzen:

1. Monochromatische ebene Wellen

Dieser Fall ist interessant beim Übergang eines spezifischen Anfangszustandes mit Energie E_i zu einer Gruppe dicht gepackter oder kontinuierlich verteilter Endzustände. Eine monochromatische Welle einer bestimmten Frequenz ω erzeugt Übergänge in einen Endzustand E_f sofern $|E_i - E_f| = \hbar\omega$ gilt

2. Inkohärente Superposition ebener Wellen mit unterschiedlicher Frequenz

Der Übergang in ein diskretes Spektrum von Endzuständen ist aufgrund der Energieerhaltung praktisch nur möglich, wenn das externe Feld nicht monochromatisch (also nicht nur von einer Frequenz) ist, sondern eine Frequenzverteilung um einen Wert ω herum so konzentriert ist, dass die Energieerhaltung $|E_i - E_f| = \hbar\omega$ bei einem Übergang erfüllt werden kann.

Für uns ist nur der zweite Fall relevant.

Wir betrachten das Feld als Überlagerung monochromatischer ebener Wellen⁹

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \epsilon A_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (4.17)$$

⁸Wäre der Effekt linear zum äusseren Strahlungsfeld, würde er nicht mehr auftreten sobald das Feld verschwindet.

⁹Die Überlagerung ergibt sich zu

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \epsilon_m A_{0,m} \cos(\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r} - \omega_m t + \delta_m). \quad (4.16)$$

Typischerweise stammt die Strahlung ursprünglich von vielen Atomen, wobei jedes davon unabhängige Photonen emittiert. Somit sind die Phasen δ_i im Allgemeinen komplett zufällig verteilt. Man nennt so eine Strahlung **inkohärent**. Eine Ausnahme hierzu stellt der Laser dar.

wobei $\boldsymbol{\varepsilon}$ der Polarisationsensor ist mit $\boldsymbol{\varepsilon}^2 = 1$ und A_0 die Amplitude. Setzen wir dies in Gleichung (4.15) ein, erhalten wir für jede Wellenkomponente die Beziehungen ($k = |\mathbf{k}|$)

$$\begin{aligned} k &= \frac{\omega}{c}, \\ \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} &= 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Einsetzen von Gleichung (4.17) in Gleichung (4.13) ergibt für die elektromagnetischen Felder

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{k} A_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \\ \mathbf{E} &= -\boldsymbol{\varepsilon} k A_0 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Für die weiteren Rechnungen benötigen wir das Zeitmittel über eine Periode.¹⁰ Für die Energiedichte

$$\rho = \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2}{8\pi}, \quad (4.21)$$

finden wir zeitgemittelt¹¹

$$\langle \rho \rangle = \frac{k^2 A_0^2}{8\pi}. \quad (4.22)$$

Dies erlaubt die Amplitude über die Energiedichte auszudrücken (die Zeitmittelung zeigen wir im Folgenden nicht mehr)

$$A_0^2 = \frac{8\pi c^2}{\omega^2} \rho. \quad (4.23)$$

Im Folgenden verwenden wir zeitabhängige Störungstheorie (siehe Appendix C.4) um die Wechselwirkung zwischen Elektronen und externem Strahlungsfeld zu beschreiben. Aus Gleichung (4.10) ergibt sich unser zeitabhängiger Störoperator zu

$$\hat{V} = \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}.$$

(4.24)

Da die Wechselwirkung schwach ist verwenden wir die Elektronenmasse m_e statt der reduzierten Masse, was einer Korrektur einer Korrektur entspricht und somit vernachlässigbar ist.

Wir entwickeln die Wellenfunktion des Elektrons nach stationären Zuständen

$$\psi_i(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_{ki}(t) \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) e^{-iE_k t/\hbar} + \int c_{\nu i}(t) \psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r}) e^{-iE_\nu t/\hbar} d\nu, \quad (4.25)$$

¹⁰Für das Zeitmittel über eine Periode $T = 2\pi/\omega$ ergibt sich

$$\langle \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) dt = \frac{1}{2}. \quad (4.20)$$

¹¹Hierbei haben wir verwendet, dass $(\boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{k})^2 = k^2$.

wobei die $\psi_k^{(0)}(\mathbf{r})$ die früher gefundenen diskreten Wellenfunktionen gebundener Zustände sind. Wir bemerken, dass hier zusätzlich zur Summe über die diskreten Eigenzustände auch noch ein Integral über das kontinuierliche Spektrum hinzukommt.¹² Letzteres resultiert aus dem kontinuierlichen Spektrum von Streuzuständen positiver Energie, die wir bislang noch gar nicht betrachtet haben. Wir nehmen weiters an, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ das System im Zustand $\psi_i^{(0)}(\mathbf{r})$ ist. Zur ersten Ordnung finden wir nach Gleichung (C.25) für $f \neq i$

$$\begin{aligned} c_{fi}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt' \\ &= -\frac{ie}{\hbar m_e c} \int_0^t \langle \psi_f | \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt'. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Wir bemerken, dass das Absolutquadrat $|c_{fi}(t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit angibt, dass sich das System zum Zeitpunkt t im Zustand f befindet, wenn es sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand i befunden hat.

Für die Welle aus Gleichung (4.17)

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\varepsilon} A_0 \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}}{2}, \quad (4.27)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} c_{fi}(t) &= -\frac{ieA_0}{2\hbar m_e c} \int_0^t \left\{ \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} + \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} \right\} dt' \\ &= -\frac{eA_0}{2\hbar m_e c} \left\{ \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} + \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} \right\}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Der erste Term, der bei $\omega \approx \omega_{fi}$ dominiert, also wenn der Endzustand f energetisch höher liegt als der Anfangszustand i beschreibt offensichtlich Absorption. Der zweite Term, der bei $\omega \approx -\omega_{fi} = \omega_{if}$ dominiert, also wenn der Anfangszustand mehr Energie als der Endzustand hat, entspricht der stimulierten Emission. Je nach Energie der beiden Zustände, dominiert im Allgemeinen einer der beiden Terme womit der andere vernachlässigt werden kann.

4.2.1 Absorption

Wir betrachten nun den Fall der Absorption und vernachlässigen somit den zweiten Term. Mit Gleichung (4.23) können wir das Resultat mittels der Energiedichte ausdrücken und

¹²Ganz allgemein werden die verschiedenen Zustände des kontinuierlichen Spektrums durch den Index ν voneinander unterschieden, wobei ν eine stetige Folge von Werten durchläuft. Unter ν werden die Werte aller Größen verstanden, die zur vollständigen Beschreibung eines Zustandes notwendig sind (wenn die Zustände des Kontinuums entartet sind, was fast immer der Fall ist, dann reicht die Angabe der Energie allein zur Bestimmung des Zustandes nicht aus). Hierbei müssen die Wellenfunktionen $\psi_\nu^{(0)}$ auf eine δ -Funktion normiert sein.

erhalten¹³

$$|c_{fi}(t)|^2 = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2 m_e^2 \omega^2} \rho |\langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2}. \quad (4.29)$$

Verwenden wir anstatt der monochromatischen Welle aus Gleichung (4.17) die inkohärente Superposition ebener Wellen mit unterschiedlicher Frequenz aus Gleichung (4.16) erhalten wir stattdessen¹⁴

$$|c_{fi}(t)|^2 = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2 m_e^2} \int_0^\infty \frac{\rho(\omega)}{\omega^2} |\langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2} d\omega. \quad (4.30)$$

Wir bemerken, dass dieses Resultat für kohärente Strahlung wie z.B. beim Laser allerdings nicht gültig ist. Mithilfe der Gleichung (A.2) finden wir, dass im Limes grosser Zeiten gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2} \rightarrow \pi t \delta\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right), \quad (4.31)$$

d.h. für grosse Zeiten können wir den restlichen Integranden durch seinen Wert bei $\omega = \omega_{fi}$ ersetzen und vor das Integral ziehen. Weiters erweitern wir die untere Integrationsgrenze von 0 zu $-\infty$, da für grosse t ohnehin kein Beitrag von negativen ω kommt. Somit erhalten wir

$$|c_{fi}(t)|^2 = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2 m_e^2} \frac{\rho(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2} |\langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle|^2 \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)^2} d\omega. \quad (4.32)$$

¹³Hierbei verwenden wir $|e^{ix} - 1|^2 = 2(1 - \cos x) = 4 \sin^2 \frac{x}{2}$.

¹⁴Für inkohärente Superposition ebener Wellen mit unterschiedlicher Frequenz erhalten wir

$$|c_{fi}(t)|^2 = \left(\frac{e}{2\hbar m_e c}\right)^2 \sum_{m,n} A_{0,m} A_{0,n} e^{i(\delta_m - \delta_n)} \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_m \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \boldsymbol{\varepsilon}_n \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega_m)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega_m} \frac{e^{-i(\omega_{fi}-\omega_n)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega_n}.$$

Die Inkohärenz wird berücksichtigt, indem man über alle δ_m und δ_n mittelt. Dies ergibt

$$|c_{fi}(t)|^2 = \left(\frac{e}{2\hbar m_e c}\right)^2 \sum_m A_{0,m}^2 |\langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}_m \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_m \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}-\omega_m}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega_m}{2}\right)^2}.$$

Mit Gleichung (4.23) können wir das Resultat mittels der Energiedichte ausdrücken. Führen wir den Kontinuumslices

$$\sum_m \rho_m \dots \rightarrow \int_0^\infty \rho(\omega) \dots d\omega,$$

aus erhalten wir Gleichung (4.30) (wir bemerken, dass ρ_m und $\rho(\omega)$ unterschiedliche Dimensionen haben).

Führen wir das verbleibende Integral aus erhalten wir¹⁵

$$|c_{fi}(t)|^2 = \left(\frac{2\pi e}{\hbar m_e}\right)^2 \frac{\rho(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2} |\langle\psi_f| e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} |\psi_i\rangle|^2 t. \quad (4.33)$$

Für die Übergangsrate ergibt sich somit¹⁶

$$\begin{aligned} W_{fi}^A &= \frac{d}{dt} |c_{fi}(t)|^2 \\ &= \left(\frac{2\pi e}{\hbar m_e}\right)^2 \frac{\rho(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2} |\langle\psi_f| e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} |\psi_i\rangle|^2. \end{aligned} \quad (4.34)$$

4.2.2 Stimulierte Emission

Die stimulierte Emission folgt aus dem zweiten Teil von Gleichung (4.28). Man sieht, dass er sich aus der Absorption durch die Ersetzungen $\omega_{fi} \rightarrow \omega_{if}$ und $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ ergibt. Somit erhalten wir unmittelbar

$$W_{fi}^{SE} = \left(\frac{2\pi e}{\hbar m_e}\right)^2 \frac{\rho(\omega_{if})}{\omega_{if}^2} |\langle\psi_f| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} |\psi_i\rangle|^2. \quad (4.35)$$

Vertauschen wir die Zustände $i \leftrightarrow f$, sodass der Zustand f wieder höhere Energie hat und verwenden wir weiters $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k} = 0$ so ergibt das

$$\begin{aligned} |\langle\psi_i| e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} |\psi_f\rangle|^2 &= |\langle\psi_f| \hat{\mathbf{p}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\psi_i\rangle|^2 \\ &= |\langle\psi_f| e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} |\psi_i\rangle|^2, \end{aligned} \quad (4.36)$$

und für die Übergangsrate

$$\begin{aligned} W_{if}^{SE} &= \left(\frac{2\pi e}{\hbar m_e}\right)^2 \frac{\rho(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2} |\langle\psi_f| e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} |\psi_i\rangle|^2 \\ &= W_{fi}^A. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Das entspricht dem detaillierten Gleichgewicht.

¹⁵Für das Integral finden wir (siehe Appendix A.3)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} t \right)}{\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2} \right)^2} d\omega = 2t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = 2\pi t.$$

¹⁶Wir möchten anmerken, dass die hier angewendete Störungstheorie nur für $|c_{fi}(t)|^2 \ll 1$ gültig ist. Da $|c_{fi}(t)|^2 \propto t$ heißt das, dass streng genommen das entsprechende Resultat nur für hinreichend kleine t gültig ist. Im Gültigkeitsbereich der Störungstheorie finden wir für W_{fi}^A jedoch ein zeitunabhängiges Resultat. Somit gilt dieses W_{fi}^A für alle t .

4.2.3 Dipol-Näherung

Wir betrachten die Phase des Faktors $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ im Matrixelement und schätzen dessen Grösse ab. Den Betrag des Wellenvektors k können wir über die Energie wie folgt ausdrücken

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{E}{\hbar c}. \quad (4.38)$$

Für Übergänge zwischen 2 Zustände im diskreten Spektrum kann der Energieunterschied maximal der Betrag des tiefstgebundenen Zustandes $|E_1|$ sein, d.h.¹⁷

$$E \sim |E_1| \approx \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} = \frac{Z^2 e^2}{2a_0}. \quad (4.39)$$

Wir bezeichnen mit a die Größenordnung des Systemdurchmessers. Wir verwenden hierfür den entsprechenden Bohr-Radius a_0

$$a \sim \frac{a_0}{Z}. \quad (4.40)$$

Somit finden wir größenordnungsmässig

$$ka \sim \frac{E}{\hbar c} \frac{a_0}{Z} = \frac{Ze^2}{2\hbar c} = \frac{Z\alpha}{2} \approx \frac{Z}{274}. \quad (4.41)$$

Für $ka \ll 1$ (was für nicht allzu grosse Z tatsächlich erfüllt ist) dürfen wir somit wie folgt approximieren¹⁸

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= 1 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2} (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2 + \dots \\ &\approx 1. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Dies ist die sogenannte **elektrische Dipolnäherung**. Sie vernachlässigt die räumliche Variation des elektromagnetischen Feldes innerhalb des Atoms¹⁹ und vernachlässigt den Photonenimpuls gegenüber dem Elektronenimpuls.²⁰ Somit erhalten wir für das Matrixelement

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{fi} &= \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle \\ &\approx \langle \psi_f | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle \\ &= m_e \langle \psi_f | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} | \psi_i \rangle. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Weiters folgt aus der Heisenberg-Gleichung für Operatoren

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0], \quad (4.44)$$

¹⁷Wir erinnern daran, dass die gebundenen Zustände negative Energie haben und gegen den Nullpunkt der Energie streben.

¹⁸Der zweite Term der Reihe $i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ verursacht magnetische Dipol (M1) und elektrische Quadrupol (E2) Übergänge.

¹⁹Das ist gültig für Wellenlängen $\lambda = \frac{2\pi}{k} \gg \frac{a_0}{Z}$.

²⁰Man erhält die elektrische Dipolnäherung auch wenn man den Photonenimpuls $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{0}$ setzt.

wobei wir anstatt dem vollständigen Hamilton-Operator \hat{H} lediglich den ungestörten \hat{H}_0 verwendet haben, da wir einen kleinen Störterm behandeln. Diese Ersetzung entspricht wieder einer kleinen Korrektur zu einer kleinen Korrektur und ist somit vernachlässigbar. Wir finden somit

$$\begin{aligned}\langle \psi_f | \hat{\mathbf{r}} | \psi_i \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_f | \hat{\mathbf{r}} \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{\mathbf{r}} | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \psi_f | \hat{\mathbf{r}} | \psi_i \rangle \\ &= i\omega_{fi} \langle \psi_f | \hat{\mathbf{r}} | \psi_i \rangle.\end{aligned}\quad (4.45)$$

Mit dem Dipol-Operator $\hat{\mathbf{D}} = -e \hat{\mathbf{r}}$ und seinem Matrixelement $\mathbf{D}_{fi} = \langle \psi_f | \hat{\mathbf{D}} | \psi_i \rangle$ lässt sich das Matrixelement in der Dipolnäherung wie folgt ausdrücken

$$\mathcal{M}_{fi} = -\frac{i}{e} m_e \omega_{fi} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}, \quad (4.46)$$

und letztlich für die Übergangsrate der Absorption in der Dipolnäherung

$$W_{fi}^A = \left(\frac{2\pi e}{\hbar m_e} \right)^2 \frac{\rho(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2} |\mathcal{M}_{fi}|^2, \quad (4.47)$$

bzw.

$$W_{fi}^A = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \rho(\omega_{fi}) |\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}|^2. \quad (4.48)$$

Hier ist $\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}$ das elektrische Dipolmoment in Richtung $\boldsymbol{\epsilon}$ zwischen den Zuständen i und f . Bislang haben wir nur polarisierte Strahlung betrachtet mit fixem $\boldsymbol{\epsilon}$. Für unpolarisierte isotrope Strahlung müssen wir über den Raumwinkel mitteln, was der Ersetzung²¹

$$|\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}|^2 \rightarrow \frac{1}{3} |\mathbf{D}_{fi}|^2, \quad (4.49)$$

entspricht, wobei $|\mathbf{D}_{fi}|^2 = \mathbf{D}_{fi}^* \mathbf{D}_{fi}$. Für die Übergangsrate der Absorption in der Dipolnäherung für unpolarisierte isotrope Strahlung erhalten wir somit

$$\overline{W}_{fi}^A = \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \rho(\omega_{fi}) |\mathbf{D}_{fi}|^2. \quad (4.50)$$

Man bezeichnet

²¹Die Mittelung des Tensors $\varepsilon_i \varepsilon_j$ über den Raumwinkel ergibt einen symmetrischen Tensor, welcher proportional zu δ_{ij} sein muss. D.h. die Mittelung entspricht der Ersetzung

$$\varepsilon_i \varepsilon_j \rightarrow \frac{1}{4\pi} \int_{[4\pi]} \varepsilon_i \varepsilon_j d\Omega = \alpha \delta_{ij}.$$

Kontraktion mit δ_{ij} ergibt unter Verwendung von $\boldsymbol{\epsilon}^2 = 1$ sofort $\alpha = \frac{1}{3}$ und somit für die Mittelung

$$\varepsilon_i \varepsilon_j \rightarrow \frac{1}{3} \delta_{ij}.$$

- $\mathbf{D}_{fi} \neq 0$ einen **erlaubten** oder **elektrischen Dipol (E1) Übergang**,²²
- $\mathbf{D}_{fi} = 0$ einen **verbotenen Übergang**.

In letzterem Fall kann es dennoch nichtverschwindende Beiträge von den höheren Ordnungen der Reihenentwicklung von $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ geben (magnetische Dipol-, elektrische Quadrupolübergänge). Die daraus resultierende Übergangsrate ist jedoch viel kleiner als die für erlaubte Übergänge.

Wenn \mathcal{M}_{fi} trotz Verwendung des vollen Ausdrucks $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ verschwindet, nennt man dies

- einen **streng verbotenen Übergang**.

Aber selbst in diesem Fall ist ein Übergang noch immer möglich entweder in höherer Ordnung der Störungstheorie²³ oder durch den bislang vernachlässigten Term proportional \mathbf{A}^2 in der Wechselwirkung aus Gleichung (4.9), welcher der Wechselwirkung mit gleichzeitig zwei Photonen entspricht.

Von den Einstein Koeffizienten erhält man (siehe Gleichung (4.2))²⁴

$$B_{fi} = \frac{R_{i \rightarrow f}}{N_i \rho(\omega_{fi})} = \frac{\overline{W}_{fi}^A}{\rho(\omega_{fi})}, \quad (4.51)$$

und somit

$$B_{fi} = \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 |\mathbf{D}_{fi}|^2. \quad (4.52)$$

Weiters finden wir für den Einstein Koeffizienten

$$A_{fi} = \frac{\hbar \omega_{fi}^3}{\pi^2 c^3} B_{fi}, \quad (4.53)$$

den Ausdruck

$$A_{fi} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{fi}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{D}_{fi}|^2. \quad (4.54)$$

Man beachte, dass die spontane Emissionsrate proportional zu $\omega_{fi}^3 |\mathbf{D}_{fi}|^2$ ist. Man kann die Resultate auch leicht verallgemeinern für den Fall, dass die Energieniveaus entartet sind, was wir hier aber nicht weiter verfolgen wollen.

²²Die Bezeichnung folgt daraus, dass $\hat{\mathbf{D}}$ der Operator für das elektrische Dipolmoment ist.

²³Wir erinnern daran, dass Gleichung (4.26) bzw. (C.25) nur erster Ordnung in der Störungstheorie entspricht.

²⁴Wir bemerken, dass die Einstein Koeffizienten auf dem Planckschen Strahlungsgesetz beruhen, welches wiederum die unpolarisierte isotrope Hohlraumstrahlung beschreibt. Somit müssen für die Einstein Koeffizienten die Übergangsrate für unpolarisierte isotrope Strahlung aus Gleichung (4.50) verwendet werden. Für die Interpretation der Einstein Koeffizienten verweisen wir ergänzend auf die Fußnote 3.

4.2.4 Parität & Auswahlregeln

Neben Parallelverschiebungen und Drehungen des Koordinatensystems (die Invarianz bzgl. dieser Transformationen ist ein Ausdruck der Homogenität bzw. Isotropie des Raumes) gibt es noch die sogenannte **Inversion** die den Hamilton-Operator eines abgeschlossenen Systems invariant lässt. Bei der Inversion werden gleichzeitig die Vorzeichen aller Ortskoordinaten, d.h. deren Orientierungen, umgekehrt. Die Invarianz der Hamilton-Operators bei einer Inversion ist der Ausdruck der Symmetrie des Raumes bei einer Spiegelung.²⁵ Während sich in der klassischen Mechanik aus der Invarianz der Hamilton-Funktion bei einer Inversion keine neuen Erhaltungssätze ergeben, haben wir in der Quantenmechanik eine andere Situation vorliegen.

Wir führen den Operator \hat{P} für eine Inversion ein.²⁶ Dessen Anwendung auf eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ bewirkt

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) . \quad (4.55)$$

Die Eigenwerte des Operators ergeben sich leicht aus

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = P\psi(\mathbf{r}) . \quad (4.56)$$

Die zweifache Anwendung des Inversionsoperators führt zur Identität $\hat{P}^2\psi = P^2\psi = \psi$, d.h. $P^2 = 1$ woraus folgt

$$P = \pm 1 . \quad (4.57)$$

Die Eigenfunktionen des Inversionsoperators ändern sich bei Anwendung von \hat{P} entweder überhaupt nicht, in welchem Fall die Wellenfunktion bzw. der zugehörige Zustand **gerade Parität** hat, oder die Eigenfunktion ändert das Vorzeichen, in welchem Fall **ungerade Parität** vorliegt.

Die Invarianz des Hamilton-Operators bei einer Inversion (d.h. $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$) drückt die Erhaltung der Parität aus. Wenn ein Zustand eines abgeschlossenen Systems eine bestimmte Parität hat (gerade oder ungerade), dann bleibt diese Parität im Laufe der Zeit erhalten.²⁷

Es gilt offenbar auch

$$[\hat{\mathbf{L}}, \hat{P}] = 0 , \quad (4.58)$$

d.h. der Drehimpulsoperator ist bei einer Inversion invariant. Ein System kann daher eine bestimmte Parität und gleichzeitig bestimmte Werte für den Drehimpuls L und seine Projektion M haben. Alle Zustände die sich nur im Wert M unterscheiden haben dabei gleiche Parität. Das folgt da die Eigenschaften eines abgeschlossenen Systems unabhängig von der Orientierung im Raum sind.

²⁵Auch der Hamilton-Operator eines Systems von Teilchen in einem kugelsymmetrischen Feld ist invariant bei einer Inversion sofern der Koordinatenursprung mit dem Zentrum des Feldes übereinstimmt.

²⁶Man bezeichnet eine Inversion auch als **Parität**.

²⁷Das gilt für die hier verwendete nichtrelativistische Theorie. In der relativistischen Theorie werden Wechselwirkungen der Natur beschrieben, die den Erhaltungssatz der Parität verletzen.

Wir wollen als nächstes die Parität für den Zustand eines Teilchens mit dem Drehimpuls l bestimmen. Für Kugelkoordinaten bedeutet die Inversion ($x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$) die Transformation

$$r \rightarrow r, \quad \vartheta \rightarrow \pi - \vartheta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi. \quad (4.59)$$

Die Eigenfunktion Y_{lm} des Drehimpulses ergibt bekanntlich die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion eines Teilchens. Diese ist proportional zu $P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\phi}$. Der Faktor $e^{im\phi}$ wird bei der Inversion mit $(-1)^m$ multipliziert, da dabei ϕ durch $\phi + \pi$ ersetzt wird. $P_l^m(\cos \vartheta)$ geht beim Ersetzen von ϑ durch $\pi - \vartheta$ in $P_l^m(-\cos \vartheta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos \vartheta)$ über. Somit wird die ganze Eigenfunktion Y_{lm} mit $(-1)^l$ multipliziert (wobei m nicht eingeht, was mit oben Gesagtem übereinstimmt). Demnach ist die Parität eines Zustandes mit gegebenem Wert von l

$$P = (-1)^l. \quad (4.60)$$

Wir sehen, sind alle Zustände mit geradzahligem l gerade- und mit ungeradzahligem l ungerade Parität haben.

Für die Matrixelemente verschiedener physikalischer Größen gibt es bestimmte Auswahlregeln bzgl. der Parität.

Betrachten wir einen stationären Zustand eines Atoms mit bestimmter Parität P . Für den Mittelwert des Ortsoperators folgt unmittelbar²⁸

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) dV &= \int \psi^*(-\mathbf{r}) (-\mathbf{r}) \psi(-\mathbf{r}) dV \\ &= - \int (\hat{P}\psi(\mathbf{r}))^* \mathbf{r} \hat{P}\psi(\mathbf{r}) dV \\ &= -P^2 \int \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) dV, \end{aligned} \quad (4.62)$$

wobei wir die Gleichungen (4.55) und (4.56) verwendet haben. Da $P^2 = 1$ folgt daraus

$$\langle \psi | \hat{\mathbf{r}} | \psi \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) dV = 0. \quad (4.63)$$

Somit finden wir, dass ein Atom kein permanentes Dipolmoment hat. Das folgt übrigens auch aus der Zeitumkehrinvarianz.

Wie wir gesehen haben, hängt im Falle von polarisierter Strahlung der Übergang von einem beliebigen Zustand $|i\rangle = |nlm\rangle$ zu irgendeinem Zustand $|f\rangle = |n'l'm'\rangle$ vom Matrixelement²⁹

²⁸Wir bemerken, dass für eine allgemeine Funktion $f(x)$ gilt (hierbei sei y definiert als $y = -x$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = - \int_{\infty}^{-\infty} f(-y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} f(-y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} f(-x) dx. \quad (4.61)$$

wobei im letzten Schritt die Integrationsvariable von y nach x umbenannt wurde. Analoges gilt in 3 Dimensionen und natürlich auch für vektorielle Funktionen wie in Gleichung (4.62).

²⁹Von der QED wissen wir, dass auch das Matrixelement für die spontane Emission $\mathcal{M}_{fi} \propto \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi}$ ist. Bei unserer einfachen Herleitung mittels der Einstein-Koeffizienten mit unpolarisierter Strahlung ist dies leider nicht ersichtlich.

$\mathcal{M}_{fi} \propto \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{D}_{fi} \propto \langle n'l'm' | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} | nlm \rangle$ ab.³⁰ Verschwindet das Matrixelement dann kann der entsprechende Übergang mit den von uns gemachten Näherungen nicht stattfinden. Das Nichtverschwinden der Matrixelemente ist an gewisse Kriterien, sogenannte **Auswahlregeln** für l' und m' geknüpft. Diese Auswahlregeln wollen wir als nächstes untersuchen.

A) Polarisierung in z -Richtung ($z = r \cos \vartheta$)

In diesem Fall finden wir für die Matrixelemente

$$\langle n'l'm' | \hat{z} | nlm \rangle \propto \int_0^\infty R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int_0^\pi P_{l'}^{m'} \cos \vartheta P_l^m \sin \vartheta d\vartheta \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi} e^{im\varphi} d\varphi}_{\propto \delta_{mm'}} .$$

Mit der Rekursionsformel

$$\cos \vartheta P_l^m = \frac{(l-m+1)P_{l+1}^m + (l+m)P_{l-1}^m}{2l+1}, \quad (4.64)$$

folgen sofort aufgrund der Orthogonalität der verallgemeinerten Legendre-Polynome bei gleichem m die Auswahlregeln

$$\boxed{m' = m, \\ l' = l \pm 1.}$$

B) Polarisierung in x -Richtung ($x = r \sin \vartheta \cos \varphi$)

In diesem Fall finden wir für die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | \hat{x} | nlm \rangle &\propto \int_0^\infty R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int_0^\pi P_{l'}^{m'} \sin \vartheta P_l^m \sin \vartheta d\vartheta \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi} \cos \varphi e^{im\varphi} d\varphi}_{\\ = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left\{ e^{i(m+1-m')\varphi} + e^{i(m-1-m')\varphi} \right\} d\varphi} . \end{aligned}$$

Mit der Rekursionsformel

$$\sin \vartheta P_l^m = \frac{P_{l+1}^{m+1} - P_{l-1}^{m+1}}{2l+1}, \quad (4.65)$$

folgen sofort die Auswahlregeln

$$\boxed{m' = m \pm 1, \\ l' = l \pm 1.}$$

³⁰Beispielsweise für eine Polarisierung in z -Richtung ($\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{e}_z$) ist das Matrixelement $\mathcal{M}_{fi} \propto \langle n'l'm' | \hat{z} | nlm \rangle$ usw.

C) Polarisierung in y -Richtung ($y = r \sin \vartheta \sin \varphi$)

In diesem Fall finden wir für die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | \hat{y} | nlm \rangle &\propto \int_0^\infty R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int_0^\pi P_{l'}^{m'} \sin \vartheta P_l^m \sin \vartheta d\vartheta \underbrace{\int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi} \sin \varphi e^{im\varphi} d\varphi}_{= \frac{1}{2i} \int_0^{2\pi} \{ e^{i(m+1-m')\varphi} - e^{i(m-1-m')\varphi} \} d\varphi}. \end{aligned}$$

Mit der Rekursionsformel Gleichung (4.65) folgen erneut die Auswahlregeln

$$\boxed{m' = m \pm 1, \\ l' = l \pm 1.}$$

Zusammenfassung der Auswahlregeln

Zusammenfassend finden wir folgende Auswahlregeln bzgl. der Polarisierung, d.h. Orientierung von $\boldsymbol{\epsilon}$ bzgl. der z -Achse

- $$\boxed{\begin{array}{ll} 1. \boldsymbol{\epsilon} \parallel \mathbf{e}_z : \Delta m = 0, & \Delta l = \pm 1 \quad (\pi - \text{Polarisation}) \\ 2. \boldsymbol{\epsilon} \perp \mathbf{e}_z : \Delta m = \pm 1, & \Delta l = \pm 1 \quad (\sigma - \text{Polarisation}) \end{array}}$$

Wir bemerken weiters, dass es keine Auswahlregeln für n gibt.

Die Auswahlregeln geben natürlich nur an, ob mit den von uns gemachten Näherungen (Dipolnäherung usw.) ein Übergang stattfinden kann. Um die tatsächlichen Übergangsraten zu erhalten, müssen die entsprechenden Matrixelemente gelöst werden.

In Abbildung 4.2 ist das sogenannte Termschema für atomaren Wasserstoff wiedergegeben, in welchem einige Strahlungsübergänge eingezeichnet sind.

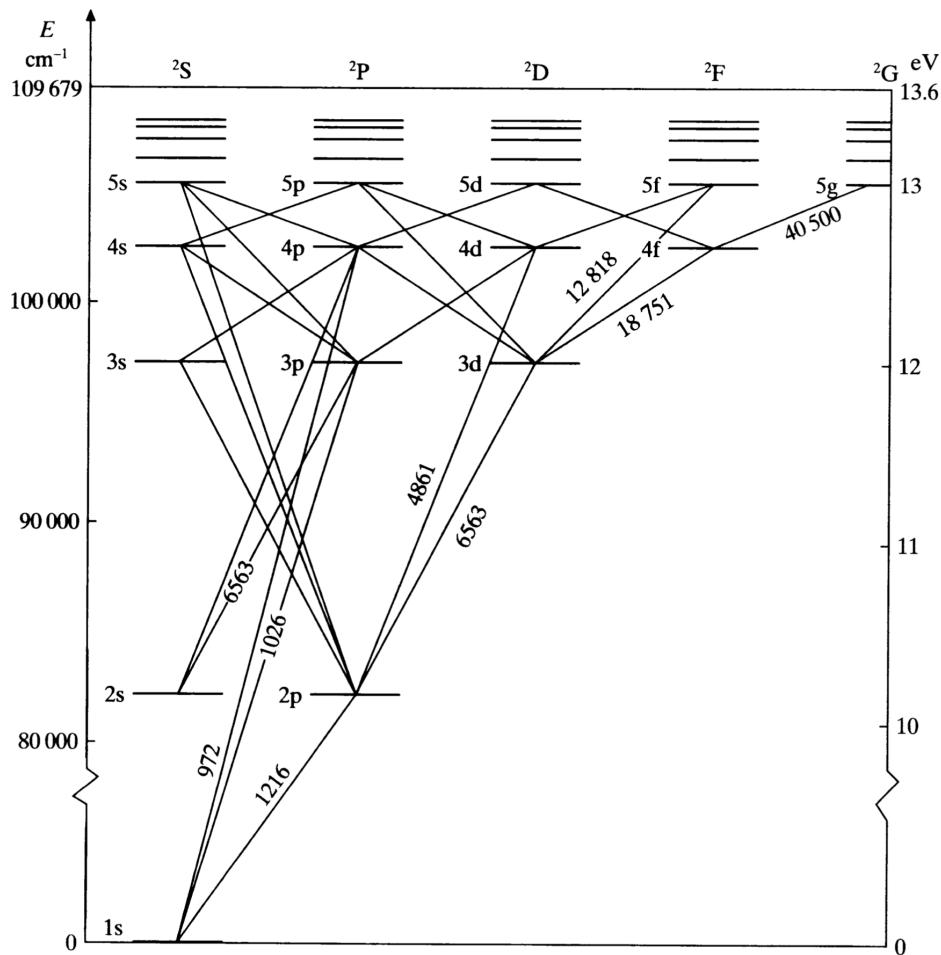


Abbildung 4.2: **Termeschema**, auch **Niveauschema** oder **Grotrian-Diagramm** für atomaren Wasserstoff. Die Ordinate zeigt die Energie über dem $1s$ Grundzustand in cm^{-1} ($8065 \text{ cm}^{-1} \equiv 1 \text{ eV}$) links und in eV rechts und die Energieniveaus sind dem Bahndrehimpuls gegenübergestellt. Übergänge welcher der $\Delta l = \pm 1$ Auswahlregel gehorchen sind mit durchgezogenen Linien dargestellt. Die Zahlen bei den Linien geben die Wellenlänge in \AAngstr\"om wieder ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$). Der \"Ubersichtlichkeit wegen\" sind nur \"Uberg\"ange zwischen den tiefer liegenden Niveaus dargestellt, und die Wellenl\"angen sind nur f\"ur eine Auswahl von Linien gezeigt. Die Feinstrukturaufspaltung ist zu klein um auf einem Diagramm dieser Skalierung gezeigt zu werden (Quelle [BJP03]).

5

Identische Teilchen

5.1 Das Prinzip der Ununterscheidbarkeit gleichartiger Teilchen

In der klassischen Mechanik verlieren gleichartige Teilchen (sagen wir Elektronen) trotz der Identität ihrer physikalischen Eigenschaften ihre „Individualität“ nicht. Man kann sich die Teilchen eines physikalischen Systems „durchnummeriert“ vorstellen und die Bewegung eines jeden Teilchens auf dessen Bahnkurve verfolgen. Somit können alle Teilchen zu einem beliebigen Zeitpunkt wieder identifiziert werden.

In der Quantenmechanik ist der Sachverhalt anders. Aufgrund des Unbestimmtheitsprinzips verliert der Begriff der Bahnkurve eines Teilchens vollkommen seinen Sinn. Lokalisieren wir die Teilchen und nummerieren sie zu einem gewissen Zeitpunkt durch, dann haben deren Koordinaten in einem folgenden Zeitpunkt keinen bestimmten Wert mehr. Lokalisieren wir ein Teilchen in einem anderen Zeitpunkt an einer Stelle des Raumes, können wir nicht angeben um welches der Teilchen es sich handelt. Gleichartige Teilchen verlieren in der Quantenmechanik ihre „Individualität“ vollkommen. Haben Teilchen gleichartige physikalische Eigenschaften bewirkt das somit die völlige Ununterscheidbarkeit der Teilchen. Man nennt dies das **Prinzip der Ununterscheidbarkeit** gleichartiger Teilchen.

Wir betrachten vorerst zwei Teilchen. Wir beschreiben das System mit der Wellenfunktion $\psi(\xi_1, \xi_2)$, wobei ξ_1 und ξ_2 sowohl die drei Koordinaten als auch die Spinprojektionen der beiden Teilchen bezeichnet. Vertauscht man die beiden Teilchen müssen die Zustände physikalisch vollkommen äquivalent sein. Die Wellenfunktion darf sich daher nur um eine Phase ändern

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1), \quad (5.1)$$

mit einer reellen Konstante α . Nochmalige Vertauschung

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \xi_2) = e^{2i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1), \quad (5.2)$$

liefert $e^{2i\alpha} = 1$ bzw. $e^{i\alpha} = \pm 1$. Somit gilt für identische Teilchen

$\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1).$

(5.3)

Es gibt also prinzipiell zwei Möglichkeiten:

- Symmetrische Wellenfunktionen (+ in Gleichung 5.3))
- Antisymmetrische Wellenfunktionen (- in Gleichung (5.3))

Die Wellenfunktionen für alle Zustände ein und desselben Systems müssen dasselbe Symmetrieverhalten haben (andernfalls wäre die Wellenfunktion eines Zustandes, der durch Superposition von Zuständen mit verschiedenen Symmetrieverhalten entsteht, weder symmetrisch noch antisymmetrisch).

Das lässt sich unmittelbar auf Systeme mit beliebig vielen gleichartigen Teilchen verallgemeinern. Wird irgendein Paar dieser Teilchen durch (anti-)symmetrische Wellenfunktionen beschrieben, dann wird jedes Paar des Systems durch (anti-)symmetrische Wellenfunktionen beschrieben, da die Teilchen alle gleichartig sind. Die Wellenfunktion gleichartiger Teilchen ändert daher bei einer Vertauschung eines beliebigen Teilchenpaars bei symmetrischen Wellenfunktionen nicht, bei antisymmetrischen Wellenfunktionen hingegen schon ihr Vorzeichen.

Durch antisymmetrische Wellenfunktionen beschriebene Teilchen nennt man **Fermionen**, symmetrische Wellenfunktionen beschreiben als **Bosonen** bezeichnete Teilchen. Hierbei handelt es sich dem Wesen nach um verschiedene Arten der Mechanik. Im Zusammenhang mit der Statistik, welche ein ideales Gas beschreibt, gehorchen Fermionen der **Fermi-Dirac Statistik** und Bosonen der **Bose-Einstein Statistik**. Die Gesetze der relativistischen Quantenmechanik zeigen weiters, dass die Statistik eindeutig mit dem Spin der Teilchen zusammenhängt. Fermionen haben halbzahligen Spin, Bosonen hingegen ganzzahligen. Die Statistik zusammengesetzter Teilchen wird bestimmt durch die gerade oder ungerade Anzahl an elementaren Fermionen die sie enthalten. Die Vertauschung zweier gleichartiger zusammengesetzter Teilchen ist der gleichzeitigen Vertauschung einiger Paare gleichartiger Elementarteilchen äquivalent. Aus einer ungeraden Anzahl elementarer Fermionen zusammengesetzte Teilchen gehorchen der Fermi-Statistik, bei einer Zusammensetzung aus einer geraden Anzahl von Fermionen gehorcht das zusammengesetzte Teilchen der Bose-Statistik. Das passt mit dem Spin überein, da ein zusammengesetztes Teilchen einen ganzzahligen (halbzahligen) Spin hat wenn es aus einer geraden (ungeraden) Anzahl von Teilchen mit halbzahligem Spin aufgebaut ist.

Atomkerne mit nicht geradzahliger relativer Atommasse (ungerade Anzahl von Protonen und Neutronen) gehorchen der Fermi-Statistik, Kerne mit geradzahliger relativer Atommasse der Bose-Statistik.

Für Atome, bestehend aus Kernen und Elektronen, hängt die Statistik davon ab, ob die Differenz zwischen relativer Atommasse und Ordnungszahl geradzahlig oder ungeradzahlig ist.

Wir betrachten ein System aus N gleichartigen Teilchen. Die Wechselwirkung zwischen den Teilchen soll vernachlässigt werden können. ψ_1, ψ_2, \dots seien zueinander orthogonale und normierte Wellenfunktionen der verschiedenen stationären Zustände, in denen sich jedes einzelne Teilchen befinden kann. Den Zustand des Gesamtsystems kann man durch die Nummern p_i der Zustände angeben, in denen sich die einzelnen Teilchen befinden.

Für ein System aus Bosonen ist die Wellenfunktion $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ des Gesamtsystems eine Summe von Produkten der Art

$$\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \cdots \psi_{p_N}(\xi_N), \quad (5.4)$$

mit allen möglichen Permutationen der verschiedenen Indizes p_i (wobei unter den p_i auch gleiche Nummern sein können). Die Summe erfüllt die erforderliche Symmetrieeigenschaft.

Für zwei Teilchen haben wir ($p_1 \neq p_2$)

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)) , \quad (5.5)$$

mit dem Normierungsfaktor $1/\sqrt{2}$. Für die Teilchenzahl N ist die normierte Wellenfunktion gegeben durch

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \left(\frac{N_1! N_2! \cdots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \cdots \psi_{p_N}(\xi_N) . \quad (5.6)$$

Die Summe läuft über alle Permutationen der verschiedenen Indizes von p_1, p_2, \dots, p_N . N_i gibt die Anzahl an, wie viele Indizes gleiche Werte i haben ($\sum N_i = N$). Bei der Integration von $|\psi|^2$ über $d\xi_1, d\xi_2, \dots, d\xi_N$ (d.h. Integration über den Raum und Summation über σ) verschwinden alle Glieder bis auf die Betragsquadrate der einzelnen Summanden. Die Gesamtzahl der Summanden ist $N!/(N_1! N_2! \cdots)$, was den Normierungsfaktor erklärt.

Für Fermionen ist die Wellenfunktion ψ die antisymmetrische Kombination aus den Produkten in Gleichung (5.4). Für zwei Teilchen ergibt sich somit

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) - \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)) . \quad (5.7)$$

Für N Teilchen erhält man die sogenannte Slater-Determinante

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix} . \quad (5.8)$$

Der Vertauschung zweier Teilchen entspricht die Vertauschung zweier Spalten der Determinante, was das Vorzeichen der Determinante ändert.

Aus der Determinante ergibt sich folgendes wichtiges Resultat: sind von den p_i zwei gleich, dann werden zwei Zeilen der Determinante gleich und die Determinante verschwindet identisch. Sie ist nur dann ungleich Null, wenn alle p_i voneinander verschieden sind. In einem System gleichartiger Fermionen können sich somit nicht zwei (oder mehr) Teilchen in demselben Zustand befinden. Das ist das sogenannte **Pauli-Prinzip** (Wolfgang Pauli, 1925).

5.2 Die Austauschwechselwirkung

Da im nichtrelativistischen Fall die elektrische Wechselwirkung von Teilchen unabhängig vom Spin ist, taucht im Hamilton-Operator in der Schrödinger-Gleichung der Spinoperator (bei abwesendem Magnetfeld) nicht auf und wirkt somit nicht auf die Spinvariable. Die Wellenfunktion kann daher als Produkt

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots) = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) , \quad (5.9)$$

aus der **Bahnfunktion** oder **Orbital** φ (die nur von den Orten der Teilchen abhängt) und der **Spinfunktion** χ (die nur von den Spins der Teilchen abhängt) geschrieben werden. Die Schrödinger-Gleichung bestimmt nur φ und lässt χ willkürlich.

Trotz der Unabhängigkeit des Hamilton-Operators vom Spin existiert eine Abhängigkeit der Energie eines Systems von dessen Gesamtspin, was im Prinzip der Ununterscheidbarkeit gleichartiger Teilchen begründet ist.

Wir betrachten zwei gleichartige Teilchen. Lösen der Schrödinger-Gleichung ergibt eine Reihe von Energieniveaus. Zu jedem gibt es bestimmte symmetrische oder antisymmetrische Bahnfunktionen $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Der Hamilton-Operator und die Schrödinger-Gleichung sind invariant unter Vertauschung der beiden gleichartigen Teilchen. Sind die Energieniveaus nicht entartet ist $\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \pm \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ analog zu oben. Bei Entartung kann man immer solche Linearkombinationen der Funktionen zu dem betreffenden Niveau wählen, dass diese Bedingung erfüllt ist.

Wenn die Teilchen Spin 0 haben, gibt es keinen Spinfaktor und $\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = +\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ wegen der Bose-Statistik. D.h. nicht alle Energieniveaus die man durch Lösen der Schrödinger-Gleichung erhält können realisiert werden. Diejenigen, zu denen antisymmetrische φ gehören, kommen nicht in Frage. Die Vertauschung zweier gleichartiger Teilchen ist einer Spiegelung des Koordinatensystems (mit Ursprung auf der Mitte der Verbindungsgeraden beider Teilchen) äquivalent. Bei dieser Spiegelung geht $\varphi \rightarrow (-1)^l \varphi$ über mit dem Bahndrehimpuls der Relativbewegung l . Daraus folgt, dass zwei gleichartige Spin 0 Teilchen nur geradzahligen Bahndrehimpuls haben können.

Als nächstes betrachten wir zwei gleichartige Spin 1/2 Teilchen. Es muss gelten $\psi(\xi_1, \xi_2) = \chi(\sigma_1, \sigma_2) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi(\xi_2, \xi_1)$, d.h.

- $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = +\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad , \quad \chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1) \quad$ oder
- $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad , \quad \chi(\sigma_1, \sigma_2) = +\chi(\sigma_2, \sigma_1)$

Als nächstes wollen wir die Korrelation aus (Anti-)Symmetrie der Spinfunktion und Gesamtspin untersuchen. Hierzu setzen wir die Zweiteilchen-Spinfunktion aus Einteilchen-Spinfunktionen zusammen. Für die antisymmetrische Spinfunktion $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1)$ gibt es nur eine nichtverschwindende Möglichkeit:

Antisymmetrisches Spin-Singlett

$$\chi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1(1/2) \chi_2(-1/2) - \chi_1(-1/2) \chi_2(1/2)) \quad (5.10)$$

Für die symmetrische Spinfunktion $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = +\chi(\sigma_2, \sigma_1)$ gibt es hingegen drei nichtverschwindende Möglichkeiten:

Symmetrisches Spin-Triplett

$$\begin{aligned} \chi_{1,1} &= \chi_1(1/2) \chi_2(1/2) \\ \chi_{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1(1/2) \chi_2(-1/2) + \chi_1(-1/2) \chi_2(1/2)) \\ \chi_{1,-1} &= \chi_1(-1/2) \chi_2(-1/2) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Der Gesamtspin ergibt sich zu

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2 , \quad (5.12)$$

wobei $\hat{\mathbf{s}}_1$ nur auf $\chi_1(\sigma)$ und analog $\hat{\mathbf{s}}_2$ nur auf $\chi_2(\sigma)$ wirkt. Wir finden

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3}{2} \hbar^2 + 2 \hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 , \quad (5.13)$$

und weiters¹

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{3}{2} \hbar^2 + \hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+} + 2 \hat{s}_{z1} \hat{s}_{z2} . \quad (5.14)$$

Einsetzen ergibt

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{0,0} &= 0 , \\ \hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{1,1} &= 2\hbar^2 \chi_{1,1} , \\ \hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{1,0} &= 2\hbar^2 \chi_{1,0} , \\ \hat{\mathbf{S}}^2 \chi_{1,-1} &= 2\hbar^2 \chi_{1,-1} , \end{aligned} \quad (5.15)$$

und

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \chi_{0,0} &= 0 , \\ \hat{S}_z \chi_{1,1} &= \hbar \chi_{1,1} , \\ \hat{S}_z \chi_{1,0} &= 0 , \\ \hat{S}_z \chi_{1,-1} &= -\hbar \chi_{1,-1} . \end{aligned} \quad (5.16)$$

Aus dem Vergleich mit

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 \chi &= S(S+1)\hbar^2 \chi , \\ \hat{S}_z \chi &= M_S \hbar \chi , \end{aligned} \quad (5.17)$$

finden wir, dass die Indizes bereits die Gesamtdrehimpulseigenwerte in der Form χ_{S,M_S} angeben, d.h. das antisymmetrisches Spin-Singlett hat Gesamtdrehimpuls $S = 0$ während das symmetrische Spin-Triplett die drei Zustände für Gesamtdrehimpuls $S = 1$ darstellen.²

Zusammenfassend ergibt sich somit für die Gesamtwellenfunktion für eine

- **Symmetrische Bahnfunktion** $\varphi_+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = +\varphi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{0,0} \quad - \quad \text{Gesamtspin } 0 \quad (5.18)$$

¹Hierbei haben wir $\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i \hat{s}_y$ eingeführt, womit sich $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 = \frac{1}{2} (\hat{s}_{1+} \hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-} \hat{s}_{2+}) + \hat{s}_{z1} \hat{s}_{z2}$ ergibt. Mittels der Pauli-Matrizen ergibt sich sofort, dass $\hat{s}_+ \chi(1/2) = 0$, $\hat{s}_+ \chi(-1/2) = \hbar \chi(1/2)$, $\hat{s}_- \chi(1/2) = \hbar \chi(-1/2)$ und $\hat{s}_- \chi(-1/2) = 0$.

²Wir wollen der Vollständigkeit halber auch anmerken, wie man durch explizites Nachrechnen leicht überprüft, dass die reinen Produktzustände $\chi_A = \chi_1(1/2) \chi_2(1/2)$, $\chi_B = \chi_1(1/2) \chi_2(-1/2)$, $\chi_C = \chi_1(-1/2) \chi_2(1/2)$ und $\chi_D = \chi_1(-1/2) \chi_2(-1/2)$ Eigenzustände von \hat{S}_z sind. Weiters wissen wir bereits, dass χ_A und χ_D Eigenzustände von $\hat{\mathbf{S}}^2$ mit $S = 1$ sind. Allerdings sind χ_B und χ_C keine Eigenzustände von $\hat{\mathbf{S}}^2$.

- **Antisymmetrische Bahnfunktion** $\varphi_-(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \begin{cases} \varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{1,1} \\ \varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{1,0} \\ \varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{1,-1} \end{cases} \quad - \quad \text{Gesamtspin 1} \quad (5.19)$$

Es hängt also vom Gesamtspin ab welche Energiewerte möglich sind. Man kann von einer eigenartigen Wechselwirkung der Teilchen sprechen, die diese Abhängigkeit hervorbringt. Die Wechselwirkung heißt **Austauschwechselwirkung**. Sie ist ein reiner Quanteneffekt und verschwindet (wie der Spin selbst) beim Grenzübergang zur klassischen Mechanik vollkommen.

Zu jedem Energieniveau gehört ein bestimmter Gesamtspin (0 oder 1). Der Zusammenhang zwischen Spinwerten und Energieniveaus bleibt bei beliebig vielen Spin 1/2 Teilchen erhalten, gilt allerdings nicht für Systeme aus Teilchen mit Spin > 1/2.

6

Zwei-Elektronen Atome

Als Vorbereitung für die Untersuchung von Mehrelektronenatomen betrachten wir den einfachsten Fall, Atome bzw. Ionen mit Kernladung Ze und 2 Elektronen. Dazu zählen beispielsweise H^- ($Z = 1$), He ($Z = 2$), Li^+ ($Z = 3$) usw. Die Bedeutung dieses Falles liegt darin, dass das Pauli-Prinzip mitsamt seinen Auswirkungen sowie diverse Näherungsverfahren hier am Einfachsten untersucht werden können.

Relativistische Korrekturen, d.h. die Feinstruktur, sowie Korrekturen durch die endliche Masse und Ausdehnung des Kerns, welche die Hyperfeinstruktur verursachen, haben wir bereits in früheren Kapiteln besprochen. In diesem und im folgenden Kapitel beschränken wir uns daher auf die Untersuchung der nicht-relativistischen Theorie mit einem punktförmigen und unendlich massiven Kern.

6.1 Die Schrödinger-Gleichung für Zwei-Elektronen Atome

Wir betrachten nur die Coulombwechselwirkungen zwischen dem Kern (Ladung Ze) mit unendlicher Masse und den Elektronen. Die Schrödinger-Gleichung lautet in diesem Fall (\mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 sind Ortsvektoren der Elektronen)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{r_2} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (6.1)$$

wobei $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Wir führen **atomare Einheiten** ein (siehe Fußnote 9).¹ Die Schrödinger-Gleichung lautet in atomaren Einheiten

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta_{r_1} - \frac{1}{2} \Delta_{r_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (6.2)$$

Aufgrund des letzten Potentialterms $1/r_{12}$ separiert die Wellenfunktion nicht in das Produkt der Wellenfunktionen beider Elektronen. Solch eine Wellenfunktion beschreibt einen **verschränkten Zustand**.

Je nachdem ob die Bahnwellenfunktion (anti-)symmetrisch ist, spricht man von

¹Für die Atome mit nur einem Elektron (i.e. Wasserstoffartige Atome) stellen die Coulomb-Einheiten, welche die Kernladung Ze „absorbieren“, die natürliche Wahl dar. Bei Atomen mit mehreren Elektronen hingegen verwendet man zweckmäßigerweise atomare Einheiten, da in die Wechselwirkung zwischen den Elektronen die Kernladung nicht eingeht. Wir bemerken, dass sich aus der dimensionslosen Sommerfeld Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ für die Lichtgeschwindigkeit in atomaren Einheiten $c = 1/\alpha \simeq 137.04$ ergibt.

- $\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = +\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – Para-Zustände
- $\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = -\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – Ortho-Zustände

Im weiteren betrachten wir auch den Spin, somit führen wir die vollständige Wellenfunktion ein

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \longrightarrow \psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2).$$

6.2 Störungstheoretische Behandlung

Wir zerlegen den Hamilton-Operator wie folgt

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

wobei

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\frac{1}{2} \Delta_{r_1} - \frac{1}{2} \Delta_{r_2} + \hat{V}_1(r_1) + \hat{V}_2(r_2), \\ \hat{V} &= -\frac{Z}{r_1} - \hat{V}_1(r_1) - \frac{Z}{r_2} - \hat{V}_2(r_2) + \frac{1}{r_{12}},\end{aligned}\tag{6.3}$$

wobei die frei wählbaren Einteilchen-Potentiale $\hat{V}_1(r_1)$ und $\hat{V}_2(r_2)$ im Hamilton-Operator \hat{H} nicht aufscheinen. Sie reflektieren die Freiheit in der Wahl der Aufspaltung eines Hamilton-Operators in einen ungestörten Teil \hat{H}_0 und eine Störung \hat{V} . Mit der Einschränkung auf Einteilchen-Potentiale erreichen wir, dass \hat{H}_0 in die Summe zweier Terme, abhängig nur von \mathbf{r}_1 bzw. nur von \mathbf{r}_2 , zerfällt. Daraus folgt, dass die Lösungen, die aus \hat{H}_0 resultieren, die entsprechend symmetrierten Produkte von 1-Teilchen Lösungen sind.

Die Verwendung der Störungstheorie ist nur sinnvoll, wenn die üblichen Anforderungen erfüllt sind:

- \hat{H}_0 führt auf eine lösbare Gleichung
- Der Effekt von \hat{V} soll klein sein

Diese Anforderungen müssen durch entsprechende Wahl der Einteilchen-Potentiale $\hat{V}_1(r_1)$ und $\hat{V}_2(r_2)$ erfüllt werden.

Man unterscheidet drei Arten von Lösungen:

1. Grundzustand des Atoms mit beiden Elektronen im jeweiligen Grundzustand
2. Ein Elektron im Grundzustand, das andere in einem angeregten Zustand
3. Beide Elektronen in einem angeregten Zustand

Fall 3 ist eher uninteressant für He und He-artige Ionen, da die Energie bei zwei angeregten Elektronen höher ist als die Grundzustandsenergie He^+ plus freies Elektron. D.h. zwei angeregte Elektronen im He-Atom zerfallen typischerweise rasch in ein He^+ -Ion und freies Elektron, weshalb wir Fall 3 nicht weiter betrachten.

6.2.1 Der Grundzustand

Hier befinden sich beide Elektronen im selben Zustand, somit ist es physikalisch sinnvoll $\hat{V}_1 = \hat{V}_2$ anzunehmen (jedes Elektron sieht dasselbe Potential). Daraus folgt unmittelbar, dass die antisymmetrische Lösung verschwindet ($\varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_1(\mathbf{r}_2) - \varphi_1(\mathbf{r}_2)\varphi_1(\mathbf{r}_1) = 0$) und der Grundzustand ein Para-Zustand ist.

Im Folgenden verwenden wir die einfachste Wahl $\hat{V}_1 = \hat{V}_2 = -\frac{Z}{r}$ was für den Störoperator $\hat{V} = \frac{1}{r_{12}}$ ergibt. Das stellt nicht die Wahl dar, welche die genauesten Resultate für den Grundzustand liefert, allerdings kommt man so am Einfachsten zu qualitativ richtigen Resultaten. Wir werden später Methoden kennenlernen, welche genauere Resultate liefern, jedoch wesentlich aufwendiger sind.

Für den Grundzustand für Wasserstoff haben wir in **Coulomb-Einheiten** gefunden

$$\varphi_{100} = R_{10} Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \quad (6.4)$$

In **atomaren Einheiten** erhalten wir daraus²

$$\varphi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}, \quad (6.5)$$

und für die symmetrische Bahnwellenfunktion von Helium bzw. heliumartigen Ionen

$$\boxed{\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi} e^{-Z(r_1+r_2)}} \quad (6.6)$$

Analog ist die Grundzustandsenergie vom Wasserstoff in **Coulomb-Einheiten**

$$E_0 = -\frac{1}{2}, \quad (6.7)$$

wie wir gesehen haben. In **atomaren Einheiten** ergibt sich analog³

$$\boxed{E_0 = -\frac{Z^2}{2}}, \quad (6.8)$$

und somit für die Grundzustandsenergie heliumartiger Ionen in atomaren Einheiten

$$\boxed{E_0^{(0)} = -Z^2}. \quad (6.9)$$

Gemäß der Störungstheorie Gleichung (C.12) berechnet sich die Energiekorrektur zur ersten Ordnung als

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \int |\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \frac{1}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2 \\ &= \frac{Z^6}{\pi^2} \int \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2. \end{aligned} \quad (6.10)$$

²Um zu atomaren Einheiten überzugehen müssen wir die reduzierte Masse m durch die Elektronenmasse m_e ersetzen (siehe Fußnote 9). Weiters ersetzt man $r \rightarrow Zr$, $\psi \rightarrow Z^{3/2}\psi$, was aus der Normierung $\int |\psi|^2 d^3r = 1$ folgt.

³Siehe Fußnote 9.

Dieses Integral ist im *Appendix A.4* ausgeführt und ergibt die Lösung

$$E_0^{(1)} = \frac{5Z}{8} . \quad (6.11)$$

Für Helium erhalten wir somit für die Grundzustandsenergie

$$\begin{aligned} E_0 &\simeq E_0^{(0)} + E_0^{(1)} \\ &= -4 + 1.25 = -2.75 , \end{aligned} \quad (6.12)$$

in atomaren Einheiten. Der experimentelle Wert liegt bei -2.904 atomaren Einheiten (siehe Abbildung 6.1).⁴

Wir sehen, dass bei unserer Wahl der Einteilchen-Potentiale die Störung nicht besonders klein ist. Somit ist die Übereinstimmung mit dem experimentellen Resultat nicht allzu groß. Genauere Berechnungen berücksichtigen, dass ein Elektron teilweise die Kernladung vor dem anderen Elektron abschirmt.

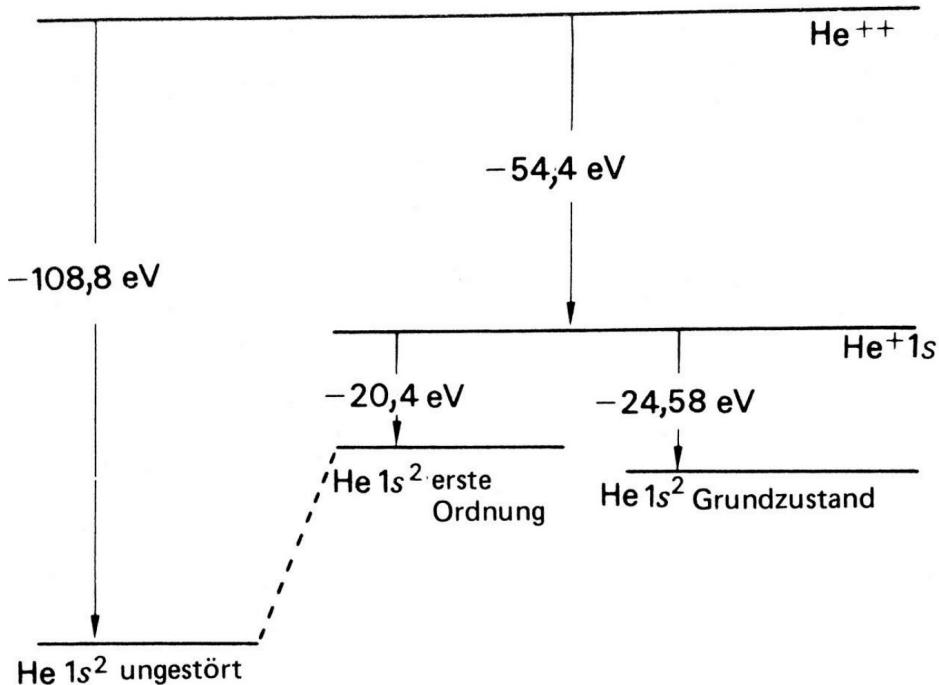


Abbildung 6.1: Energieniveaudiagramm für He, welches das theoretische Niveau des Grundzustandes zeigt, sowohl ungestört als auch in erster Ordnung Störungstheorie und weiters das tatsächliche Niveau des Grundzustandes im Vergleich zu den Ionen He^+ und He^{++} (Quelle [Woo75]).

⁴Wie in Fußnote 9 angegeben ist die Energieeinheit in atomaren Einheiten 27.21 eV, d.h. die Energie in üblichen Einheiten ergibt sich aus der Energie in atomaren Einheiten durch Multiplikation mit 27.21 eV.

6.2.2 Ein Elektron im Grund-, das Zweite in einem angeregten Zustand

Vor der eigentlichen Berechnung wollen wir noch ein paar allgemeine, auf Symmetrien basierende Überlegungen anstellen.

Für Ortho-Zustände gilt, dass für beide Elektronen am selben Ort ($\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$) die Wellenfunktion verschwindet, da dann $\varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = -\varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 0$ ist. Somit verschwindet die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich zwei Elektronen am selben Ort befinden. Das ist im Gegensatz zu Para-Zuständen, wo beide Elektronen einander beliebig nahe kommen können. Somit wirkt bei Ortho-Zuständen die elektrostatische Abstoßung der beiden Elektronen weniger. Demgemäß erwarten wir, dass die Energie bei Para-Zuständen, welche aus denselben Bahnzuständen der Einzelelektronen zusammengesetzt sind, höher sind als bei den entsprechenden Ortho-Zuständen.⁵

Weiters erwarten wir, dass optische Übergänge zwischen Para- und Ortho-Zuständen verboten sind, da der Dipol-Operator proportional zu $\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ ist und das Übergangsmatrixelement somit beispielsweise die Form

$$\propto \sum_{i=-1}^1 \left(\chi_{1,i}^\dagger \chi_{0,0} \right) \int \varphi_-^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \varphi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2 ,$$

annimmt, d.h. der Dipol-Operator wirkt nicht auf den Spin. Zum einen verschwindet der Spinanteil, da $\chi_{1,i}^\dagger \chi_{0,0} = 0$ ist. Darüberhinaus verschwindet aber auch das Raumintegral, da $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ wie auch $\varphi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ das Vorzeichen unter der Vertauschung $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ nicht ändern, im Gegensatz zu $\varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Zusammenfassend finden wir somit folgendes.

Das Niveauschema von Atomen mit zwei Elektronen besteht aus zwei Systemen. Eines enthält Triplets (e.g. Ortho-Helium), das andere enthält Singletts (e.g. Para-Helium). Beide Systeme koppeln optisch nicht aneinander. Der niedrigste Energiezustand ist ein Para-Zustand. Für alle angeregten Zustände sind jedoch die Energieniveaus der Para-Zustände höher als die der entsprechenden Ortho-Zustände.

Die spektroskopische Notation ist konventionellerweise folgendermaßen

$$n^{2S+1}L ,$$

wobei L der Gesamtbahndrehimpuls (S, P, D etc.), $2S + 1$ die Multiplizität (1 oder 3) und n die Ordnung der Niveaus sind. Das ergibt für die ersten Zustände (siehe Abbildung 6.2)

Konfiguration	Term(e)
$1s^2$	1^1S
$1s\ 2s$	2^3S
	2^1S
$1s\ 2p$	2^3P
	2^1P

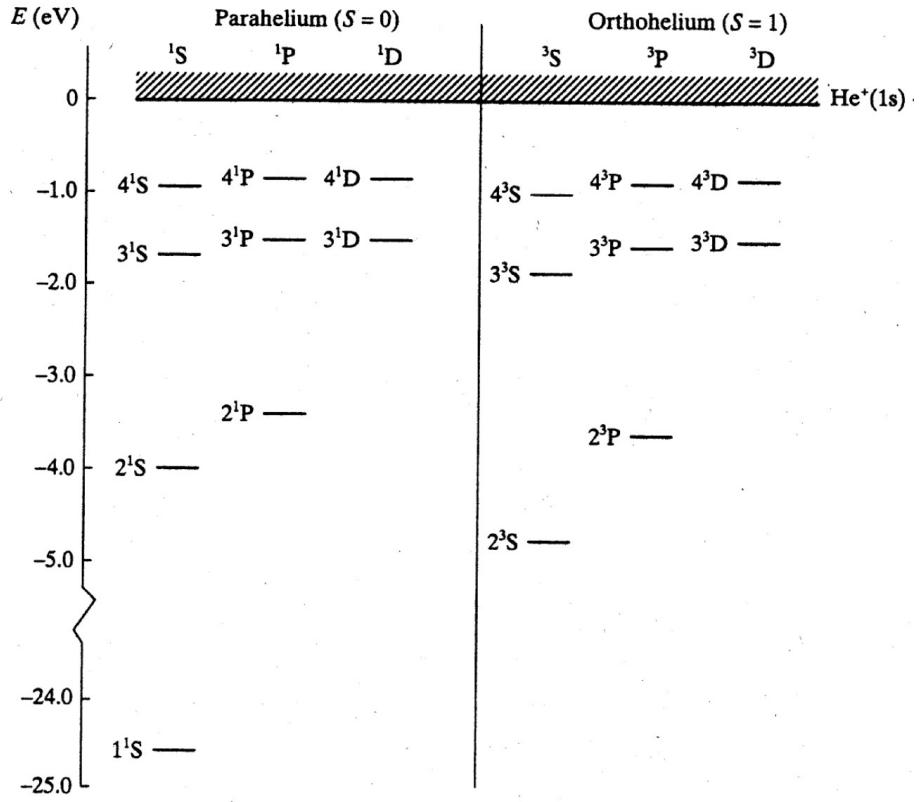


Abbildung 6.2: Die experimentellen Werte der niedrigsten Energieniveaus von Helium. Die Energieskala ist so gewählt, dass $E = 0$ der Ionisationsschwelle entspricht. Die Konfiguration jedes einzelnen Niveaus ist von der Form $1s\ n l$. Die doppelt angeregten Zustände (z.B. $2s\ nl$) liegen auf dieser Skala bei positiven Energien und zwar innerhalb des $\text{He}^+(1s) + e^-$ Kontinuums (Quelle [BJP03]).

$\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{\mathbf{L}}_z$ sind auch unter der Störung $\frac{1}{r_{12}}$ Konstanten der Bewegung bei Vernachlässigung relativistischer Effekte.

Für die störungstheoretische Beschreibung der Energieniveaus gehen wir analog wie beim Grundzustand vor. Wir verwenden denselben Hamilton-Operator \hat{H}_0 samt Störoperator \hat{V} und Wellenfunktionen des Wasserstoffs. Wir haben entartete Zustände und müssen somit entartete Störungstheorie anwenden. Es gilt die bekannte Entartung in l und m . Darüber hinaus gibt es noch die sogenannte **Austauschentartung**. Die Energieniveaus von \hat{H}_0 , welche ja die Summe der Energieniveaus zweier wasserstoffähnlicher Atome sind, sind entartet bezüglich des Austausches der beiden Elektronen.

Wie wir aus *Appendix C.3* wissen (siehe Gleichung (C.13)), erhält man beim Vorliegen einer s -fachen Entartung die Energiekorrektur zum n -ten Niveau genauso wie im Falle ohne Entartung durch

$$E^{(1)} = V_{kk} = \int d^3r \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_k^{(0)}, \quad (6.13)$$

wobei $k = n, n', \dots$ die s entarteten Eigenfunktionen des n -ten Niveaus charakterisieren, falls

⁵Mit "entsprechend" meinen wir hier, dass dabei dieselben Einteilchen-Bahnwellenfunktionen verwendet werden.

für zwei entartete Zustände k und k' gilt

$$V_{kk'} = \int d^3r \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_{k'}^{(0)} = 0 \quad \text{für } k \neq k'. \quad (6.14)$$

Im Allgemeinen hat man also s Energiekorrekturen $E^{(1)}$.

Mit einem Störoperator, der nur von $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ abhängt sowie unseren Basiszuständen mit den Bahnfunktionen $\varphi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ und $\varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ bestimmter Permutationssymmetrie, verschwinden die Matrixelemente $V_{kk'}$ für zwei entartete Zustände, d.h. Gleichung (6.14) ist bereits erfüllt. Diese „Diagonalität“ ist bzgl. l und m unmittelbar evident, wenn man die Entwicklung von $\frac{1}{r_{12}}$ in Kugelflächenfunktionen Y_{lm} aus *Appendix A.4* verwendet sowie deren Orthogonalität. Da weiters $\frac{1}{r_{12}}$ das Vorzeichen nicht ändert unter Vertauschung der beiden Elektronen folgt, dass die Matrixelemente auch verschwinden wenn sie sowohl einen Ortho- als auch einen Para-Zustand enthalten. Somit sind wir bereits in der richtigen Basis welche diagonal bezüglich des Störoperators ist, d.h. Gleichung (6.14) erfüllt. Somit können wir analog wie in der nichtentarteten Störungstheorie vorgehen, d.h. Gleichung (6.13) anwenden.

Allgemein befinden sich die Elektronen in Zuständen mit den Bahnfunktionen $\varphi_1(\mathbf{r}_1)$ und $\varphi_2(\mathbf{r}_2)$ sein. Wir haben in Kapitel 5 gefunden haben, gehören zu den Zuständen des Systems mit dem Gesamtspin $S = 0$ und $S = 1$ ein symmetrisiertes bzw. ein antisymmetrisiertes Produkt⁶

$$\varphi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_1(\mathbf{r}_2) \varphi_2(\mathbf{r}_1)). \quad (6.15)$$

Hängt die Störung nur von $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ab, erhalten wir (die Spinzustände sind normiert und tragen nicht weiter bei)

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{\pm} | V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) | \varphi_{\pm} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int (\varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \varphi_2^*(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_1^*(\mathbf{r}_2) \varphi_2^*(\mathbf{r}_1)) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) (\varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_1(\mathbf{r}_2) \varphi_2(\mathbf{r}_1)) d^3r_1 d^3r_2 \\ &= J \pm K, \end{aligned} \quad (6.16)$$

mit dem sogenannten **Coulomb-Integral**

$$J = \int V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) |\varphi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_2(\mathbf{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2, \quad (6.17)$$

das mit der Austauschwechselwirkung nichts zu tun hat, sowie dem sogenannten **Austauschintegral**

$$K = \int V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \varphi_1(\mathbf{r}_2) \varphi_2^*(\mathbf{r}_2) \varphi_2(\mathbf{r}_1) d^3r_1 d^3r_2. \quad (6.18)$$

⁶Der Index 1 und 2 bei φ_1 bzw. φ_2 steht generell stellvertretend für alle Quantenzahlen, die einen Zustand einer Bahnwellenfunktion eindeutig charakterisieren, in unserem Fall also nlm des ersten bzw. zweiten Elektrons.

D.h. für jeden Para-Zustand ($S = 0$) erhalten wir

$$\Delta E_{S=0} = J + K , \quad (6.19)$$

und für jeden Ortho-Zustand ($S = 1$)

$$\Delta E_{S=1} = J - K . \quad (6.20)$$

Beide Fälle kann man folgendermaßen zusammenfassen

$$\Delta E = J + \left(1 - \frac{\langle \hat{S}^2 \rangle}{\hbar^2} \right) K , \quad (6.21)$$

und da

$$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 = \frac{3}{2} \hbar^2 + 2 \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 , \quad (6.22)$$

folgt

$$\boxed{\Delta E = J - \frac{1}{2} \left(1 + 4 \frac{\langle \hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2 \rangle}{\hbar^2} \right) K .} \quad (6.23)$$

In unserem spezifischen Fall haben wir

$$\begin{aligned} \varphi_1(\mathbf{r}_1) &= R_{10}(r_1) Y_{00}(\Omega_1) , \\ \varphi_2(\mathbf{r}_2) &= R_{nl}(r_2) Y_{lm}(\Omega_2) , \end{aligned} \quad (6.24)$$

und somit

$$\hat{V} = \frac{1}{r_{12}} = \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{4\pi}{2l'+1} \frac{r_{<}^{l'}}{r_{>}^{l'+1}} Y_{l'm'}^*(\Omega_1) Y_{l'm'}(\Omega_2) . \quad (6.25)$$

Für das Coulomb-Integral haben wir⁷

$$\begin{aligned} J_{nl} &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_1 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{4\pi}{2l'+1} \frac{r_{<}^{l'}}{r_{>}^{l'+1}} Y_{l'm'}^*(\Omega_1) Y_{l'm'}(\Omega_2) \\ &\quad \times R_{10}^2(r_1) |Y_{00}(\Omega_1)|^2 R_{nl}^2(r_2) |Y_{lm}(\Omega_2)|^2 \\ &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \sqrt{4\pi} \frac{1}{r_{>}} Y_{00}(\Omega_2) R_{10}^2(r_1) R_{nl}^2(r_2) |Y_{lm}(\Omega_2)|^2 \\ &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \frac{1}{r_{>}} R_{10}^2(r_1) R_{nl}^2(r_2) |Y_{lm}(\Omega_2)|^2 , \end{aligned}$$

⁷Wir verwenden, dass $|Y_{00}(\Omega_1)|^2 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Y_{00}(\Omega_1)$.

und somit

$$J_{nl} = \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{1}{r_>} R_{10}^2(r_1) R_{nl}^2(r_2). \quad (6.26)$$

Weiters finden wir für das Austauschintegral

$$\begin{aligned} K_{nl} &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_1 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \sum_{l'=0}^\infty \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{4\pi}{2l'+1} \frac{r_<^{l'}}{r_>^{l'+1}} Y_{l'm'}^*(\Omega_1) Y_{l'm'}(\Omega_2) \\ &\quad \times R_{10}(r_1) Y_{00}^*(\Omega_1) R_{10}(r_2) Y_{00}(\Omega_2) R_{nl}(r_2) Y_{lm}^*(\Omega_2) R_{nl}(r_1) Y_{lm}(\Omega_1) \\ &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_1 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \sum_{l'=0}^\infty \sum_{m'=-l'}^{l'} \frac{1}{2l'+1} \frac{r_<^{l'}}{r_>^{l'+1}} Y_{l'm'}^*(\Omega_1) Y_{l'm'}(\Omega_2) \\ &\quad \times R_{10}(r_1) R_{10}(r_2) R_{nl}(r_2) Y_{lm}^*(\Omega_2) R_{nl}(r_1) Y_{lm}(\Omega_1) \\ &= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \frac{1}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} Y_{lm}(\Omega_2) R_{10}(r_1) R_{10}(r_2) R_{nl}(r_2) Y_{lm}^*(\Omega_2) R_{nl}(r_1), \end{aligned}$$

und letztlich

$$K_{nl} = \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{1}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} R_{10}(r_1) R_{nl}(r_1) R_{10}(r_2) R_{nl}(r_2). \quad (6.27)$$

Wir finden, dass J_{nl} und K_{nl} in unserem Fall von n und l abhängen, jedoch nicht von m (da $\hat{V} = \frac{1}{r_{12}}$ mit \hat{L}_z kommutiert - das ist offensichtlich aber kann gezeigt werden, indem man $\frac{1}{r_{12}}$ durch Kugelflächenfunktionen darstellt).

Dass $J_{nl} > 0$ ist offensichtlich, weiters kann man auch zeigen, dass $K_{nl} > 0$ ist. Das passt mit Gleichung (6.23) überein, da der $S = 0$ Zustand energetisch höher liegt als der $S = 1$ Zustand. Bemerkenswert ist außerdem die Abhängigkeit von $\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2$, der relativen Orientierung der Spins, obwohl so eine Abhängigkeit im Hamilton-Operator nicht explizit vorkommt. Qualitativ wird K_{nl} für größere n und l kleiner, da der Überlapp zwischen dem angeregten und dem $1s$ Elektron dabei kleiner wird. Da $J_{nl} \sim K_{nl}$, ist die Austauschkraft größtenteils der Coulombkraft vergleichbar und somit weit größer als relativistische Korrekturen! Werner Heisenberg fand als Erster, dass die Austauschkraft so groß ist, dass sie in manchen Festkörpern sogar die Spin-Orientierung fixiert, was die Ursache für den Ferromagnetismus darstellt.

Für die Energie von Helium erhalten wir also

$$E_{nl}^{\text{He}} = E_1 + E_n + J_{nl} \pm K_{nl}, \quad (6.28)$$

wobei E_n die Energie eines Elektrons im Zustand n ist (siehe Abbildung 6.3). Ionisiert man

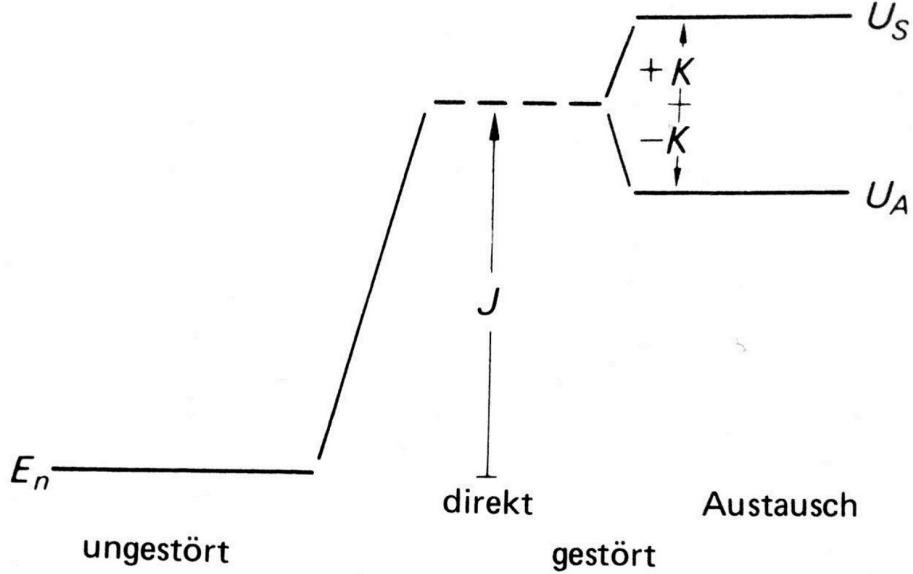


Abbildung 6.3: Schematisches Diagramm für die Energieniveaus für einen angeregten Zustand des He, welches den Effekt des Coulomb- und Austauschintegrals zeigt (Quelle [Woo75]).

He (bzw. ein He-artiges Atom), bleibt lediglich ein Elektron im Grundzustand zurück und die Energie ergibt sich zu

$$E_n^{\text{He}^+} = E_1 .$$

Die **Ionisationsenergie** E^I ist somit die Differenz

$$\boxed{E_{nl}^I = E_n^{\text{He}^+} - E_{nl}^{\text{He}} \\ = -E_n - J_{nl} \mp K_{nl} .} \quad (6.29)$$

Da weiters J und K von l abhängen wird die Coulomb-Entartung durch die Störung $\hat{V} = \frac{1}{r_{12}}$ aufgehoben. Das liegt daran, dass die Stärke der Abschirmung von der Exzentrizität der Bahn des äußeren Elektrons abhängt.

Eine Verbesserung der Resultate erhält man indem man berücksichtigt, dass das Elektron im Grundzustand den Kern von dem angeregten Elektron abschirmt. Man beschreibt dies indem man die Potentiale aus Gleichung (6.3) ersetzt

$$\begin{aligned} \hat{V}_1(r_1) &= -\frac{Z}{r_1} , \\ \hat{V}_2(r_2) &= -\frac{Z}{r_2} \longrightarrow -\frac{Z-S}{r_2} = -\frac{Z_S}{r_2} , \end{aligned} \quad (6.30)$$

wo S die Abschirmung beschreibt. S kann konstant sein oder als Funktion von r_2 genommen werden. In ersterem Fall hat man noch Wasserstoff-Funktionen jedoch nun für eine effektive Kernladung Z_S , in letzterem Fall hat man jedoch kein Coulomb-Feld mehr (was auch die Coulomb-Entartung in l aufheben würde). Wir erwarten, dass $S = 0$ für $r_2 = 0$ und $S = 1$

für $r_2 \rightarrow \infty$. In letzterem Fall wäre das ungestörte Potential

$$\begin{aligned}\hat{V}_1(r_1) &= -\frac{Z}{r_1}, \\ \hat{V}_2(r_2) &= -\frac{Z-1}{r_2},\end{aligned}\tag{6.31}$$

was auf einen Vorschlag von Heisenberg zurückgeht.

Eine genauere Untersuchung dieser sogenannten **Zentralfeldnäherung** folgt im nächsten Kapitel. Es sollte noch erwähnt werden, dass der abschirmende Effekt des jeweils anderen Elektrons von dessen dynamischen Zustand abhängt. Somit kann ein einzelnes Potential $V(r)$ nicht einmal näherungsweise das gesamte Energiespektrum eines Atoms beschreiben.

6.2.3 Die Variationsmethode von Rayleigh-Ritz

Die erfolgreichste Methode um Grundzustände von Zwei-Elektronen Atomen zu ermitteln ist die **Rayleigh-Ritz Variationsmethode**. Die Energien der Grundzustände können damit genau ermittelt werden, die entsprechenden Wellenfunktionen ebenso, jedoch weniger genau.

Für Atome mit mehr Elektronen, wird diese Methode jedoch extrem aufwendig. Eine hierfür geeigneter Methode ist die des **selbstkonsistenten Feldes**, welche wir im nächsten Kapitel besprechen.

7

Mehr-Elektronen Atome

Wir betrachten ein Atom bzw. Ion mit einem Kern der Ladung Ze und N Elektronen. Als Näherungen betrachten wir wieder den Kern als unendlich massiv und punktförmig und vernachlässigen relativistische Korrekturen.

In atomaren Einheiten lautet der Hamilton-Operator

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}}, \quad (7.1)$$

mit der Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = E \psi(\xi_1, \dots, \xi_N). \quad (7.2)$$

Wegen der Terme $\frac{1}{r_{ij}}$ ist die Schrödinger-Gleichung für die Ortswellenfunktion nicht separabel unter Vernachlässigung der Spins, so wie beim Helium. Im Gegensatz zu Helium jedoch können nun die $\frac{1}{r_{ij}}$ -Terme nicht mehr als Störung behandelt werden, da es nun viele solcher Terme gibt und ihr Effekt in Summe von der Größenordnung her mit der Kernanziehung vergleichbar sein kann. Man muss daher einen neuen ungestörten Hamilton-Operator \hat{H}_0 finden, der die Abstoßung der Elektronen teilweise enthält und einfach genug ist um die Schrödinger-Gleichung mit \hat{H}_0 zu lösen. Der Lösungsvorschlag von *Douglas R. Hartree & John C. Slater* wird Zentralfeld-Näherung genannt.

7.1 Die Zentralfeld-Näherung bzw. Hartree-Methode

Wir nehmen mit Hartree an, dass jedes Elektron durch eine eigene Wellenfunktion beschrieben wird. Daraus folgt, dass jedes Elektron ein äquivalentes Potential, welches durch den Kern und die anderen Elektronen verursacht wird, spürt. Man postuliert für den Effekt der anderen Elektronen, dass ihre Ladungsdichte gleich $-e$ Mal deren Wahrscheinlichkeitsdichte ist.

Für das i -te Elektron erhalten wir somit für das Potential

$$U_i(\mathbf{r}_1) = -\frac{Z}{r_1} + \sum_{j \neq i} \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{12}} dV_2. \quad (7.3)$$

Der Index i bzw. j beinhaltet alle Quantenzahlen, welche die Bahnwellenfunktion vollständig beschreiben. Für asymptotisch große Entfernungen vom Kern müssen wir¹

$$\lim_{r_1 \rightarrow \infty} U_i(\mathbf{r}_1) = -\frac{Z}{r_1} + \frac{N-1}{r_1}, \quad (7.4)$$

erhalten. Für asymptotisch kleine Abstände hingegen erhalten wir²

$$\begin{aligned} \lim_{r_1 \rightarrow 0} U_i(\mathbf{r}_1) &= -\frac{Z}{r_1} + \sum_{j \neq i} \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}_2)|^2}{r_2} dV_2 \\ &\rightarrow -\frac{Z}{r_1}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Wir finden somit bei großen Abständen, dass die übrigen Elektronen den Kern abschirmen, während bei kleinen Abständen das reine Kernpotential zu spüren ist. Die Schrödinger-Gleichung separiert nun zu N Gleichungen für jedes Elektron.

Als nächste Näherung ersetzt man jedes Potential durch das entsprechende über den Raumwinkel gemittelte Potential. Man erhält dadurch die sphärisch symmetrischen Potentiale³

$$\begin{aligned} U_i(r_1) &= \frac{1}{4\pi} \int U_i(\mathbf{r}_1) d\Omega \\ &= -\frac{Z}{r_1} + \frac{1}{4\pi} \sum_{j \neq i} \int d\Omega \int dV_2 \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{12}}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Diese Näherung nennt sich **Zentralfeld-Näherung**. Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta_i + U_i(r_i) \right), \\ \hat{V} &= \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N \left(\frac{Z}{r_i} + U_i(r_i) \right). \end{aligned} \quad (7.7)$$

Es zeigt sich, dass die Zentralfeld-Näherung allgemein eine sehr gute Näherung für Atome darstellt. Was wir nun erreicht haben ist, dass \hat{V} nun eine kleine Störung darstellt. Wir vernachlässigen daher \hat{V} im Folgenden und untersuchen nur mehr \hat{H}_0 .

Die Bahnwellenfunktion ist durch das Produkt

$$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \varphi_{i1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{i2}(\mathbf{r}_2) \cdots \varphi_{iN}(\mathbf{r}_N), \quad (7.8)$$

¹Wir bemerken, dass offensichtlich $\lim_{r_1 \rightarrow \infty} r_{12} \rightarrow r_1$ gilt. Weiters verwenden wir hierbei, dass für die Norm $\int |\varphi_j(\mathbf{r}_2)|^2 dV_2 = 1$ gilt.

²Wir bemerken, dass offensichtlich $\lim_{r_1 \rightarrow 0} r_{12} \rightarrow r_2$ gilt. Weiters verwenden wir hierbei, dass $\sum_{j \neq i} \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}_2)|^2}{r_2} dV_2$ eine endliche Konstante ist.

³Man beachte, dass nach der Mittelung das Potential nur mehr vom Radius r_1 und nicht mehr vom Vektor \mathbf{r}_1 abhängt.

gegeben. Die Schrödinger-Gleichung mit \hat{H}_0 separiert zu N verschiedenen Schrödinger-Gleichungen für jedes einzelne Elektron⁴

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta_i + U_i(r_i) \right) \varphi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \varphi_i(\mathbf{r}_i). \quad (7.9)$$

Aufgrund der sphärischen Symmetrie des Hamilton-Operator handelt es sich um eine Bewegung im kugelsymmetrischen Feld, welche wir bereits in Kapitel 1.2 behandelt haben. Wir gehen somit zu Kugelkoordinaten über und können die Bahnwellenfunktion wie folgt separieren

$$\varphi_i(\mathbf{r}_i) = R_{nl}(r_i) Y_{lm}(\Omega_i) = \frac{\chi_{nl}(r_i)}{r} Y_{lm}(\Omega_i). \quad (7.10)$$

Die Radialfunktionen erfüllen die Gleichung (1.15), welche in atomaren Einheiten die Form

$$\boxed{\frac{d^2 \chi_{nl}(r)}{dr^2} + \left[2(E_{nl} - U_{nl}(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_{nl}(r) = 0}, \quad (7.11)$$

nimmt. Die Quantenzahlen nehmen die Werte an

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots, \\ l &= 0, 1, \dots, n-1, \\ m &= -l, -l+1, \dots, l. \end{aligned}$$

Die radiale Quantenzahl $n_r = n - l - 1$ gibt die Nullstellen der Radialfunktion an. Die Energieeigenwerte sind wegen der sphärischen Symmetrie bezüglich m entartet. Da das Potential kein Coulomb-Potential ist, gibt es keine Entartung in l aber sehr wohl eine in σ . Somit sind die E_{nl} insgesamt $2(2l+1)$ -fach entartet. Weiters bemerken wir, dass eine **Austauschentartung** vorhanden ist.

Trotz all dieser Näherungen kann man die Differentialgleichung für χ_{nl} bzw. R_{nl} aus Gleichung (7.11) nicht exakt lösen. Hartree folgend geht man iterativ vor:

1. Man macht einen ersten Ansatz für die Wellenfunktion. Hierzu kann man z.B. die **Thomas-Fermi Gleichung** verwenden.⁵ Daraus erhält man die Potentiale $U_{nl}(r_i)$.
2. Die Potentiale $U_{nl}(r_i)$ verwendet man in Gleichung (7.11) und berechnet damit die Radialfunktionen χ_{nl} bzw. R_{nl} .
3. Mit diesen χ_{nl} bzw. R_{nl} berechnet man ein neues Potential $U_{nl}(r_i)$ mittels Gleichung (7.6).

Die letzten beiden Schritte wiederholt man so oft, bis man zu hoher Genauigkeit ein **selbst-konsistentes Potential** erhält.

Wie wir noch sehen werden, kann man die Hartree-Methode aus einem Variationsprinzip herleiten. Es ist wichtig zu bemerken, dass diese Methode die Austauschwechselwirkung sowie die L -Abhängigkeit der Energie des Atoms bei gegebener Elektronenkonfiguration vernachlässigt. Zur Verbesserung der Resultate kann man beides als Störung berücksichtigen. Eine viel aufwendigere Methode, die diese Schwachstellen nicht aufweist wollen wir im Folgenden betrachten.

⁴Man beachte, dass das Potential $U_i(r_i)$ für jedes Elektron ein anderes ist.

⁵Die Thomas-Fermi Gleichung werden wir im Folgenden nur kurz besprechen.

7.2 Die Hartree-Fock Methode bzw. Methode des selbstkonsistenten Feldes

Die Hartree-Methode verwendete einfache Produkte von Einteilchenwellenfunktionen (siehe Gleichung (7.8)). Das Pauli-Prinzip ist somit nicht berücksichtigt. Verbesserungen wurden von *Vladimir A. Fock & John C. Slater* eingeführt.

Bei der **Hartree-Fock Methode** bzw. **Methode des selbstkonsistenten Feldes** wird die Wellenfunktion des Atoms als Linearkombination aus den Produkten der Wellenfunktionen der einzelnen Elektronen zusammengesetzt. Bei dieser Linearkombination müssen folgende zwei Umstände betrachtet werden: Erstens muss ihre Symmetrie bei Vertauschungen dem Gesamtspin S des betrachteten Atomzustandes und Zweitens dem gegebenem Wert für den resultierenden Bahndrehimpuls L des Atoms entsprechen. Die Wellenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sind bei dieser Methode im Allgemeinen nicht orthogonal, da sie Lösungen unterschiedlicher Gleichungen sind.⁶

Üblicherweise (aber nicht immer) setzt man die Wellenfunktion des Atoms als Linearkombinationen von Slater-Determinanten an.⁷ Eine Slater-Determinante (siehe Gleichung (5.8))

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \cdots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix},$$

besteht aus den orthonormalen Einteilchen-Produktzuständen

$$\psi_{p_i}(\xi_j) = \chi_{p_i}(\sigma_j) \varphi_{p_i}(\mathbf{r}_j),$$

mit der Bahnfunktion $\varphi_{p_i}(\mathbf{r}_j)$ und Spinfunktion $\chi_{p_i}(\sigma_j)$. Die Slater-Determinante hat Parität

$$(-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \cdots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum_{i=1}^N l_i},$$

wobei l_i die Bahndrehimpulsquantenzahl von ψ_{p_i} ist. Offensichtlich gilt $[\hat{H}_0, \hat{\mathbf{L}}] = [\hat{H}_0, \hat{\mathbf{S}}] = 0$ mit $\hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{l}}_i$ und $\hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{s}}_i$ dem Gesamtbahndrehimpuls- bzw. Gesamtspinoperator.⁸ Somit existieren simultane Eigenfunktionen zu $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z$ mit den Eigenwerten $L(L+1)$, M_L , $S(S+1)$ bzw. M_S in atomaren Einheiten. Die Slater-Determinante ist im Allgemeinen kein Eigenzustand von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{\mathbf{S}}^2$. Man kann jedoch Linearkombinationen von Slater-Determinanten bilden, welche Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\mathbf{S}}^2$ und \hat{S}_z sind.⁹

⁶Der i -te Zustand hat Potential U_i in der Differentialgleichungen für R_{nl} aus Gleichung (7.11).

⁷Bei der Hartree-Fock Methode bzw. Methode des selbstkonsistenten Feldes handelt es sich an und für sich um dieselbe Methode. In der Literatur finden sich hierzu leicht variierende Definitionen. Wir wollen zur Unterscheidung von der Hartree-Fock Methode sprechen, falls Slater-Determinanten mit orthonormierten Einteilchenwellenfunktionen verwendet werden. Im allgemeineren Fall sprechen wir hingegen von der Methode des selbstkonsistenten Feldes.

⁸Wir erinnern daran, dass in \hat{H}_0 die sphärisch symmetrischen Potentiale aus Gleichung (7.6) vorkommen. Somit ist in der nicht-relativistischen Näherung der Gesamtbahndrehimpuls \mathbf{L} erhalten. Aus der Erhaltung des Gesamtdrehimpulses \mathbf{J} folgt somit auch die Erhaltung des Gesamtspins \mathbf{S} .

⁹Das ist analog zu den Spinzuständen in Kapitel 5.2. Alle vier einfachen Produktspinfunktionen $\chi_A, \chi_B, \chi_C, \chi_D$ aus Fußnote 2 sind Eigenfunktionen von \hat{S}_z nicht jedoch von $\hat{\mathbf{S}}^2$. Jede der vier Linearkombinationen $\chi_{0,0}, \chi_{1,1}, \chi_{1,0}, \chi_{1,-1}$ hingegen ist Eigenfunktion von \hat{S}_z als auch $\hat{\mathbf{S}}^2$.

Vergleicht man die mit dieser Methode berechneten Energieniveaus leichter Atome mit den spektroskopischen Werten, so kann man die Genauigkeit auf etwa 1% abschätzen. Für komplizierte Atome kann jedoch der Fehler so groß werden wie die Abstände benachbarter Niveaus und zu einer falschen Niveaureihenfolge führen.

Wir wollen nun die Methode des selbstkonsistenten Feldes am einfachen Fall des Helium-Atoms illustrieren. Beide Elektronen seien im s -Zustand mit beliebigen Werten für n , d.h. $\varphi_1 = \varphi_{n00}$ und $\varphi_2 = \varphi_{n'00}$. Der Zustand des Atoms ist dann ein S -Zustand. Wir betrachten Ortho-Heliumzustände mit $S = 1$, die entsprechende Wellenfunktion haben wir bereits in Gleichung (5.19) gefunden ($i = 1, 0, -1$)

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) \chi_{1,i} . \quad (7.12)$$

Da wir nur s -Zustände haben, hängen φ_1 und φ_2 nur von den Radien r_1 und r_2 ab. Wir können φ_1 und φ_2 als orthogonal zueinander annehmen.^a

Wir verwenden ein Variationsprinzip und $\psi(\xi_1, \xi_2)$ als Vergleichsfunktion. Damit finden wir das $\psi(\xi_1, \xi_2)$ welches die wahre Wellenfunktion des Atoms am besten annähert. Wie in Appendix C.5 gezeigt, kann man die Schrödinger-Gleichung aus dem Variationsprinzip

$$\int \psi^* \hat{H} \psi \, dV_1 \, dV_2 = \text{Min} , \quad (7.13)$$

mit der Nebenbedingung

$$\int |\psi|^2 \, dV_1 \, dV_2 = 1 , \quad (7.14)$$

ableiten. Die Variation bzgl. ψ^* liefert^b

$$\int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi \, dV_1 \, dV_2 = 0 . \quad (7.15)$$

Nach der Methode des selbstkonsistenten Feldes setzen wir $\psi(\xi_1, \xi_2)$ aus Gleichung (7.12) für ψ in Gleichung (7.15) ein und variieren φ_1 und φ_2 einzeln. Somit erhält man ein Extremum des Integrals bezüglich Funktionen der Gestalt $\psi(\xi_1, \xi_2)$. Damit erhält man natürlich nicht den exakten Energien eigenwert und nicht die exakte Wellenfunktion, aber die bestmögliche Funktion, die in dieser Form dargestellt werden kann.

Der Hamilton-Operator für das Heliumatom ist in atomaren Einheiten gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Delta_{r_1} - \frac{1}{2} \Delta_{r_2} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} . \quad (7.16)$$

Wir setzen $\psi(\xi_1, \xi_2)$ aus Gleichung (7.12) in Gleichung (7.15) ein^c

$$\int \delta (\varphi_1^*(r_1) \varphi_2^*(r_2) - \varphi_1^*(r_2) \varphi_2^*(r_1)) (\hat{H} - E) (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) \, dV_1 \, dV_2 = 0 . \quad (7.17)$$

Da \hat{H} invariant unter Vertauschung von \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 ist folgt

$$\int \delta(\varphi_1^*(r_1) \varphi_2^*(r_2)) (\hat{H} - E) (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) dV_1 dV_2 = 0, \quad (7.18)$$

und weiters

$$\begin{aligned} & \int \delta\varphi_1^*(r_1) \varphi_2^*(r_2) (\hat{H} - E) (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) dV_1 dV_2 \\ & + \int \delta\varphi_2^*(r_2) \varphi_1^*(r_1) (\hat{H} - E) (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) dV_1 dV_2 = 0. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Die Koeffizienten von $\delta\varphi_1^*(r_1)$ sowie $\delta\varphi_2^*(r_2)$ müssen einzeln verschwinden. Damit erhalten wir (wobei wir verwenden, dass φ_i in unserem Fall reell ist)^d

$$\begin{aligned} & \int \varphi_2(r_2) (\hat{H} - E) (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) dV_2 = 0, \\ & \int \varphi_1(r_1) (\hat{H} - E) (\varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2) \varphi_2(r_1)) dV_1 = 0. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Mit den Definitionen ($a, b = 1, 2$)

$$G_{ab}(r_1) = \int \frac{\varphi_a(r_2) \varphi_b(r_2)}{r_{12}} dV_2,$$

$$H_{ab} = \int \varphi_a \left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{2}{r} \right) \varphi_b dV,$$

(7.21)

erhalten wir unter Verwendung der Orthogonalität von φ_1 und φ_2 sowie der Symmetrien $G_{ab}(r) = G_{ba}(r)$ und $H_{ab} = H_{ba}$ letztendlich

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} \Delta + \frac{2}{r} + E - H_{22} - G_{22}(r) \right) \varphi_1(r) + (H_{12} + G_{12}(r)) \varphi_2(r) = 0, \\ & \left(\frac{1}{2} \Delta + \frac{2}{r} + E - H_{11} - G_{11}(r) \right) \varphi_2(r) + (H_{12} + G_{12}(r)) \varphi_1(r) = 0. \end{aligned}$$

(7.22)

Das sind die endgültigen Gleichungen der Methode des selbstkonsistenten Feldes. Sie können selbstverständlich nur numerisch gelöst werden.

Analog leitet man die Gleichungen in komplizierteren Fällen her. Wie bereits erwähnt, wird die in das Integral des Variationsprinzips eingesetzte Wellenfunktion des Atoms als Linearkombination aus den Produkten der Wellenfunktionen der einzelnen Elektronen zusammengesetzt. Es müssen bei dieser Linearkombination folgende zwei Umstände betrachtet werden: Erstens muss ihre Symmetrie bei Vertauschungen dem Gesamtspin S des betrachteten Atomzustandes und Zweitens dem gegebenem Wert für den resultierenden Bahndrehimpuls L des Atoms entsprechen. Das so bestimmte Feld ist kugelsymmetrisch.

Verwenden wir bei der Methode des selbstkonsistenten Feldes hingegen einfache Produktzustände $\psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi_1(r_1) \varphi_2(r_2)$ finden wir stattdessen für die endgültigen Gleichungen

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2} \Delta + \frac{2}{r} + E - H_{22} - G_{22}(r) \right) \varphi_1(r) &= 0, \\ \left(\frac{1}{2} \Delta + \frac{2}{r} + E - H_{11} - G_{11}(r) \right) \varphi_2(r) &= 0. \end{aligned} \quad (7.23)$$

Mit

$$\begin{aligned} E_1 &= E - H_{22}, \\ U_1(r_1) &= -\frac{2}{r_1} + G_{22}(r_1) \\ &= -\frac{2}{r_1} + \int \frac{|\varphi_2(r_2)|^2}{r_{12}} dV_2, \end{aligned} \quad (7.24)$$

(und analog für E_2 und $U_2(r_2)$) sind das die Gleichungen (7.6) und (7.9) der Hartree-Methode, die wir somit aus einem Variationsprinzip hergeleitet haben.^e Bei der Energie des gesamten Atoms E muss man beachten, dass in die Summe $E_1 + E_2$ die elektrostatische Wechselwirkung der beiden Elektronen miteinander doppelt gezählt wird, weil sie in $U_1(r_1)$ als auch in $U_2(r_2)$ eingeht. Deshalb erhält man E aus $E_1 + E_2$ nach Abzug des Mittelwertes dieser Wechselwirkung, d.h.

$$E = E_1 + E_2 - \int \int \frac{1}{r_{12}} \varphi_1^2(r_1) \varphi_2^2(r_2) dV_1 dV_2. \quad (7.25)$$

^aDie Wellenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sind bei der Methode des selbstkonsistenten Feldes im Allgemeinen nicht orthogonal, da sie Lösungen unterschiedlicher Gleichungen sind. Man kann in unserem Fall jedoch φ_2 durch $\varphi'_2 = \varphi_2 + C \varphi_1$ mit einer Konstanten C ersetzen. Das ändert $\varphi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ nicht, wie man leicht nachprüft. Durch geeignete Wahl der Konstanten erreicht man, dass φ_1 und φ'_2 orthogonal zueinander sind. Wir lassen den Strich im Folgenden weg und nehmen daher φ_1 und φ_2 als orthogonal an.

^bDie Variation von ψ liefert nichts Neues gegenüber der Variation bzgl. ψ^* .

^cDa der Hamilton-Operator nicht vom Spin abhängt ergeben die Spinwellenfunktionen nur den Faktor 1.

^dWir hätten die Variation von Anfang an mit reellen φ_i durchführen können. Das liefert dasselbe Ergebnis auf einem längeren Weg.

^eWir bemerken, dass sich im Allgemeinen die Hartree-Gleichungen aus der Methode des selbstkonsistenten Feldes ableiten lassen, nicht jedoch aus der Hartree-Fock Methode, da bei letzterer die Eigenfunktionen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ orthonormal sind im Gegensatz zu den Eigenfunktionen bei der Hartree-Methode.

7.3 Die Thomas-Fermi-Gleichung

Die numerische Berechnung der Ladungsverteilung und des Feldes in einem Atom sind nach der Methode des selbstkonsistenten Feldes außerordentlich umfangreich, besonders für komplizierte Atome. Aber gerade für komplizierte Atome, gibt es die Methode von *Llewellyn H. Thomas* & *Enrico Fermi* (1927), deren Wert in ihrer Einfachheit besteht. Sie baut auf der Tatsache auf, dass die Mehrzahl der Elektronen in komplizierten Atomen mit vielen Elektronen relativ große Hauptquantenzahlen hat. Unter diesen Bedingungen ist die quasiklassische Näherung anwendbar und man kann statistische Überlegungen verwenden. Die Theorie ist für Atome

bzw. Ionen im Grundzustand. Die Elektronen werden wie ein Fermigas im Grundzustand behandelt, welche durch ein Zentralpotential $U(r)$ in einer Raumregion eingeschlossen werden. $U(r)$ verschwindet im Unendlichen und variiert langsam über Distanzen, welche groß sind im Vergleich zu den de Broglie Wellenlängen der Elektronen. Somit sind viele Elektronen in einem Bereich wo $U(r)$ annähernd konstant ist. Das rechtfertigt den statistischen Ansatz. Die Methode gestattet die Berechnung von $U(r)$ und der Elektronendichte $\rho(r)$. Ein wichtiges Ergebnis des Modells ist, dass die mittleren Atomradien von der Kernladung Z nach $\bar{R} \sim Z^{-1/3}$ abhängen.

7.4 Die Elektronenzustände in einem Atom

In einem Atom wird jeder Zustand eines Elektrons durch seinen Bahndrehimpuls l charakterisiert. Die Zustände eines einzelnen Elektrons für festes l werden (in der Reihenfolge zunehmender Energie) mit der Hauptquantenzahl n nummeriert ($n = l + 1, l + 2, \dots$). Diese Reihenfolge für die Nummerierung ist so festgelegt worden, wie sie für das Wasserstoffatom üblich ist. Die Reihenfolge in der Anordnung der Energieniveaus mit verschiedenem l ist aber in komplizierten Atomen im Allgemeinen anders als beim Wasserstoff. Beim Wasserstoff hängt die Energie von l nicht ab, sodass Zustände mit größerem n immer die größere Energie haben. Bei komplizierten Atomen liegt zum Beispiel das Niveau $n = 5, l = 0$ tiefer als $n = 4, l = 2$.¹⁰

Um den Zustand eines Atoms vollständig zu beschreiben, muss man die Werte von L , S und J angeben und darüber hinaus die Zustände aller Elektronen aufzählen. Die Zustände mit verschiedenen Werten von L , dem resultierenden Bahndrehimpuls, werden mit großen lateinischen Buchstaben wie folgt bezeichnet:

$L = 0$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	\dots
S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N	\dots

Die spektroskopische Notation ist konventionellerweise folgendermaßen

$$^{2S+1}L_J,$$

mit der Multiplizität $2S + 1$ (man muss beachten, dass diese Zahl nur für $L \geq S$ die Anzahl der Feinstrukturkomponenten eines Niveaus ist).¹¹

Die Verteilung der Elektronen in einem Atom über die Zustände mit verschiedenem l und n nennt man **Elektronenkonfiguration**. Mit gleichen Werten n und l gibt es insgesamt $2(2l + 1)$ verschiedene Zustände (entsprechend allen möglichen Werten von m und σ). Diese Zustände heißen **äquivalent**. In jedem solchen Zustand kann nach dem Pauli-Prinzip nur je ein Elektron sein. D.h. in einem Atom können nicht mehr als $2(2l + 1)$ Elektronen gleichzeitig

¹⁰Bei höheren Werten von n halten sich Elektronen im Mittel in größeren Entfernungen vom Kern auf, also dort wo der Kern vollständiger abgeschirmt ist, was zu höheren Energien führt. Bei festem n wachsen die Energien mit l , da die Bahnen zunehmend kreisförmiger werden, sich also die Elektronen in Bereichen mit größerer Kernabschirmung aufhalten (wir erinnern daran, dass die klassische Bewegung mit $l = 0$ dem freien Fall entspricht).

¹¹Man spricht von Singulett-, Dublett-, bzw. Triplettniveaus für $2S + 1 = 1, 2, 3, \dots$

dieselben Werte n und l haben. Elektronen mit gleichem n und l befinden sich in derselben **Unterschale**. Ist diese mit $2(2l+1)$ Elektronen voll besetzt, ist diese „geschlossen“. Elektronen mit gleichem n sind in der gleichen **Schale**. Ist diese vollbesetzt mit $\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$, nennt man diese „geschlossen“ (siehe Abbildung 7.1).

<i>Quantum numbers n, l</i>	<i>Spectroscopic notation for subshell (nl)</i>	<i>Maximum number of electrons allowed in the subshell = $2(2l+1)$</i>
[6,2	[6d	10
5,3	5f	14
7,0	7s	2
6,1	6p	6
[5,2	[5d	10
4,3	4f	14
6,0	6s	2
5,1	5p	6
[4,2	[4d	10
5,0	5s	2
4,1	4p	6
[3,2	[3d	10
4,0	4s	2
3,1	3p	6
3,0	3s	2
2,1	2p	6
2,0	2s	2
1,0	1s	2

Abbildung 7.1: Die Anordnung der einzelnen Energieniveaus E_{nl} . Die Energie steigt von unten nach oben, die Klammern umschließen Niveaus welche beinahe dieselbe Energie haben, sodaß ihre Reihung von einem Atom zum nächsten variieren kann. Weiters ist die spektroskopische Notation für die Unterschale (nl) und die Maximalanzahl der in der Unterschale erlaubten $2(2l+1)$ Elektronen angegeben (Quelle [BJP03]).

Beispielsweise bedeutet $1s2p^3P_0$ den Zustand eines Heliumatoms mit $L = 1, S = 1$ und $J = 0$, die beiden Elektronen sind in den Zuständen $1s$ und $2p$.

Der Unterschied in der Energie der Atomniveaus mit verschiedenem L und S bei gleicher Elektronenkonfiguration (die Feinstruktur vernachlässigt) hängt mit der elektrostatischen Wechselwirkung der Elektronen zusammen. Normalerweise sind die Differenzen zwischen diesen Energien relativ klein - einige Male kleiner als die Abstände zwischen den Niveaus mit verschiedenen Konfigurationen. Über die relative Lage der Niveaus mit **gleicher Konfiguration aber verschiedenem L und S** , macht die folgende, empirisch aufgestellte **Hundsche Regel** (Friedrich Hund, 1927) eine Aussage:

Der Term mit dem für die gegebene Elektronenkonfiguration größtmöglichen Wert von S und dem größten (bei diesem S möglichen) Wert von L hat die kleinste Energie.¹²

¹²Bei einem System aus zwei Elektronen beispielsweise gehört zum Spin $S = 1$ die antisymmetrische Bahnfunktion, welche für $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ verschwindet womit die Wahrscheinlichkeit klein ist, dass sich die beiden Elektronen nahe beieinander befinden. Deshalb erfahren sie eine relativ geringe elektrostatische Abstoßung und sie haben eine kleinere Energie im Gegensatz zum $S = 0$ Zustand. Analog entspricht die „am stärksten antisymmetrische“ Bahnfunktion für ein System aus mehreren Elektronen dem größten Spin.

Teil II: Kernphysik

8

Grundlegende Kerneigenschaften

Der Durchmesser eines Atomes liegt bei $\sim 10^{-10}$ m, der eines Atomkerns bei $\sim 10^{-15} - 10^{-14}$ m. Die Existenz des Kerns ist von *Ernest Rutherford* aufgrund der von *Hans Geiger* und *Ernest Marsden* durchgeführten Streuexperimente mit α -Teilchen um 1911 erschlossen worden. Das hat auch zur Entdeckung der „3. Kraft“, der **starken Wechselwirkung** geführt. Im Gegensatz zu den damals bekannten Kräften, der Gravitation und des Elektromagnetismus, ist die starke Wechselwirkung kurzreichweitig und hält den Atomkern gegenüber der elektrostatischen Abstoßung zusammen. Mit der (In-)Stabilität der Atomkerne verbunden ist die Radioaktivität, die letztlich zur Entdeckung der „4. Kraft“, der **schwachen Wechselwirkung** geführt hat.

8.1 Kernbausteine

Als Einheit für die Angabe von Kernmassen ist durch internationale Konvention festgelegt die Masse m_u , die gleich ist dem zwölften Teil der Masse des neutralen Kohlenstoffatoms der Nukleonenzahl 12, also $m_u = (1/12) m_a(^{12}\text{C})$. Als Einheitenzeichen für diese atomare Masseneinheit wird der Buchstabe u benutzt. Es ist

$$m_u = 1 \text{ u} = 1.66056 \times 10^{-24} \text{ g} = 931.5 \text{ MeV}/c^2.$$

Häufig ist die Benutzung einer Millimasseneinheit $1 \text{ mu} = 0.9315 \text{ MeV}/c^2$ bequem. Als **relative Atommasse** A_r für ein beliebiges neutrales Atom der Masse m_a gibt man $A_r = m_a/m_u$ an (oft ungenau „Atomgewicht“ genannt).

Ursprünglich vermutete man, dass der Atomkern aus Protonen und Elektronen bestünde. Dies führte zu Widersprüchen. Es war beispielsweise aus der Beobachtung von Bandenspektren bekannt, dass der Stickstoffkern der Ladungszahl $Z = 7$ und der Massenzahl $A = 14$ einen ganzzahligen Spin hat. Da sowohl Proton als auch Elektron den Spin $1/2$ haben, lässt sich aus 14 Protonen und 7 Elektronen, also insgesamt 21 Teilchen, kein Kern mit ganzzahligem Spin aufbauen. Ein anderes Argument wird durch die Unschärferelation $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ geliefert. Mit $\Delta x \approx 10 \text{ fm}$ und der wichtigen Relation $200 \text{ MeV fm} \approx \hbar c$ findet man sofort

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{2\Delta x} \approx \frac{\hbar}{20 \text{ fm}} \approx \frac{10 \text{ MeV}}{c}.$$

Da $E^2 = (cp)^2 + (m_e c^2)^2$ folgt $\Delta E \approx c\Delta p \approx 10 \text{ MeV}$ da $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$. Das ist mit den beim β -Zerfall beobachteten Elektronenergien schwer zu vereinbaren.

Aus diesen Gründen war die Existenz des Neutrons bereits vor seiner Entdeckung (*James Chadwick, 1932*) gefordert worden.

Ein spezieller Kern ist durch die Angabe der **Protonenzahl** Z und der **Neutronenzahl** N völlig definiert. Die Gesamtzahl (**Massenzahl**) ist $A = N + Z$. Das übliche Symbol für einen Kern X ist ${}_Z^A X_N$, vereinfacht oft nur ${}_Z^A X$ oder ${}^A X$.

Eine Art von Atomen, die alle den gleichen Kern haben, führt auch den Namen **Nuklid**.

- **Isotope** sind Nuklide mit gleichem Z und verschiedenem A .
- **Isobare** sind Nuklide mit gleichem A und verschiedenem Z .
- **Isotone** sind Nuklide mit gleichem N und verschiedenem A .

Anbei zusammengefasst Teilcheneigenschaften von Proton, Neutron und Elektron:¹

Teilchen	Masse in u		Spin	g-Faktor	Mittlere Lebensdauer
		in MeV/ c^2			
Proton	1.007276467	938.2721	1/2	5.58569469	$> 2.1 \times 10^{29}$ a
Neutron	1.00866492	939.5654	1/2	-3.82609	(879.4 ± 0.6) s
Elektron	$548.5799091 \times 10^{-6}$	0.51099895	1/2	2.0023193044	$> 6.6 \times 10^{28}$ a

Zusammenfassend wissen wir, der Atomkern besteht aus Protonen und Neutronen.

8.2 Kernradien

Unter normalen Verhältnissen befinden sich die Atomkerne auf der Erde im Grundzustand. Uns interessieren also die Eigenschaften von stabilen Kernen. Um die Kerngrößen zu ermitteln verwendet man Streuversuche, wie historisch das Rutherford-Geiger-Marsden Experiment. Somit kann man die Größe des Kerns, wie auch dessen Ladungsverteilung ermitteln. Die Wellenlänge des streuenden Teilchens muss dabei viel kleiner als die Kerngröße sein für eine entsprechende Auflösung ($\lambda/2\pi \ll 1$ fm).

Als streuende Teilchen verwendet man beispielsweise Neutronen, Protonen, α -Teilchen und Elektronen. Letztere spüren nur die elektromagnetische Kraft aber nicht die starke Wechselwirkung bzw. Kernkraft. Elektronen von so kleiner Wellenlänge sind bereits relativistisch, somit erhalten wir für die Energie $E \approx c\hbar k = \hbar c 2\pi/\lambda \gg \hbar c/1$ fm und mit $\hbar c \approx 200$ MeV fm folgt $E \gg 200$ MeV. Natürlich erhält man mit Elektronen nur Informationen über die Ladungsverteilung bzw. Protonenverteilung im Kern. Für die Analyse bei relativistischen Energien verwendet man nicht mehr die nicht-relativistische Rutherford-Formel, sondern die relativistische Version von Mott. Die Streuversuche zeigen, dass der Kernradius R mit der Nukleonenzahl A in guter Näherung durch die Beziehung

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad (8.1)$$

¹Für mehr Details siehe [Tan19].

verknüpft ist, wobei $r_0 = (1.3 \pm 0.1) \times 10^{-15}$ m. Da sich alle Kerndimensionen in dieser Größenordnung bewegen, ist es üblich als spezielle Längeneinheit²

$$10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ Femtometer} = 1 \text{ fm („1 Fermi“)}$$

zu benutzen. Daraus folgt unmittelbar, dass Kernmaterie eine konstante Dichte hat, von $\rho \approx 3 \times 10^{17}$ kg/m³ (gewöhnliche Materie hat $\rho \approx 10^3$ kg/m³). Dies folgt bereits aus den Rutherford-Experimenten.

Infolge der Unschärferelation gibt es keinen scharf definierten Kernrand. Man verwendet die Dichteverteilung der Kernmaterie, die durch das Quadrat der Kernwellenfunktion $|\psi(r)|^2$ gegeben ist. Der radiale Verlauf der Wellenfunktion hängt vom Potential ab, in dem die Teilchen gebunden sind. Experimente zeigen, dass im Vergleich zum Atom der Kern einen verhältnismäßig gut definierten Rand hat, was zeigt, dass das Kernpotential eine genau definierte endliche Reichweite hat. Die Angabe eines Kernradius erfordert eben eine Definition, was bei gegebener Dichteverteilung des Kerns darunter zu verstehen ist. Dichteverteilungen lassen sich nur schwer direkt messen. Stattdessen kann aber die elektrische Ladungsverteilung eines Kerns präzise vermessen werden. Die Ladungsverteilung entspricht der Dichteverteilung der Protonen und stimmt mit der Dichteverteilung des Kerns dann überein, wenn Protonen und Neutronen die gleiche räumliche Verteilung haben. Das ist für stabile Kerne in sehr guter Näherung der Fall.

Aus der Streutheorie ergibt sich für die Winkelverteilung der Elektronen bei Streuung an einem ausgedehnten geladenen Objekt

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Punkt}} F^2(q^2), \quad (8.2)$$

wobei $F(q^2)$ eine Funktion ist, die sich aus der Ladungsdichteverteilung $\rho(r)$ berechnen lässt nach

$$F(q^2) = \frac{1}{Ze} \int \rho(r) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3r, \quad (8.3)$$

wobei \mathbf{q} der Impulsübertrag beim Streuprozess ist. $F(q^2)$ wird **Formfaktor** genannt und experimentell bestimmt.

Durch inverse Fourier-Transformation erhält man im Prinzip $\rho(r)$. In der Praxis kann man aber nur beschränkte \mathbf{q} messen. Stattdessen wählt man eine Modellverteilung für $\rho(r)$, deren Parameter man so variiert, dass der daraus berechnete Formfaktor mit dem gemessenen übereinstimmt. Häufig verwendet man hierfür die Fermi-Verteilung bzw. Woods-Saxon-Verteilung (siehe Abbildung 8.1)

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-R_{1/2})/a}}. \quad (8.4)$$

Für $r = R_{1/2}$ sinkt die Ladungsverteilung auf die Hälfte ab. a gibt die Dicke der Randzone

²Die Bezeichnung Femtometer entspricht der internationalen Norm, wobei die Kernphysiker nach altem Brauch lieber „Fermi“ sagen. Hierfür müßte man als Einheitenzeichen 1 Fm wählen. Glücklicherweise ist gerade 1 Fm = 1 fm.

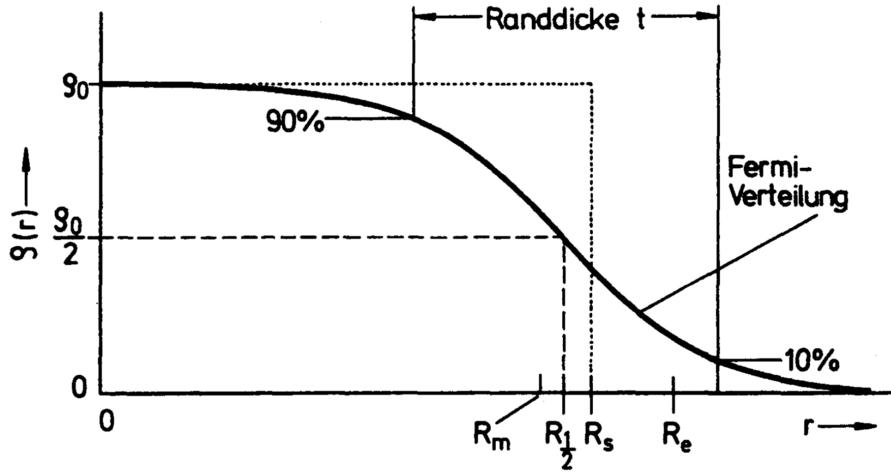


Abbildung 8.1: Fermi-Verteilung und Vergleich verschiedener definerter Ladungsradien (Quelle [MK13b]).

an. Innerhalb der Randdicke $t = 4.4 a$ sinkt die Ladungsdichte von 90% auf 10%.

Pionierarbeit Ladungsverteilungen durch Elektronenstreuung zu ermitteln wurde von *Robert Hofstadter* am Linearbeschleuniger in Stanford geleistet.

Die Fermiverteilung gibt für $A > 20$ die Dichteverteilung gut wieder. In Abbildung 8.2 ist eine Übersicht über die Ladungsverteilungen einiger Kerne gegeben. In der Literatur gibt es verschiedene Definitionen des Kernradius anhand der gemessenen Ladungsdichte-Verteilung. Eine wäre die Größe $R_{1/2}$. Wichtig ist auch der quadratisch gemittelte Radius

$$R_m^2 = \langle r^2 \rangle = \frac{1}{Ze} \int_0^\infty r^2 \rho(r) 4\pi r^2 dr . \quad (8.5)$$

Eine Entwicklung von $F^2(q^2)$ nach Potenzen von q zeigt, dass für kleine Impulsüberträge ($qR \ll 1$) nur diese Größe aus der gemessenen Winkelverteilung abgeleitet werden kann. Eine Taylorreihenentwicklung des Exponenten ergibt für den Formfaktor (ϑ ist der Winkel zwischen \mathbf{q} und \mathbf{r})³

$$\begin{aligned} F(q^2) &= \frac{1}{Ze} \int \rho(r) \left\{ 1 + \frac{iqr}{\hbar} \cos \vartheta - \frac{q^2 r^2}{2\hbar^2} \cos^2 \vartheta + \mathcal{O}(q^4) \right\} d^3 r \\ &= 1 - \frac{q^2}{6\hbar^2} \langle r^2 \rangle + \mathcal{O}(q^4) , \end{aligned}$$

somit

$$R_m^2 = \langle r^2 \rangle = -6\hbar^2 \left. \frac{dF(q^2)}{dq^2} \right|_{q^2=0} . \quad (8.6)$$

³Wir bemerken hierzu, dass die Mittelung über den Raumwinkel $\frac{1}{4\pi} \int d\Omega \cos \vartheta = 0$ und weiters $\frac{1}{4\pi} \int d\Omega \cos^2 \vartheta = \frac{1}{3}$ ergibt. Man sieht daraus, dass sofern ρ sphärisch symmetrisch ist, $F(q^2)$ tatsächlich eine Funktion von q^2 ist, da alle ungeraden Terme in q bei der Mittelung über den Raumwinkel verschwinden.

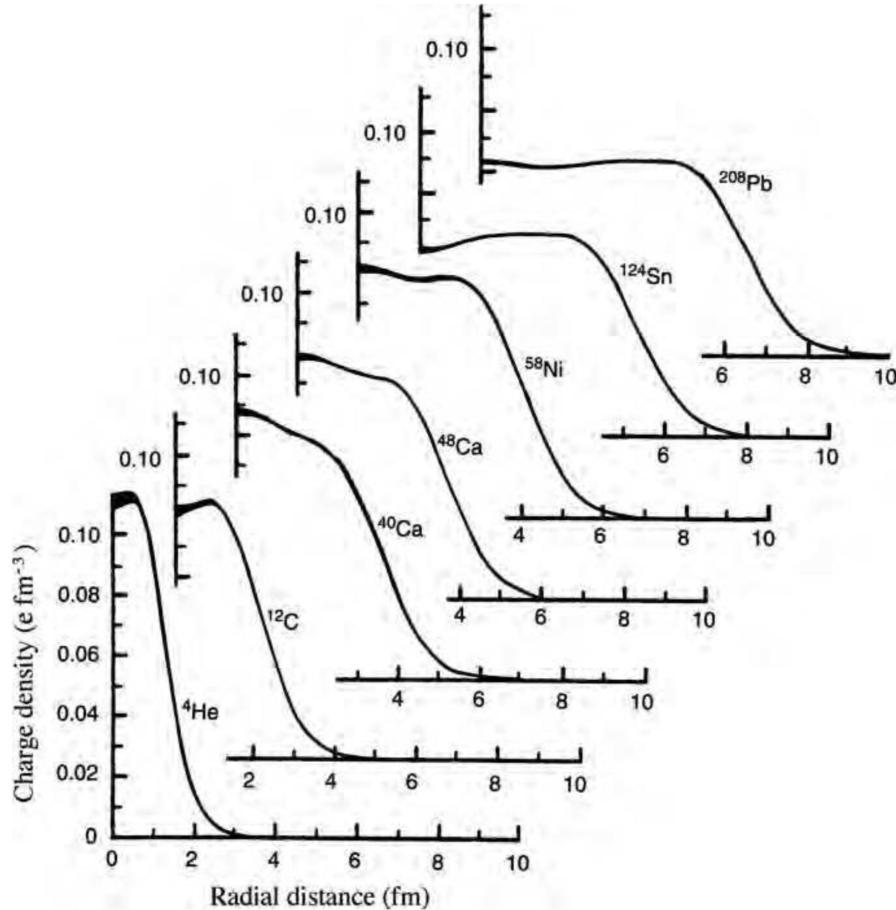


Abbildung 8.2: Die radiale Ladungsverteilung $\rho(r)$ verschiedener Kerne in Einheiten von $e \text{ fm}^{-3}$. Die Dicke der Kurven nahe $r = 0$ ist ein Maß für die Ungenauigkeit von $\rho(r)$ (Quelle [MS19]).

Für eine homogen geladene Kugel mit Radius R_e ergibt sich, wie man leicht nachrechnet, $R_m^2 = \langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R_e^2$. Daraus erhält man umgekehrt $R_e = 1.29 R_m$. Anstelle von R_m wird oft dieser äquivalente Radius einer homogen geladenen Kugel R_e angegeben. Weiters kann man den Radius R_s einer homogen geladenen Vergleichskugel einführen, die überall die Ladungsdichte ρ_0 hat. Die verschiedenen Definitionen der Kernradien sind in der Abbildung 8.1 wiedergegeben.

Die Ergebnisse der Ladungsdichte-Messungen für Kerne mit $A > 20$ lassen sich nun wie folgt zusammenfassen

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 0.17 \frac{Ze}{A} \text{ fm}^{-3}, \\ t &= 2.4 \text{ fm}, \\ R_s &= 1.128 A^{1/3} \text{ fm}. \end{aligned} \tag{8.7}$$

Die erste Zeile bedeutet, dass jedes Nukleon im Inneren schwerer Kerne ein Volumen von 6 fm^3 einnimmt. Das entspricht einer Dichte von $2.7 \times 10^{17} \text{ kg/m}^3$. Zeile 2 sagt aus, dass alle schweren Kerne die gleiche Randdicke haben. Der Äquivalentradius der dritten Zeile ist der

einige Radius, der aufgrund seiner Definition proportional zu $A^{1/3}$ ist. Für die physikalisch realistischen Radien $R_{1/2}$ und R_e gilt näherungsweise

$$\begin{aligned} R_{1/2} &= R_s - 0.89 A^{-1/3} \text{ fm}, \\ R_e &= R_s + 2.24 A^{-1/3} \text{ fm}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Diese Radien sind also nicht proportional zu $A^{1/3}$! Die $A^{1/3}$ -Regel ist nur eine näherungsweise Beschreibung des allgemeinen Verhaltens der Radien.

8.3 Kernmasse und Bindungsenergie

Ganz allgemein gilt, wegen Einsteins Relation $E = Mc^2$, dass die Gesamtenergie sowie -masse zweier sich anziehender Körper verringert wenn sie sich nähern. Der Überschuss an Energie wird in Form von Strahlung emittiert.

Beim Zerfall eines Kerns, definiert man die **Bindungsenergie**, mit welcher die Tochterkerne gebunden waren, als Summe der resultierenden Massen ($\sum M_f$) minus der ursprünglichen Kernmasse M_i , multipliziert mit c^2 , i.e.⁴

$$B = \left(\sum M_f - M_i \right) c^2. \quad (8.9)$$

Die **totale Bindungsenergie** ist definiert als die Arbeit, die man aufbringen muss um einen Kern vollständig in seine Nukleonen zu zerlegen.⁵

Für einen Kern der Masse m ergibt sich somit für die (totale) Bindungsenergie

$$B(Z, N) = (Zm_p + Nm_n - m) c^2. \quad (8.10)$$

In Nuklidkarten wird oftmals anstatt der Kernmassen die Atommassen M bzw. $M(Z, N)$ angegeben. Für die Bindungsenergie des Kerns ergibt sich nun

$$\begin{aligned} B(Z, N) &= (Zm_p + Zm_e + Nm_n - M(Z, N)) c^2 \\ &\simeq (ZM(1, 0) + Nm_n - M(Z, N)) c^2, \end{aligned} \quad (8.11)$$

wobei wir die Ruhemassen der Elektronen m_e berücksichtigt haben, ihre Bindungsenergie jedoch vernachlässigt haben.⁶

Berechnet man Bindungsenergien mittels Atommassen muss man nur beim noch zu besprechenden β^+ -Zerfall nachbessern. Beim β^- -Zerfall: $n \rightarrow p + e^-$ (Antineutrino vernachlässigt) gilt

$$\begin{aligned} B &= (m_p + m_e - m_n) c^2 \\ &\simeq (M(1, 0) - m_n) c^2, \end{aligned} \quad (8.12)$$

⁴In der Praxis ist es oftmals üblich Massen in Energieeinheiten anzugeben und umgekehrt, also den Faktor c^2 wegzulassen.

⁵Oftmals bezeichnet man die totale Bindungsenergie kurz als Bindungsenergie. Das wollen wir ebenso tun und verstehen im Folgenden als Bindungsenergie stets die totale Bindungsenergie, sofern nichts anderes angemerkt ist.

⁶Letztere kann für Atome mit hohem Z relevant werden, wenn man an hoher Präzision interessiert ist. Für die meisten Belange ist sie nicht relevant, weshalb wir sie fortan vernachlässigen werden.

und in einem beliebigen Kern

$$B(Z, N) \simeq (M(Z + 1, N - 1) - M(Z, N)) c^2. \quad (8.13)$$

Hingegen beim β^+ -Zerfall: $p \rightarrow n + e^+$ (Neutrino vernachlässigt)

$$\begin{aligned} B &= (m_n + m_e - m_p) c^2 \\ &\simeq (m_n - M(1, 0) + 2m_e) c^2, \end{aligned} \quad (8.14)$$

und in einem beliebigen Kern

$$B(Z, N) \simeq (M(Z - 1, N + 1) - M(Z, N) + 2m_e) c^2. \quad (8.15)$$

Wichtig ist auch die **mittlere Bindungsenergie pro Nukleon**. Sie ist definiert als $B(Z, N)/A$, oder kurz B/A und in Abbildung 8.3 wiedergegeben. Aus dem Verlauf kann man

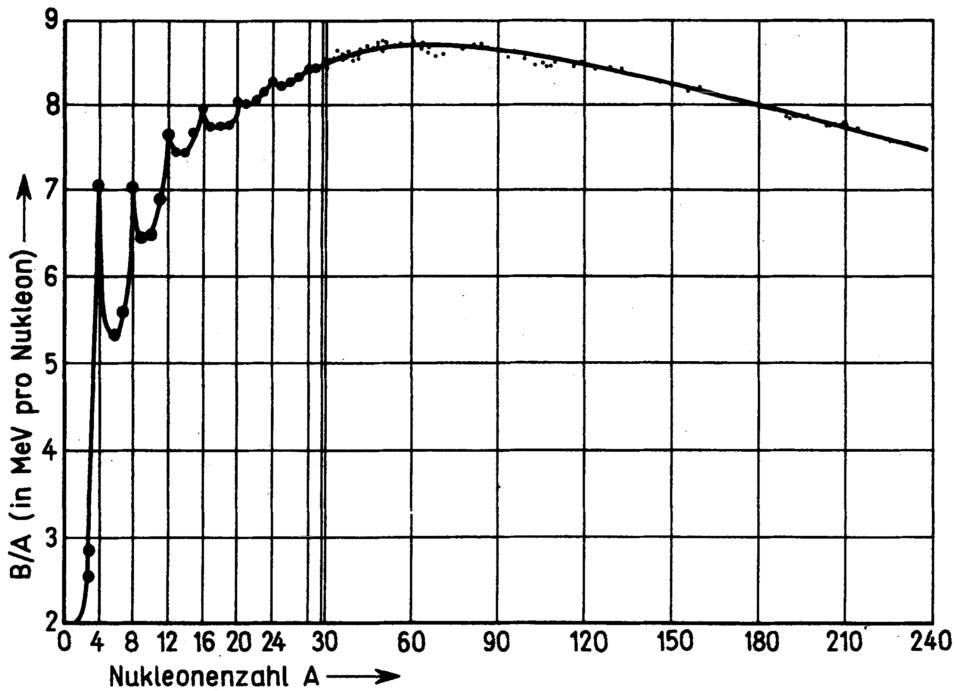


Abbildung 8.3: Die Bindungsenergie pro Nukleon als Funktion von A für stabile Kerne. Die Abszisse ist bis $A = 30$ gespreizt (Quelle [MK13b]).

einige Rückschlüsse ziehen:

- Für nicht zu kleine A ist B/A ungefähr konstant. Würde jedes Nukleon mit jedem in Wechselwirkung treten, dann hätten wir $A(A-1)/2$ Bindungen und die Bindungsenergie sollte ungefähr $B \sim A^2$ sein wie für eine langreichweite Kraft (z.B. Elektromagnetismus, Gravitation). Der Graph zeigt jedoch, dass eher $B \sim A$ ist. Die Bindungsenergie ist ungefähr proportional zur Zahl der Paare, also proportional zur Zahl der gebundenen Teilchen. Die Wechselwirkung hat „Sättigungscharakter“ und wirkt nur zwischen zwei Partnern. Da bereits das α -Teilchen ein $B/A \sim 7$ MeV besitzt folgt, dass die Reichweite der Kernkräfte ungefähr dem Radius des α -Teilchens entspricht, also in der Größe von 1.5 fm liegt. Ab $A = 12$ liegt B/A im Bereich zwischen 7.5 und 8.8 MeV.

- Das größte B/A liegt im Bereich von Nickel und Eisen ($A \sim 60$). Für größere Kerne kann man Energie durch Kernspaltung gewinnen. Wie man sieht liegt die gewonnene Energie bei etwa 1 MeV pro Nukleon. Bei leichteren Kernen gewinnt man Energie durch Kernfusion.
- Für leichte Kerne sieht man erhebliche Schwankungen für B/A . Für Deuteron ist die Bindungsenergie besonders niedrig, hier sind die Kernkräfte noch nicht abgesättigt. Für das α -Teilchen sind sie besonders hoch, was die Ursache für den α -Zerfall ist.
- ^8Be , ^{12}C und ^{16}O sind besonders stark gebunden, was die Grundlage für das Alpha-Clustermodell der Atomkerne ist.
- Man bemerkt, dass Kerne mit gerader Protonen- oder Neutronenzahl ein größeres B/A haben als welche mit ungerader. Das weist auf eine sehr kurzreichweite Komponente in der Nukleon-Nukleonwechselwirkung hin, auf die sogenannte Paarungswchselwirkung zwischen Nukleonen. Dies kann man ähnlich der Cooperpaarbildung bei Supraleitern behandeln.

Eine weitere wichtige Energie ist die **Separationsenergie**. Sie gibt die Energie an, die erforderlich ist um aus einem Kern ein einzelnes Nukleon abzuspalten. Für die Abtrennung eines Neutrons ist sie

$$\begin{aligned} S_n(Z, N) &= (M(Z, N - 1) + m_n - M(Z, N)) c^2 \\ &\simeq B(Z, N) - B(Z, N - 1). \end{aligned} \quad (8.16)$$

Analog kann man Separationsenergien für Proton S_p oder α -Teilchen S_α definieren.

Die Separationsenergie variiert zwischen wenigen MeV und bis etwa 20 MeV und hängt von der Struktur des Kerns ab. Man beobachtet, dass S_n größer ist für Kerne mit einer geraden Neutronenzahl. Entsprechendes gilt für die Protonseparationsenergien. Man kann eine **Paarungsenergie** definieren, welche die Differenz zwischen den Separationsenergien eines Kerns mit gerader Neutronenzahl und dem Nachbarkern ist

$$\delta_n(Z, N) = S_n(Z, N) - S_n(Z, N - 1), \quad (8.17)$$

wobei N geradzahlig sein soll. Man beobachtet experimentell, dass δ_n wie auch δ_p in der Größenordnung von 2 MeV liegen. Sieht man von diesem Paarungseffekt ab, indem man etwa nur Kerne mit gerader Neutronenzahl betrachtet oder eine geeignete mittlere Separationsenergie einführt, so sieht man, dass die Separationsenergien über weite Bereiche eine verhältnismäßig glatte Funktion der Teilchenzahl sind, dass aber bei ganz bestimmten Neutronen- oder Protonenzahlen immer gerade besonders groß sind. Es sind dies die Zahlen

2, 8, 20, 50, 82, 126, 184

(8.18)

wobei letztere beiden Zahlen nur für Neutronen gelten. Diese Zahlen nennt man **magische Zahlen** und Kerne mit magischem Z (oder N) haben die letzte Proton- (oder Neutron-)Schale voll gefüllt, ähnlich wie gefüllte Hünlen von Elektronen in Edelgasen. Dies ist Thema des Schalenmodells von Kernen.

8.4 Spin und Momente von Kernen im Grundzustand

Die Kernbausteine Proton und Neutron haben je Spin 1/2. Sie können ihre Spins und ihre Bahndrehimpulse zu einem Gesamtdrehimpuls I des Kerns koppeln. Man bezeichnet I als **Kernspin**, obwohl zum Gesamtdrehimpuls auch der Bahndrehimpuls der Nukleonen beiträgt. Da Bahndrehimpulse stets ganzzahlig sind, erwarten wir aufgrund der quantenmechanischen Gesetze für die Addition von Drehimpulsen, dass Kerne mit geradem A ganzzahligen und Kerne mit ungeradem A halbzahlichen Kernspin haben.

Experimentell kann man den Kernspin unter anderem über die Hyperfeinaufspaltung ermitteln (siehe Kapitel 3). Die Experimente bestätigen nicht nur obige Voraussagen, sie zeigen überdies, dass Kerne mit geradem Z und geradem N im Grundzustand stets verschwindenden Kernspin haben. Man nennt Kerne, je nachdem ob Z und N gerade (g) oder ungerade (u) ist, auch gg-, gu-, ug- oder uu-Kerne. Damit können wir die experimentellen Ergebnisse zusammenfassen:

1. gg-Kerne: $I = 0$
2. gu- & ug-Kerne: $I = (n + \frac{1}{2})\hbar$
3. uu-Kerne: $I = n\hbar$

mit $n = 0, 1, 2, \dots$

Dies gilt für Kerne im Grundzustand, im angeregten Zustand können gg-Kerne ein $I \neq 0$ haben. Ebenso wie bei Atomhüllen, hat auch der Kern eine **Parität**. Sie ist bezüglich der Bahneigenfunktion eines Kerns $\varphi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A)$ definiert über den Paritätsoperator \hat{P}

$$\hat{P}\varphi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = \varphi(-\mathbf{r}_1, \dots, -\mathbf{r}_A). \quad (8.19)$$

Da $\hat{P}^2 = \mathbf{1}$, folgt für die Paritätseigenwerte

$$\hat{P}\varphi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = P\varphi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A), \quad (8.20)$$

mit $P = +1$ (gerade Parität) und $P = -1$ (ungerade Parität). Alle Kernenergieeigenzustände sind Paritätseigenzustände. Ein Kern wird üblicherweise mit Kernspin und Parität gekennzeichnet I^P (z.B. 1^- , 2^+ , $\frac{1}{2}^-$). Der Grundzustand von gg-Kernen ist stets ein 0^+ Zustand. Falls für den Hamilton-Operator

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0, \quad (8.21)$$

haben \hat{H} und \hat{P} gleiche Eigenfunktionen und die Parität ist eine Erhaltungsgröße. Es zeigt sich, dass alle Wechselwirkungen der Natur die Parität erhalten, bis auf die schwache Wechselwirkung, die für den β -Zerfall verantwortlich ist. Da letztere Wechselwirkung so schwach ist, ist die entsprechende Paritätsverletzung „gering“. Die starke Wechselwirkung und somit die Kernkraft erhalten die Parität.

Da Wellenfunktionen mehrerer Teilchen faktorisieren und nicht addieren, ist die Parität eine multiplikative Größe. Werden bei einem Prozess Teilchen erzeugt oder vernichtet, wie in der Teilchenphysik üblich, tritt noch zusätzlich eine **innere „intrinsische Parität“** auf, die zur gewöhnlichen **Bahnparität** multipliziert werden muss.

8.4.1 Multipolmomente

Wie in *Appendix B.2* gezeigt, kann man klassisch das elektrostatische Potential $\varphi(\mathbf{r})$, das von einer Ladungsdichte $\rho(\mathbf{r}')$ erzeugt wird, in einer Multipolentwicklung in der Form schreiben

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \frac{1}{2} \frac{Q_{ij} x_i x_j}{r^5} + \dots , \quad (8.22)$$

mit dem elektrischen

$$\text{Monopol} \quad q = \int \rho(\mathbf{r}) d^3 r , \quad (8.23)$$

$$\text{Dipol} \quad \mathbf{p} = \int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r} d^3 r , \quad (8.24)$$

$$\text{Quadrupol} \quad Q_{ij} = \int \rho(\mathbf{r}) \left(3x_i x_j - \delta_{ij} r^2 \right) d^3 r . \quad (8.25)$$

Um das Coulomb-Potential zu ermitteln welches von den Protonen im Kern verursacht wird, muss man obige Betrachtungen für Quantensysteme adaptieren. Dazu muss man

$$\rho(\mathbf{r}) = Ze \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) , \quad (8.26)$$

setzen. Daraus folgt sofort, dass das Dipolmoment verschwindet, da ψ ein Eigenzustand der Parität ist und $\rho(\mathbf{r})$ somit gerade Parität hat. Damit verschwindet das Integral von \mathbf{p} .⁷ Der Monopol gibt keine Information über die Ladungsverteilung, somit ist das Quadrupolmoment das erste (und wichtigste) elektrische Multipolmoment das Aufschluss über die Ladungsverteilung im Kern gibt. Analog kann man im magnetischen Fall vorgehen. Anstatt ρ ist nun eine Stromdichte \mathbf{j} die Quelle des Vektorpotentials \mathbf{A} anstatt von φ . Da kein Monopol existiert ist ein Dipol das führende (und wichtigste) magnetische Multipolmoment. Da der quantenmechanische Operator jedoch nicht mit dem klassischen Ausdruck verbunden ist, sondern mit dem Drehimpuls, führen wir diese klassischen Überlegungen nicht weiter. Es sei nur erwähnt, dass magnetische Momente von Kernen mit geraden Potenzen von r verschwinden, analog dem elektrischen Dipol.

Magnetisches Dipolmoment

Oben „nicht ausgeführte“ klassische Überlegungen würden beim Übergang zur Quantentheorie nur das mit der Bahnbewegung der Protonen zusammenhängende Dipolmoment liefern.

Es hat ein Teilchen mit einem Spin auch ein bestimmtes magnetisches „Eigen“-Moment

⁷Tatsächlich verletzt die schwache Wechselwirkung die Parität geringfügig, was zu einem extrem kleinen Dipolmoment führt.

μ . Der zugehörige quantenmechanische Operator ist proportional zum Spinoperator $\hat{\mathbf{s}}$, d.h.⁸

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = \frac{\mu}{s\hbar} \hat{\mathbf{s}}, \quad (8.27)$$

wobei $s\hbar$ der Betrag des Spins des Teilchens ist und μ eine für das Teilchen charakteristische Konstante. Die Eigenwerte für die Projektion des magnetischen Momentes ergeben sich zu $\mu_z = \mu\sigma/s$. Der Koeffizient μ , den man gewöhnlich einfach die Größe des magnetischen Momentes bezeichnet, ist also der größtmögliche (kleinstmögliche) Wert für μ_z , der für die Spinprojektion $\sigma = s$ angenommen wird, falls μ positiv (negativ) ist.

Das Verhältnis $\mu/s\hbar$ gibt das Verhältnis des magnetischen Eigenmomentes des Teilchens zum mechanischen Eigendrehimpuls an (wenn beide z -Richtung haben).

Für ein Elektron mit Ladung $-e$ wird das mit der Bahnbewegung assoziierte magnetische Moment⁹

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l^e = -\frac{e}{2m_e c} \hat{\mathbf{l}}. \quad (8.28)$$

Als natürliche Einheit wählt man die Größe von $|\boldsymbol{\mu}_l^e|$ für $|\mathbf{l}| = \hbar$, welche man **Bohrsches Magneton** nennt

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 0.579 \times 10^{-4} \text{ eV/T}. \quad (8.29)$$

Sie entspricht also dem magnetischen Moment einer klassisch mit Drehimpulsbetrag \hbar rotierenden Ladung e . Zusätzlich führen wir den **Landé-Faktor** g ein (auch **gyromagnetischer Faktor** oder kurz **g -Faktor** genannt), welcher der Quotient aus der Größe des gemessenen magnetischen Moments und der Größe des magnetischen Moments, das bei dem vorliegenden Drehimpuls nach der klassischen Physik theoretisch zu erwarten wäre ist.¹⁰ Somit können wir das mit der Bahnbewegung assoziierte magnetische Moment des Elektrons in der Form

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l^e = -g_l^e \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{l}}, \quad \text{mit} \quad g_l^e = 1,$$

(8.30)

schreiben. Das mit der Bahnbewegung assoziierte quantenmechanische magnetische Moment stimmt stets mit dem klassischen magnetischen Moment überein, weshalb $g_l = 1$ ist. Eine Ausnahme bildet das Neutron, bei welchem man etwas anders vorgeht (siehe Fußnote 13).

⁸Wir bemerken, dass die Größen $\boldsymbol{\mu}$ und \mathbf{s} auf beiden Seiten der Gleichung (8.27) gleichen Vektorcharakter haben, wie es sein muss. Es sind beide Axialvektoren. Eine analoge Gleichung für das elektrische Dipolmoment \mathbf{d} (also $\mathbf{d} \propto \mathbf{s}$) würde der Symmetrie bei einer räumlichen Inversion widersprechen. Es würde sich das relative Vorzeichen der beiden Seiten der Gleichung bei einer Inversion ändern. Weiters würde diese Gleichung (und damit auch die Existenz eines elektrischen Momentes für ein Elementarteilchen) der Symmetrie bei Zeitumkehr widersprechen. Ein Vorzeichenwechsel der Zeit ändert \mathbf{d} nicht, \mathbf{s} jedoch schon (was zum Beispiel aus der Definition dieser Größen bei einer Bahnbewegung klar wird, da in die Definition von \mathbf{d} nur die Koordinaten und in jene des Drehimpulses auch die Geschwindigkeit des Teilchens eingehen).

⁹Klassisch ergibt sich für das magnetische Moment eines geladenen Teilchens $\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2mc} \mathbf{l}$.

¹⁰Das Vorzeichen von g gibt an, ob das magnetische Moment zur erwarteten Richtung parallel oder antiparallel liegt. In der Literatur ist die Konvention allerdings nicht ganz eindeutig, so dass derselbe g -Faktor mit unterschiedlichen Vorzeichen zu finden ist.

Analog schreiben wir für das mit dem Spin assoziierte magnetische Eigenmoment eines Elektrons

$$\hat{\mu}_s^e = -g_s^e \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{s} . \quad (8.31)$$

Um den Faktor g_s^e zu erhalten, vergleichen wir zuerst den letzten Term der Pauli-Gleichung (2.24) mit der potentiellen Energie für ein magnetisches Eigenmoment eines Elektrons in einem äusseren Magnetfeld, i.e. $U = -\hat{\mu}_s^e \cdot \mathbf{B}$, woraus folgt

$$\hat{\mu}_s^e = -\mu_B \hat{\sigma} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{s} . \quad (8.32)$$

Vergleichen wir das mit Gleichung (8.31) erhalten wir das Resultat¹¹

$$g_s^e = 2 . \quad (8.33)$$

Letztlich ergibt der Vergleich der Gleichungen (8.27) und (8.31) für das magnetische Eigenmoment eines Elektrons¹²

$$\mu^e = -s^e g_s^e \mu_B = -\frac{g_s^e}{2} \mu_B = -\mu_B . \quad (8.34)$$

Für das gesamte magnetische Moment eines Elektrons, das sich aus der Bahnbewegung und dem Spin zusammensetzt, ergibt sich somit

$$\hat{\mu}^e = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_l^e \hat{l} + g_s^e \hat{s}) . \quad (8.35)$$

Alle Elementarteilchen mit Spin (mit Ausnahme des Neutrinos) haben ein magnetisches Eigenmoment und es gelten ganz analoge Beziehungen. Somit werden die Operatoren für die magnetischen Momente von Proton und Neutron folgendermaßen definiert¹³

$$\begin{aligned} \hat{\mu}^p &= \frac{\mu_K}{\hbar} (g_l^p \hat{l} + g_s^p \hat{s}), & \text{mit} & \quad g_l^p = 1 , \\ \hat{\mu}^n &= \frac{\mu_K}{\hbar} (g_l^n \hat{l} + g_s^n \hat{s}), & \text{mit} & \quad g_l^n = 0 . \end{aligned} \quad (8.36)$$

¹¹Von der Quantenelektrodynamik stammen kleine Korrekturen, welche

$$g_s^e = 2.0023192 \dots ,$$

liefern.

¹²Zur Interpretation von $\mu^e = -s^e g_s^e \mu_B$ sei nochmals daran erinnert, dass sich das negative Vorzeichen ergibt da μ_B für die positive Einheitsladung definiert ist. Der Faktor s^e ergibt sich, da μ_B für den Drehimpuls $1 \hbar$ definiert ist und g_s^e beschreibt die Abweichung des von Spin verursachten magnetischen Momentes von dem durch den Bahndrehimpuls erwarteten Wert.

¹³Das Kernmagneton für die Parameter eines Neutrons ist Null, was im Einklang damit steht, dass das mit der Bahnbewegung assoziierte magnetische Moment für Neutronen verschwindet (wobei $g_l = 1$). Allerdings hat das Neutron ein nichtverschwindendes mit dem Spin assoziiertes magnetisches Eigenmoment. Deshalb ist es üblich auch für das Neutron das Kernmagneton mit den Parametern des Protons zu verwenden. Man muss dann allerdings $g_l^n = 0$ setzen.

Hierbei haben wir analog dem Bohr-Magneton das **Kernmagneton** für ein Nukleon definiert

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 3.152 \times 10^{-8} \text{ eV/T}. \quad (8.37)$$

Die intrinsischen Werte werden durch die Protonenmasse m_p und die einzelnen g-Faktoren charakterisiert. Somit ergeben sich die magnetischen Eigenmomente wie folgt

$$\boxed{\begin{aligned} \mu^p &= \frac{g_s^p}{2} \mu_K, \\ \mu^n &= \frac{g_s^n}{2} \mu_K. \end{aligned}} \quad (8.38)$$

Die gemessenen nuklearen g-Faktoren sind

$$\boxed{\begin{aligned} g_s^p &= +5.5856 \dots, \\ g_s^n &= -3.8262 \dots, \end{aligned}} \quad (8.39)$$

und die entsprechenden magnetischen Eigenmomente somit

$$\boxed{\begin{aligned} \mu^p &= +2.7928 \dots \mu_K, \\ \mu^n &= -1.9131 \dots \mu_K. \end{aligned}} \quad (8.40)$$

Aufgrund der Abhängigkeit von m_p sind die magnetischen Momente etwa 3 Größenordnungen kleiner als für das Elektron. Sie weichen stark von der Erwartung für ein Spin 1/2 Teilchen von der Dirac-Gleichung ab ($\mu^p = 1 \mu_K$, $\mu^n = 0$). Das liegt daran, dass die Nukleonen, im Gegensatz zum Elektron, welches die Vorhersage sehr gut erfüllt, eine Ausdehnung und komplizierte innere Struktur haben.

Im Kapitel 10 wird das Schalenmodell des Kerns besprochen werden. In diesem Modell setzt sich das magnetische Kernmoment aus den magnetischen Momenten der Nukleonen außerhalb abgeschlossener Schalen zusammen, denn die Momente der Nukleonen in abgeschlossenen Schalen kompensieren sich gegenseitig. Jedes Nukleon erzeugt im Kern ein magnetisches Moment, das aus zwei Teilen besteht: einen Spinanteil und (im Falle eines Protons) einen Bahnanteil. Der Beitrag eines einzelnen Nukleons am Beispiel eines Protons kann wie in Abbildung 8.4 visualisiert werden. Mit * haben wir alle quantenmechanischen Vektoren gekennzeichnet. Ohne Verlust der Allgemeinheit geben wir magnetische Vektoren in Einheiten von μ_K und Drehimpulse in Einheiten von \hbar an. \mathbf{I}^* hat eine Länge, sodass er entlang \mathbf{B}_{ext} eine maximale observable Komponente I hat, welche halbzahlig ist. Für $I = 3/2$ beispielsweise, hätte \mathbf{I}^* insgesamt $(2I + 1)$ unterschiedliche Komponenten

$$m_I = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}.$$

Die Länge von \mathbf{I}^* ist gegeben durch

$$\mathbf{I}^{*2} = I(I + 1), \quad (8.41)$$

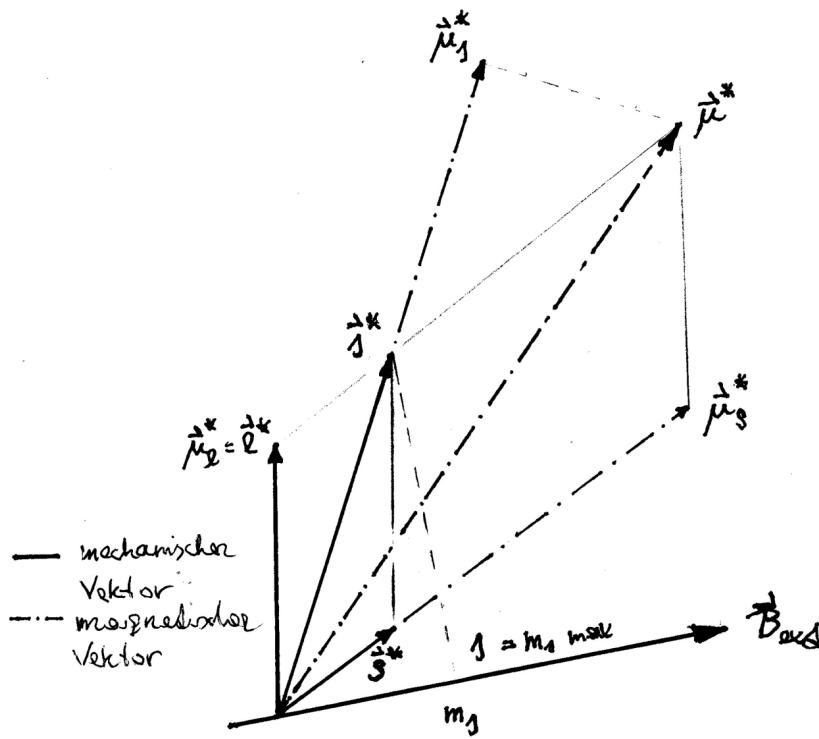


Abbildung 8.4: Visualisierung des Beitrages eines einzelnen Nukleons am Beispiel eines Protons (Quelle nach [Fer50]).

bzw.

$$I^* = \sqrt{I(I+1)} . \quad (8.42)$$

Dasselbe gilt für die anderen Drehimpulsvektoren \mathbf{l}^* und \mathbf{s}^* .

Die magnetischen Vektoren werden anders behandelt. Quantenmechanisch haben wir

$$\frac{\hat{\mu}_s}{\mu_K} = g_s \frac{\hat{s}}{\hbar} . \quad (8.43)$$

Deshalb müssen wir für unser Vektormodell schreiben (unter Berücksichtigung der von uns gewählten Normierung)

$$\hat{\mu}_s^* = g_s \mathbf{s}^* = g_s \sqrt{s(s+1)} \mathbf{e}_s , \quad (8.44)$$

wobei

$$\mu_{\text{observ.}} \equiv \mu = (\mu_z^*)_{\text{max}} = g_s (s_z^*)_{\text{max}} = g_s s . \quad (8.45)$$

Somit haben wir für das Proton $2.7928\dots = \frac{g_s^p}{2}$ und

$$\begin{aligned} g_s^p &= +5.5856\dots , \\ g_s^n &= -3.8262\dots . \end{aligned}$$

Wir bemerken

$$\mu^{*2} \neq \mu(\mu + 1). \quad (8.46)$$

Da g_s und g_l unterschiedlich sind, ist $\boldsymbol{\mu}^*$ nicht parallel zu \mathbf{I}^* , wie aus Abbildung 8.4 ersichtlich.

In Abwesenheit eines externen Magnetfeldes \mathbf{B}_{ext} , bleibt \mathbf{I}^* im Raum fixiert und $\boldsymbol{\mu}^*$ wird um \mathbf{I}^* mit einer hohen Frequenz ω rotieren. Das Zeitmittel von $\boldsymbol{\mu}^*$ wird die Komponente von $\boldsymbol{\mu}^*$ entlang \mathbf{I}^* sein. Wir nennen sie

$$\boldsymbol{\mu}_I^* = \left(\frac{\boldsymbol{\mu}_s^* \cdot \mathbf{I}^*}{I^*} + \frac{\boldsymbol{\mu}_l^* \cdot \mathbf{I}^*}{I^*} \right) \frac{\mathbf{I}^*}{I^*}. \quad (8.47)$$

Wenn \mathbf{B}_{ext} eingeschalten wird, wird \mathbf{I}^* beginnen um \mathbf{B}_{ext} mit einer Frequenz $\omega_{Larmor} \ll \omega$ zu präzessieren (Man kann abschätzen, dass für im Labor übliche Magnetfeldstärken $\lesssim 10^5$ Gauss tatsächlich $\omega_{Larmor} \ll \omega$ gilt). Die Projektion von $\boldsymbol{\mu}_I^*$ auf \mathbf{B}_{ext} , also das observable μ , wird

$$\mu_{obs} = \mu_I^* \frac{m_I}{I^*} = \mu_I^* \frac{m_I}{\sqrt{I(I+1)}}. \quad (8.48)$$

Als nächstes berechnen wir diese Größe. Wir haben

$$\begin{aligned} s^{*2} &= \frac{3}{4}, \\ l^{*2} &= l(l+1), \\ \cos(\mathbf{s}^*, \mathbf{I}^*) &= \frac{s^{*2} + I^{*2} - l^{*2}}{2s^*I^*}, \\ \cos(\mathbf{l}^*, \mathbf{I}^*) &= \frac{l^{*2} + I^{*2} - s^{*2}}{2l^*I^*}. \end{aligned}$$

Somit haben wir

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{\mu}_s^* \cdot \mathbf{I}^*}{I^*} &= \mu_s^* \cos(\mathbf{s}^*, \mathbf{I}^*) = g_s \frac{s^{*2} + I^{*2} - l^{*2}}{2I^*}, \\ \frac{\boldsymbol{\mu}_l^* \cdot \mathbf{I}^*}{I^*} &= \mu_l^* \cos(\mathbf{l}^*, \mathbf{I}^*) = g_l \frac{l^{*2} + I^{*2} - s^{*2}}{2I^*}, \end{aligned} \quad (8.49)$$

und

$$\boldsymbol{\mu}_I^* = \frac{g_s(s^{*2} + I^{*2} - l^{*2}) + g_l(l^{*2} + I^{*2} - s^{*2})}{2I^*}, \quad (8.50)$$

bzw.

$$\mu_{obs} = \mu_I^* \frac{m_I}{I^*} = \frac{g_s(s^{*2} + I^{*2} - l^{*2}) + g_l(l^{*2} + I^{*2} - s^{*2})}{2I^{*2}} m_I. \quad (8.51)$$

Schreiben wir den Nenner als $2I(I+1)$ erhalten wir $\mu_{obs max}$ wenn m_I den Wert I annimmt

$$\mu_{obs max} = \frac{g_s(s^{*2} + I^{*2} - l^{*2}) + g_l(l^{*2} + I^{*2} - s^{*2})}{2(I+1)}. \quad (8.52)$$

Wir haben alle μ in Einheiten von μ_K , und somit dimensionslos, definiert. Die entsprechenden dimensionsbehafteten Größen erhält man, wenn man mit μ_K multipliziert. Führen wir ein g_I folgendermaßen ein:

$$\boldsymbol{\mu}_I^* = g_I \boldsymbol{I}^* ,$$

bzw.

$$\mu_I^* = g_I I^* ,$$

dann finden wir die Beziehung

$$g_I = \frac{g_s (s^{*2} + I^{*2} - l^{*2}) + g_l (l^{*2} + I^{*2} - s^{*2})}{2 I^{*2}} . \quad (8.53)$$

Verwenden wir $I = l + 1/2$ bzw. $l = I - 1/2$ erhalten wir für ein Proton ($g_l^p = 1$)

$$\begin{aligned} \mu_{obs\ max} &= \frac{g_s^p \left(\frac{3}{4} + I(I+1) - (I - \frac{1}{2})(I + \frac{1}{2}) \right) + (I - \frac{1}{2})(I + \frac{1}{2}) + I(I+1) - \frac{3}{4}}{2(I+1)} \\ &= \frac{g_s^p(I+1) + 2I^2 + I - 1}{2(I+1)} \\ &= \frac{g_s^p}{2} + \frac{2I-1}{2} \\ &= I + \frac{g_s^p - 1}{2} , \end{aligned} \quad (8.54)$$

und somit finden wir

$$\begin{aligned} \mu_{obs\ max} &= I + 2.2928 , && \text{für Proton mit } I = l + 1/2 , \\ \mu_{obs\ max} &= \frac{I^2 - 1.2928 I}{I + 1} , && \text{für Proton mit } I = l - 1/2 , \\ \mu_{obs\ max} &= -1.9131 , && \text{für Neutron mit } I = l + 1/2 , \\ \mu_{obs\ max} &= \frac{1.931 I}{I + 1} , && \text{für Neutron mit } I = l - 1/2 . \end{aligned} \quad (8.55)$$

Diese vier Gleichungen werden **Schmidt-Gleichungen** genannt. Die entsprechenden **Schmidt-Linien** sind in Abbildung 8.5 wiedergegeben. Wäre dieses einfache Modell richtig, so müssten die gemessenen magnetischen Momente exakt auf die Schmidt-Linien fallen. Das ist offensichtlich nicht der Fall, doch gruppieren sich die magnetischen Momente für ungerades Z in zwei Bändern zwischen den Linien. Um das zu verdeutlichen, sind zwei weitere Linien eingezeichnet, die für $\mu_P = 1$ (statt 2.79) berechnet sind. Das Modell ist also einerseits sicherlich zu einfach, enthält aber andererseits doch gewisse richtige Züge. Wir wissen heute, dass die wenigsten Kernzustände durch Einteilchen-Konfigurationen korrekt beschrieben werden. Die Abweichungen der magnetischen Momente von den Schmidt-Linien ist daher nicht erstaunlich. Bei leichten Kernen, für die das Einteilchenmodell gut zutrifft (z.B. ^{15}N , ^{15}O , ^{17}O), sind die berechneten und beobachteten Werte für μ in ganz guter Übereinstimmung. Bei schweren Kernen ist die Übereinstimmung weniger gut (^{55}Co , ^{207}Pb , ^{209}Bi). Die Abweichungen lassen

sich vermutlich auf eine Polarisation des Rumpfes der abgeschlossenen Schalen zurückführen und vielleicht teilweise darauf, dass der g-Faktor eines Nukleons im Kernverband etwas verschieden von dem eines freien Teilchens ist. Messungen zeigen, dass in etwa $-2\mu_K < \mu_I < 6\mu_K$ (siehe auch Abbildung 8.5).

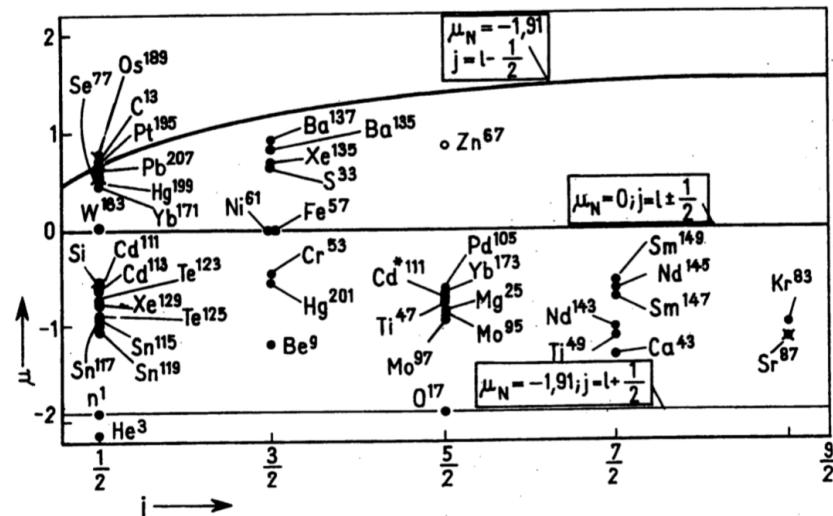
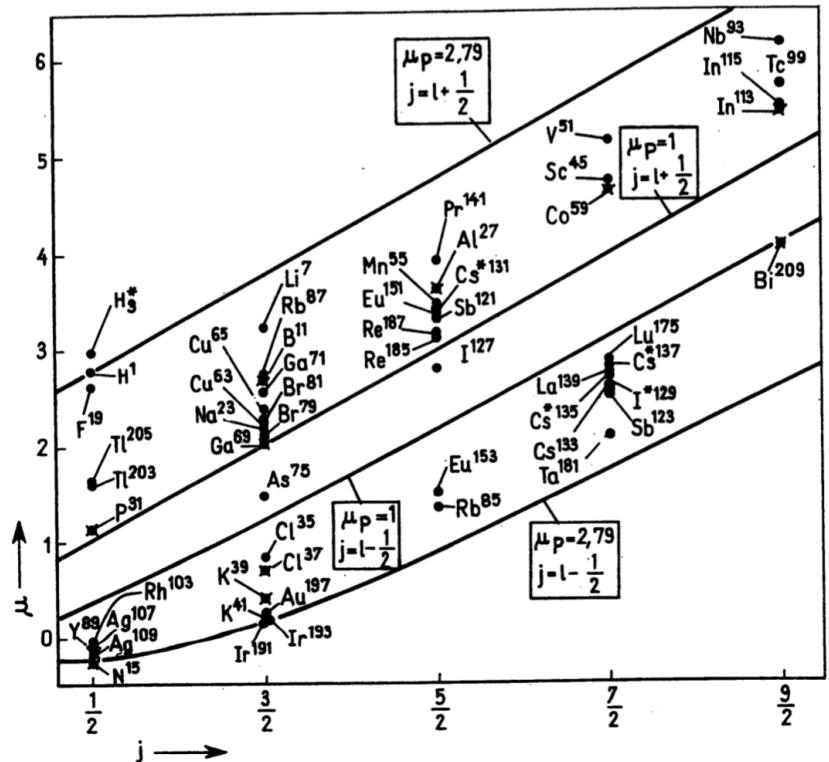


Abbildung 8.5: Magnetische Momente und Schmidt-Linien für Kerne mit ungepaartem Proton (oben) und ungepaartem Neutron (unten) (Quelle [MK13b]).

Das magnetische Moment können wir exakt definieren

$$\mu_I = \int \psi_{m=I}^* \hat{\mu}_z \psi_{m=I} dV . \quad (8.56)$$

Bei der Bildung des Erwartungswertes spielt es keine Rolle ob wir $\hat{\mu}$ oder $\hat{\mu}_I$ verwenden.

Als Beispiel betrachten wir das Deuteron, das aus einem Proton und einem Neutron besteht. Wir wissen, dass nur der Spin-Triplett Zustand ($S = 1$) stabil ist. Hätten wir einen reinen 3S_1 -Zustand, dann hätten wir

$$\hat{\mu}^D = \frac{\mu_K}{\hbar} (g_s^p \hat{s} + g_s^n \hat{s}) = g_s^D \frac{\mu_K}{\hbar} \hat{S} , \quad (8.57)$$

was mit Gleichung (8.27)

$$\begin{aligned} \mu^D &= \left(\frac{g_s^p}{2} + \frac{g_s^n}{2} \right) \mu_K = g_s^D \mu_K \\ &= 0.88 \mu_K , \end{aligned} \quad (8.58)$$

ergibt. Experimentell findet man jedoch für den g_s^D -Faktor 0.86. Daraus lässt sich folgern, dass das Deuteron im Grundzustand kein reiner 3S_1 -Zustand ist, sondern ein Beitrag von der Bahnbewegung der Nukleonen herrührt.

Wir sehen, dass die Messung von magnetischen Momenten Aufschluss über den Kernaufbau gibt. Sie ist beispielsweise bei der Überprüfung von Kernmodellen von grosser Bedeutung.

Elektrisches Quadrupolmoment

Wir betrachten in diesem Zusammenhang die elektrostatische Wechselwirkung zwischen nicht kugelsymmetrischen Kernen und der Hülle. Das von der Hülle in Kernnähe verursachte elektrische Potential sei $\varphi(\mathbf{r})$ mit der Feldstärke $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$. Ein Kern mit Ladungsdichtevertteilung $\rho(\mathbf{r})$ hat daher im Hüllenzield die elektrostatische Energie

$$U = \int \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d^3r . \quad (8.59)$$

Wir entwickeln φ um $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, dem Kernschwerpunkt, in die Reihe

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{0}) + \mathbf{r} \cdot \nabla \varphi_0 + \frac{1}{2} x_i x_j \partial_i \partial_j \varphi_0 + \dots , \quad (8.60)$$

wobei $\partial_i \varphi_0$ als $\partial_i \varphi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}}$ und analog für höhere Ordnungen zu verstehen ist. Der erste Term liefert

$$U_0 = \varphi(\mathbf{0}) \int \rho(\mathbf{r}) d^3r = q \varphi(\mathbf{0}) , \quad - \text{Monopolbeitrag } (q = Ze) , \quad (8.61)$$

während der zweite Term

$$U_1 = \nabla \varphi_0 \cdot \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) d^3r = \nabla \varphi_0 \cdot \mathbf{p} , \quad - \text{Dipolbeitrag} . \quad (8.62)$$

Das Integral verschwindet aus Paritätsgründen, wie weiter oben (Anfang von Kapitel 8.4.1) erläutert, da ρ gerade Parität hat wenn es durch Wellenfunktionen ausgedrückt wird. Der dritte Term liefert

$$U_2 = \frac{1}{2} \partial_i \partial_j \varphi_0 \int x_i x_j \rho(\mathbf{r}) d^3 r . \quad (8.63)$$

Wenn wir s -Elektronen ausnehmen, die wegen ihrer Kugelsymmetrie ohnehin keinen Feldgradienten liefern, so ist die Ladungsdichte der Elektronen am Kernort gleich Null und es ist $\Delta \varphi_0 = 0$. Wir können U_2 daher umformen

$$\begin{aligned} U_2 &= \frac{1}{6} \partial_i \partial_j \varphi_0 \int (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}) \rho(\mathbf{r}) d^3 r \\ &= \frac{1}{6} \partial_i \partial_j \varphi_0 Q_{ij} , \end{aligned} \quad - \text{Quadrupolbeitrag} . \quad (8.64)$$

Als nächstes betrachten wir Felder mit Zylindersymmetrie in z -Richtung.¹⁴ Aufgrund der Zylindersymmetrie ist φ nur eine Funktion von $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ und z . Da wir $\partial_i \partial_j \varphi_0$ suchen, interessieren nur Terme die quadratisch in den Koordinaten sind. Für das Potential machen wir daher den Ansatz¹⁵

$$\varphi = C_1 (x^2 + y^2) + C_2 z^2 . \quad (8.65)$$

Da $\Delta \varphi_0 = 0$ ist, folgt $4C_1 + 2C_2 = 0$ und damit

$$\varphi \propto 2z^2 - x^2 - y^2 . \quad (8.66)$$

Somit finden wir

$$\partial_i \partial_j \varphi_0 = 0 , \quad \text{für } i \neq j , \quad (8.67)$$

sowie

$$\partial_x^2 \varphi_0 = \partial_y^2 \varphi_0 = -\frac{1}{2} \partial_z^2 \varphi_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right)_0 , \quad (8.68)$$

und für U_2

$$U_2 = \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} Q_{xx} + \frac{1}{2} Q_{yy} - Q_{zz} \right) \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right)_0 , \quad (8.69)$$

¹⁴Es gilt dann $\frac{\partial \varphi}{\partial \phi} = 0$.

¹⁵Wir bemerken, dass eine allgemeine Entwicklung des Potentials bis zur zweiten Ordnung um den Ursprung die Form

$$\varphi = C_1 + C_{2,i} x_i + C_{3,ij} x_i x_j ,$$

hat. Zu $\partial_i \partial_j \varphi_0$ tragen die Konstanten C_1 und $C_{2,i}$ nichts bei, weshalb man sie vernachlässigen kann. Zylindersymmetrie erfordert für den Term proportional $x_i x_j$ die spezifische Form in Gleichung (8.65).

und da $Q_{ii} = 0$ letztlich

$$U_2 = -\frac{1}{4} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right)_0 Q , \quad (8.70)$$

wobei wir der allgemeinen Konvention folgend $Q := Q_{zz}$ verwendet haben. Wir finden somit, dass falls das Hüllenfeld am Ursprung (im Kern) Zylindersymmetrie besitzt, eine der fünf Komponenten von Q_{ij} zur Berechnung der Wechselwirkungsenergie ausreicht. Für eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung verschwinden alle Q_{ij} .¹⁶ Somit entsteht U_2 durch eine nicht kugelsymmetrische Ladungsverteilung, einen deformierten Kern, in einem inhomogenen Feld.

Soweit sind alle Betrachtungen noch klassisch. Die Symmetriearchse des deformierten Kerns muss natürlich nicht mit der Symmetrie des Hüllenfeldes in z -Richtung übereinstimmen. Dann werden das Quadrupolmoment des Kerns nicht mit Q in U_2 übereinstimmen und wir müssen den funktionalen Zusammenhang der beiden Quadrupolmomente herstellen. Wir betrachten die Situation vorerst klassisch. Neben dem feldsymmetrischen Koordinatensystem (r, ϑ, ϕ) bzw. (x, y, z) stimmt das zweite mit den Koordinaten (r, ϑ_K, ϕ_K) bzw. (ζ, η, ξ) mit der Richtung des deformierten Kerns überein. Die Kernachse zeigt in ξ -Richtung und schließt mit der z -Achse den Winkel β ein (siehe Abbildung 8.6). In *Appendix D.1* wird gezeigt, dass

$$\cos \vartheta = \cos \vartheta_K \cos \beta + \sin \vartheta_K \sin \beta \cos(\phi_K - \phi_z) , \quad (8.73)$$

gilt und weiters

$$Q = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) Q_0 , \quad (8.74)$$

mit dem **inneren Quadrupolmoment** des Kerns

$$Q_0 = \int \rho(r, \vartheta_K) (3 \cos^2 \vartheta_K - 1) r^2 dV , \quad (8.75)$$

das dem Quadrupolmoment entspricht, welches im kerneigenen Koordinatensystem berechnet

¹⁶Wir verwenden

$$\int_{[4\pi]} d\Omega x_i x_j = \frac{4\pi}{3} r^2 \delta_{ij} . \quad (8.71)$$

Für eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung ergibt sich

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= \int \rho(r) (3x_i x_j - \delta_{ij} r^2) r^2 dr d\Omega \\ &= \int_0^\infty \rho(r) (4\pi r^2 \delta_{ij} - 4\pi \delta_{ij} r^2) r^2 dr \\ &= 0 . \end{aligned} \quad (8.72)$$

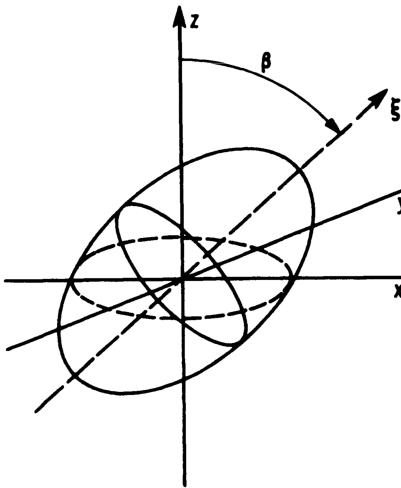


Abbildung 8.6: Zur Berechnung der Quadrupolenergie (Quelle [MK13a]).

wird. Somit erhalten wir klassisch für U_2 ¹⁷

$$U_2 = -\frac{1}{4} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right)_0 \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) Q_0 . \quad (8.76)$$

Beim Übergang zur quantenmechanischen Beschreibung geht man folgendermaßen vor. Wir definieren

$$\tilde{Q} = \sum_{i=1}^Z \int |\psi_{m_I=I}|^2 (3 \cos^2 \vartheta_i - 1) r_i^2 d\tau , \quad (8.77)$$

wobei $\psi_{m_I=I}$ die Kernwellenfunktion ist (Koordinaten $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A$) mit maximaler Kernspinprojektion $m_I = I$ und i sich auf die Protonkoordinaten bezieht. Für eine vollständige quantenmechanische Korrespondenz müsste \tilde{Q} noch mit einem Ladungsfaktor e multipliziert werden, das wird konventionellerweise meist nicht getan. Somit hat \tilde{Q} die Dimension einer Fläche. Üblicherweise wird für die Einheit des Momentes

$$1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2 = 10^2 \text{ fm}^2 ,$$

verwendet. Des weiteren kann der Winkel β zwischen z -Achse des Hüllenfeldes und Symmetriearchse des Kerns in Richtung des Kernspins $\hat{\mathbf{I}}$ nur die diskreten Werte annehmen

$$\cos \beta = \frac{m_I}{\sqrt{I(I+1)}} , \quad \text{mit } m_I = -I, -I+1, \dots, I , \quad (8.78)$$

und somit

$$\frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) = \frac{1}{2} \frac{3m_I^2 - I(I+1)}{I(I+1)} . \quad (8.79)$$

¹⁷Eigentlich enthält Gleichung (8.76) das Produkt zweier Tensoren, eines Feldgradiententensors und eines Ladungsverteilungstensors. Durch Annahme von Axialsymmetrie und geeigneter Wahl der Koordinatenrichtungen haben wir jedoch die komplizierten Tensorschreibweisen vermieden.

Der quantenmechanisch kleinste Winkel ergibt sich für $m_I = I$. Für diesen Winkel ergibt eine quantenmechanische Rechnung (siehe *Appendix D.2*)

$$\tilde{Q} = \frac{(2I - 1)I}{(2I + 3)(I + 1)} \tilde{Q}_0 . \quad (8.80)$$

Mit wachsendem I strebt \tilde{Q}/\tilde{Q}_0 recht langsam gegen 1. Für die quantenmechanisch erlaubten verschiedenen Werte von β führen wir $\tilde{Q}(m_I)$ ein, welche

$$\frac{\tilde{Q}(m_1)}{\tilde{Q}(m_2)} = \frac{3 \cos^2 \beta_1 - 1}{3 \cos^2 \beta_2 - 1} = \frac{3m_1^2 - I(I+1)}{3m_2^2 - I(I+1)} , \quad (8.81)$$

erfüllen. Da $\tilde{Q} = \tilde{Q}(I)$ erhalten wir

$$\tilde{Q}(m_I) = \frac{3m_I^2 - I(I+1)}{I(2I-1)} \tilde{Q} , \quad (8.82)$$

und damit letztlich das quantenmechanische Analogon der klassischen Relation aus Gleichung (8.74)

$$\tilde{Q}(m_I) = \frac{3m_I^2 - I(I+1)}{(2I+3)(I+1)} \tilde{Q}_0 . \quad (8.83)$$

Von den Gleichungen (8.80) und (8.83) kann man ablesen, dass für $I = 0$ und $I = 1/2$ die \tilde{Q} bzw. $\tilde{Q}(m_I)$ verschwinden ohne, dass das innere Quadrupolmoment \tilde{Q}_0 verschwinden muss. D.h. für diese Werte von I verschwindet das gemessene aber nicht das innere Quadrupolmoment der Kerne (Das gilt für Kerne im Grundzustand, man kann das innere Quadrupolmoment aber bei angeregten Kernen messen).

Das ist ein Spezialfall folgender allgemeiner Regel:

Der Tensor für ein 2^l -Polmoment (mit geradem l) ist nur für Zustände eines Systems mit dem Gesamtdrehimpuls $J \geq l/2$ von Null verschieden. Der Tensor für ein 2^l -Polmoment ist ein irreduzibler Tensor der Stufe l , und die Bedingung $J \geq l/2$ ist eine Folge aus den allgemeinen Auswahlregeln für die Matrixelemente solcher Tensoren bzgl. des Drehimpulses. Es ist die Bedingung, unter der die Diagonalelemente von Null verschieden sein können. Die Auswahlregel verlangt bzgl. der Parität, dass l dabei eine gerade Zahl ist.

Die elektrischen Multipolmomente sind reine Bahngrößen (ihre Operatoren enthalten keine Spinoperatoren). Falls man die Spin-Bahn Wechselwirkung vernachlässigen kann und somit L und S einzeln erhalten bleiben, genügen die Matrixelemente für die Multipolmomente nicht nur den Auswahlregeln in der Quantenzahl J , sondern auch in L .

Das Quadrupolmoment eines Kerns gibt Aufschluss über die geometrische Form des Kerns. Symmetrien können die Anzahl unabhängiger Komponenten stark verringern. Wir haben bereits festgestellt, dass für eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung $Q_{ij} = 0$. Wir haben auch gefunden, dass in einem zylindersymmetrischen Feld eine Komponente (z.B. Q_{zz}) die Wechselwirkung vollständig beschreibt. Umgekehrt wollen wir zeigen, dass für eine

Ladungsverteilung die symmetrisch um die z -Achse ist, das Quadrupolmoment nur eine unabhängige Komponente hat. Die Komponenten mit $i \neq j$ verschwinden, da positive und negative Beiträge im Integral Gleichung (8.25) verschwinden. Aufgrund der Symmetrie um die z -Achse gilt $Q_{xx} = Q_{yy}$. Da allgemein $Q_{ii} = 0$, finden wir letztlich

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= 0, \quad \text{für } i \neq j, \\ Q_{xx} = Q_{yy} &= -\frac{1}{2} Q_{zz}. \end{aligned} \tag{8.84}$$

Es gibt somit nur eine unabhängige Komponente, konventionsgemäß wählt man hierfür $Q := Q_{zz}$. Aus der Definition von Q ergeben sich (und analog quantenmechanisch für \tilde{Q}_0) die drei Fälle (siehe Abbildung 8.7):

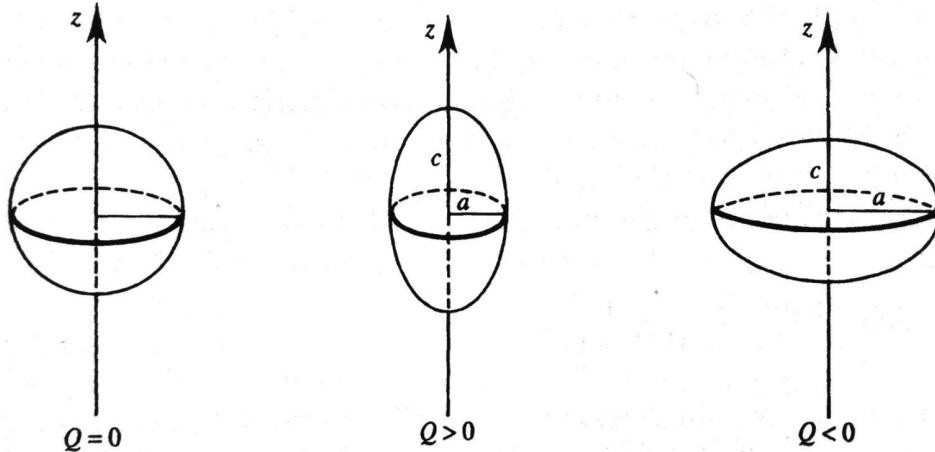


Abbildung 8.7: Beziehung zwischen Deformation und Quadrupolmoment (Quelle [YH10]).

1. $Q = 0$: sphärisch
2. $Q > 0$: verlängert bzw. prolat
3. $Q < 0$: abgeplattet bzw. oblat

Die geometrische Interpretation ergibt sich, wenn man beispielsweise ein homogen geladenes Rotationsellipsoid mit der z -Achse als Symmetriechse betrachtet. Für dessen klassisches Quadrupolmoment ergibt sich (siehe Appendix B.3)

$$\frac{1}{e} Q = \frac{2}{5} Z (c^2 - a^2), \tag{8.85}$$

mit den Halbachsen $a = b$ in x - und y -Richtung sowie c in z -Richtung. In der Hyperfeinstruktur führt ein Quadrupolmoment zu Abweichungen von der Intervallregel. Experimentell besteht die Schwierigkeit darin, $(\frac{\partial E}{\partial z})_0$ am Kern zu ermitteln. Somit gibt es vergleichsweise eher große Ungenauigkeiten.

Für das Deuteron findet man beispielsweise

$$\tilde{Q} = 2.82 \text{ mb} = 2.82 \times 10^{-31} \text{ m}^2.$$

Somit ist das Deuteron im Grundzustand kein reiner S -Zustand (für welchen das Quadrupolmoment verschwinden würde). Es zeigt sich, dass der Grundzustand zu 96% ein 3S_1 - und zu 4% ein 3D_1 -Zustand ist, diese Mischung stimmt mit dem korrekten magnetischen Dipolmoment überein. Die experimentellen Werte für \tilde{Q} stellen wichtige Tests zur Überprüfung von Kernmodellen dar.

Wie bereits besprochen verschwinden alle ungeraden elektrischen und geraden magnetischen Momente von Kernen (2^L -Pol). Die höheren Pole als der magnetische Dipol und elektrische Quadrupol, sind meist zu klein für die Beobachtung. Die nächsthöheren sind das elektrische Hexadekupolmoment ($L = 4$) wie bei ^{234}U und ^{180}Hf und zu „exotischen“ Kerndeformationen führt, sowie der magnetische Oktupol ($L = 3$) (siehe Abbildung 8.8).

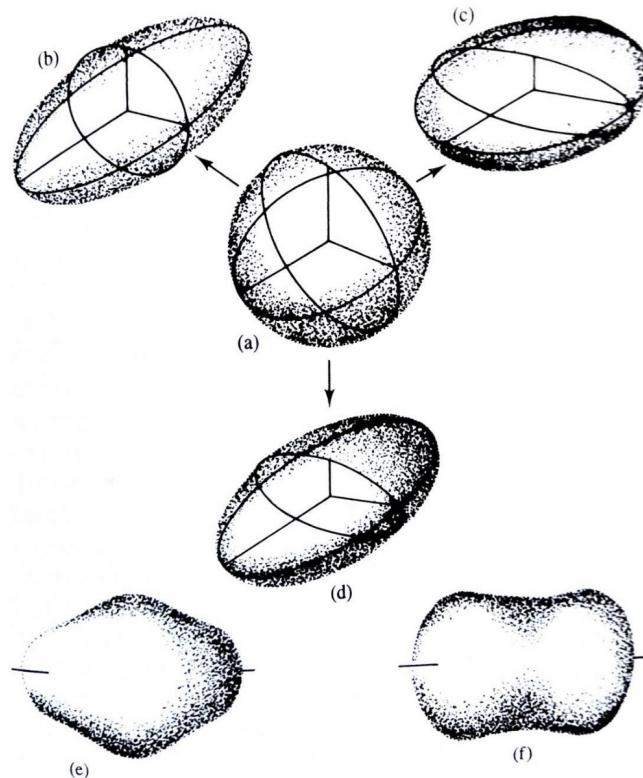


Abbildung 8.8: Mögliche Formen von deformierten Kernen (Quelle [YH10]).

8.5 Angeregte Kerne

Wie jedes gebundene Quantensystem haben die A Nukleonen eine Reihe angeregter Zustände mit höherer Energie als der Grundzustand. Letzterem, dem am stärksten gebundenen System schreibt man die Energie Null zu. In Abbildung 8.9 sieht man die Anregungsmodi von $^{17}_8\text{O}$ (gu-), $^{17}_9\text{F}$ (ug-), $^{82}_{36}\text{Kr}$ (gg-) und $^{111}_{49}\text{In}$ (uu-Kern). Rechts von jedem Niveau sind die Energien

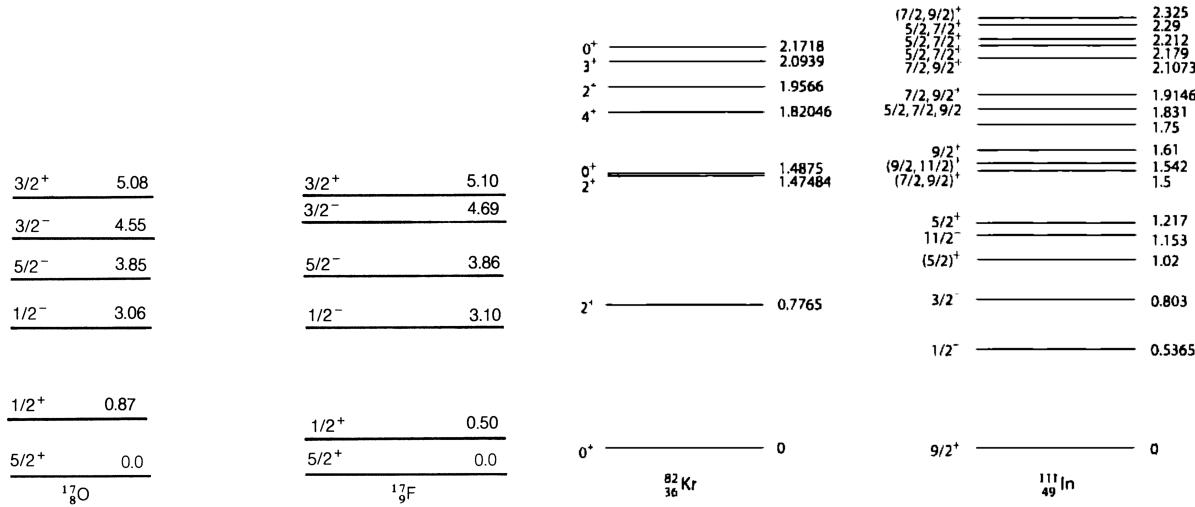


Abbildung 8.9: Die Anregungsmodi der Kerne $^{17}_8\text{O}$, $^{17}_9\text{F}$, ^{36}Kr und ^{111}In . Rechts von jedem Niveau sind die Energien in MeV wiedergegeben und links Spin und Parität. Klammern markieren zweifelhafte Werte (Quellen [BS13] und [Ber07]).

in MeV wiedergegeben und links Spin und Parität. Klammern markieren zweifelhafte Werte.

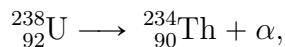
Die Verteilung der Niveaus kann von Kern zu Kern enorm variieren. Während ^4_2He den ersten angeregten Zustand bei 19 MeV hat, haben andere Kerne bereits mehr als 50 angeregte Niveaus unter einer Anregungsenergie von 1 MeV. Allgemein gilt, dass die Zustandsdichte der Niveaus rapide mit der Energie ansteigt und praktisch ein Kontinuum für hohe Energie formt. Die Energie der ersten angeregten Zustände ist bei Kernen mit einer magischen Zahl von Protonen oder Neutronen höher. Tatsächlich liefern einfache Kernmodelle sehr viel Information über die Zusammensetzung der angeregten Niveaus von Kernen.

8.6 Stabilität der Kerne

Die soeben besprochenen angeregten Zustände der Kerne sind nicht stabil. Gewöhnlicherweise zerfällt ein angeregter Kern durch die Emission von Photonen in einen Zustand geringerer Energie desselben Kerns. Die Energie der emittierten Photonen ist typischerweise im Gammabereich. Eine Folge solcher Zerfälle führt für gewöhnlich zum Grundzustand des Kerns.

Dieser Grundzustand ist für viele Kerne nicht stabil und führt zum Zerfall in andere Kerne unter spontaner Emission von einem oder mehreren Teilchen oder Fragmenten. Die Kernzerfälle werden in Kapitel 11 genauer betrachtet, hier fassen wir nur kurz die möglichen Zerfälle eines Kerns (A, Z) zusammen.

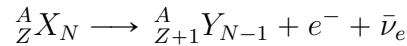
1. **α -Zerfall:** Hierbei wird ein Heliumkern (^4_2He) emittiert, zurück bleibt ein Kern ($A - 4, Z - 2$). Dieser Prozess ist energetisch erlaubt für schwere Kerne, z.B.



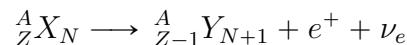
wobei das α -Teilchen eine kinetische Energie von 4.2 MeV hat.

Der α -Zerfall ist dafür verantwortlich, dass es keine stabilen Elemente mit $Z > 83$ gibt.

2. **β^- - und β^+ -Zerfall:** Stabile leichte Kerne haben eine Protonenzahl Z ähnlich zur Neutronenzahl N . In schweren Kernen ist eine größere Anzahl an Neutronen notwendig um die Coulomb-Abstoßung zwischen den Protonen zu kompensieren. In beiden Fällen gilt, hat ein Kern zu großes N für ein Gleichgewicht, kann ein β^- -Zerfall stattfinden:



d.h. es bleibt ein Kern $(A, Z + 1)$ zurück unter Aussendung eines Elektrons und eines (Elektron-)Antineutrinos. Der zurückbleibende Kern befindet sich dann näher am Gleichgewicht. Im umgekehrten Fall, bei zu geringem N , kann ein β^+ -Zerfall stattfinden:



d.h. es bleibt ein Kern $(A, Z - 1)$ zurück unter Aussendung eines Positrons und eines (Elektron-)Neutrinos.

In beiden Fällen ist der Tochterkern Y nicht notwendigerweise stabil und kann gleichermaßen oder auf andere Weise weiter zerfallen.

3. **γ -Zerfall:** Hierbei sendet ein angeregter Kern Photonen aus und geht in einen weniger hochangeregten oder den Grundzustand über. Ein angeregter Kern ist typischerweise der Tochterkern bei einem α - oder β -Zerfall. Die Anregungsenergie wird dann mittels Gammastrahlung emittiert. Da der Kern dabei nicht in „seine Bestandteile“ zerfällt, ist es streng genommen kein Kernzerfall, wird aber trotzdem oft so bezeichnet.
4. **Elektroneneinfang:** Hierbei wird ein atomares Elektron vom Kern eingefangen, wodurch Z um 1 sinkt und N um 1 steigt. Das ist derselbe Effekt wie beim β^+ -Zerfall, in schweren Kernen konkurrieren beide Zerfallsarten.
5. **Fission:** Hier zerfällt der Kern in etwa zwei Teile von ähnlicher Größe zusammen mit zwei oder drei Neutronen. Dieser Prozess kann spontan für sehr schwere Kerne stattfinden und ist, gemeinsam mit dem α -Zerfall, für die extrem kurze Halbwertszeit von $Z > 100$ Kernen verantwortlich.
6. **Emission leichter Fragmente:** In seltenen Fällen können auch Kerne schwerer als ${}^4\text{He}$ emittiert werden, wenn dies energetisch möglich ist. Es wurden Emissionen von ${}^{14}\text{C}$, ${}^{24}\text{Ne}$, ${}^{28}\text{Mg}$ und ${}^{32}\text{Si}$ bei schweren Kernen beobachtet. Diese Emissionen sind allesamt selten und schwer zu messen.
7. **Emission eines Nukleons:** Hierbei wird ein Neutron oder Proton emittiert und hinterlässt einen $(A - 1, Z)$ bzw. $(A - 1, Z - 1)$ Kern.

Die Erhaltung der Energie bzw. Masse gestattet Zerfälle nur dann, wenn die Masse des ursprünglichen Mutterkerns größer ist als die Summe der Massen der Zerfallsprodukte. Überschussenergie wird in Form von kinetischer Energie davongetragen. Für einen α -Zerfall muss somit gelten

$$M(A, Z) > M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2). \quad (8.86)$$

Grundlegende Kerneigenschaften

Umgekehrt ist ein Kern absolut stabil wenn seine Masse geringer ist als die Summe der Massen von allen möglichen Zerfallsprodukten, i.e.

$$M(A, Z) < \sum_i M_i , \quad (8.87)$$

mit M_i der Masse eines Zerfallsproduktes.

Die Zeit für die ein instabiler Kern existiert bevor er zerfällt kann enorm variieren, von geologischen Zeiten bis Zeiten so kurz wie 10^{-23} s und hängt von den Energien und der Natur des Zerfallprozesses ab. Häufig existieren instabile Kerne für eine relativ lange Zeit und werden daher **metastabil** genannt. Ein stabiler Kern hat selbstverständlich eine unendliche Lebensdauer.

Es besteht ein interessanter Zusammenhang zwischen der Anzahl an Protonen und Neutronen eines Kerns und dessen Stabilität. In der folgenden Tabelle ist die Anzahl stabiler Kerne gegenübergestellt ob deren Z und N gerade (g) oder ungerade (u) sind:

A	Z	N	Anzahl stabiler Kerne
g	g	g	165
u	u	g	50
u	g	u	55
g	u	u	4

Tabelle 8.1: Die Anzahl stabiler Kerne nach (un-)gerader Anzahl an Protonen und Neutronen geordnet.

Obige Verteilung zeigt, dass Stabilität eng damit zusammenhängt ob die Protonen- und Neutronenanzahl gerade ist und weist darauf hin, dass die Kernkraft besonders effektiv ist, wenn Neutronen und Protonen gepaart sind. Die Ähnlichkeit in der Anzahl stabiler ug- und gu-Kerne legt nahe, dass Neutronen und Protonen sich sehr ähnlich bzgl. der Kernkraft verhalten. Letztlich ist auch der Mangel stabiler uu-Kerne bemerkenswert, welche nur bei sehr leichten Kernen ^2_1H , ^6_3Li , $^{10}_5\text{B}$ und $^{14}_7\text{N}$ vorkommen.

Typischerweise findet γ -Zerfall bei angeregten Kernen statt und die Zerfälle 1, 2, 4 bis 6 bei instabilen Kernen im Grundzustand. Letztere Zerfälle können auch bei angeregten Zuständen eintreten, aber nur in speziellen Situationen. Bei angeregten Kernen kann auch ein Elektron aus der Hülle emittiert werden und bei hohen Anregungsenergien kann Zerfall 7 energetisch erlaubt sein und mit dem γ -Zerfall konkurrieren. Die Abbildung 8.10 heißt **Nuklidkarte nach E. Segré** und zeigt die Verteilung stabiler Kerne als Verteilung von Z über N sowie die bekannten instabilen Kerne. Der Großteil der instabilen Kerne wird künstlich im Labor hergestellt und nur wenige existieren in signifikanten Mengen. Die stabilen Kerne in Schwarz liegen auf der **β -Stabilitätslinie**. Die Kerne rechts darunter haben einen Überschuss an Neutronen und sind instabil gegenüber dem β^- -Zerfall. Umgekehrt haben die Kerne links darüber einen Protonenüberschuss und neigen zum β^+ -Zerfall. Je größer der Abstand zur β -Stabilitätslinie, desto instabiler wird der Kern.

Leichte Kerne haben ungefähr die gleiche Anzahl an Protonen und Neutronen, $Z \simeq N$. Bei schweren Kernen gibt es mehr Neutronen als Protonen. Dieser Effekt ist ausgeprägter für schwerere Kerne und stammt von der Coulomb-Abstößung der Protonen, welche der anziehenden Kernkraft entgegen wirkt, die für die Kernstabilität verantwortlich ist. Deshalb

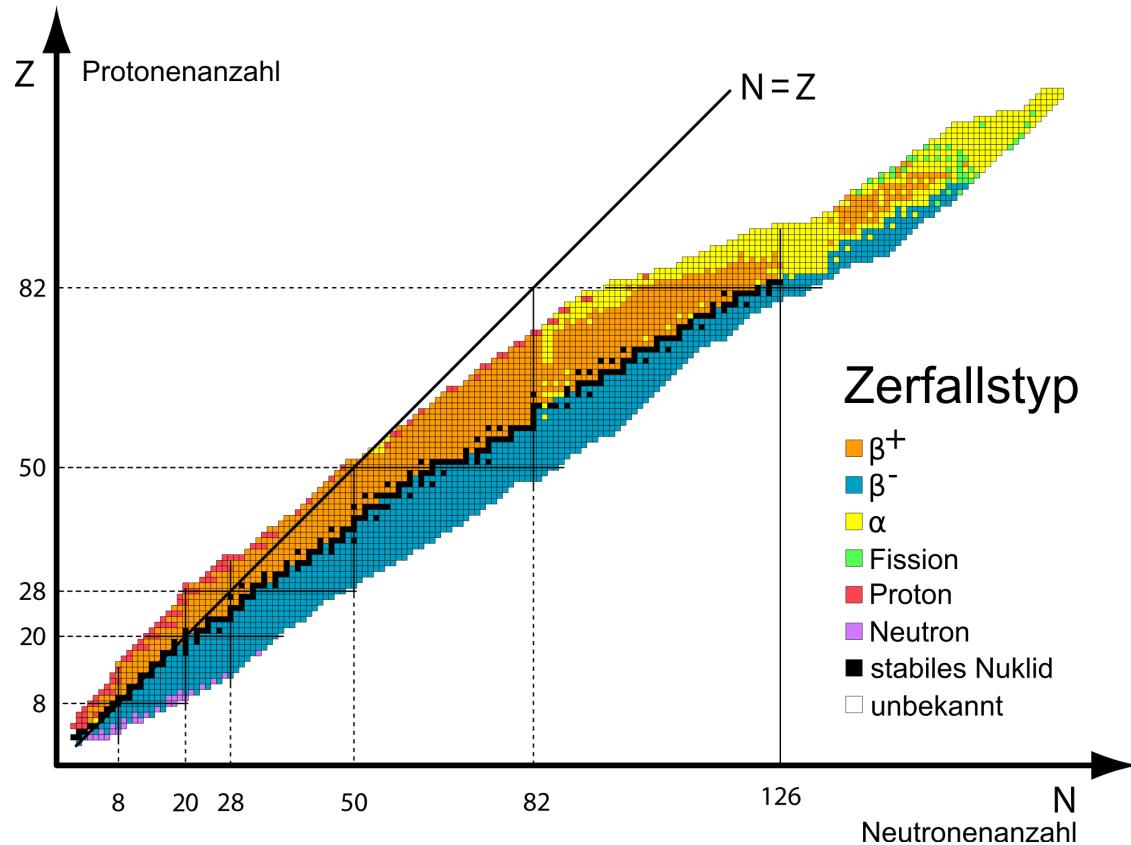


Abbildung 8.10: Die Nuklidkarte nach E. Segré zeigt die Verteilung stabiler Kerne als Verteilung von Z über N sowie die bekannten instabilen Kerne.

wird es energetisch günstiger wenn verhältnismäßig weniger Protonen im stabilen Kern sind. Viele dieser phänomenologisch beobachteten Eigenschaften können durch Kernmodelle erklärt werden.

In Abbildung 8.11 ist die Bindungsenergie der Kerne in Abhängigkeit von Z und N abgebildet. In dieser Darstellung sind nur die über die Oberfläche herausragenden Kerne stabil. Die Stabilitätsinsel bei $N \approx 190$ ist spekulativ und enthält die superschweren Kerne. In Abbildung 8.12 ist noch ein Ausschnitt aus der **Karlsruher Nuklidkarte** wiedergegeben. Diese weitverbreitete Nuklidkarte in Segré-Anordnung enthält umfassende Informationen zu den bekannten Kernen. Stabile Kerne sind schwarz gekennzeichnet. Für stabile Isotope ist die Elementhäufigkeit, für instabile die Halbwertszeit unter dem Elementsymbol angegeben. Weiters sind Einfangquerschnitte für thermische Neutronen σ und einige wichtige Zerfallsenergien verzeichnet, γ -Energien sind in keV, andere Zerfallsenergien in MeV eingetragen.

Grundlegende Kerneigenschaften

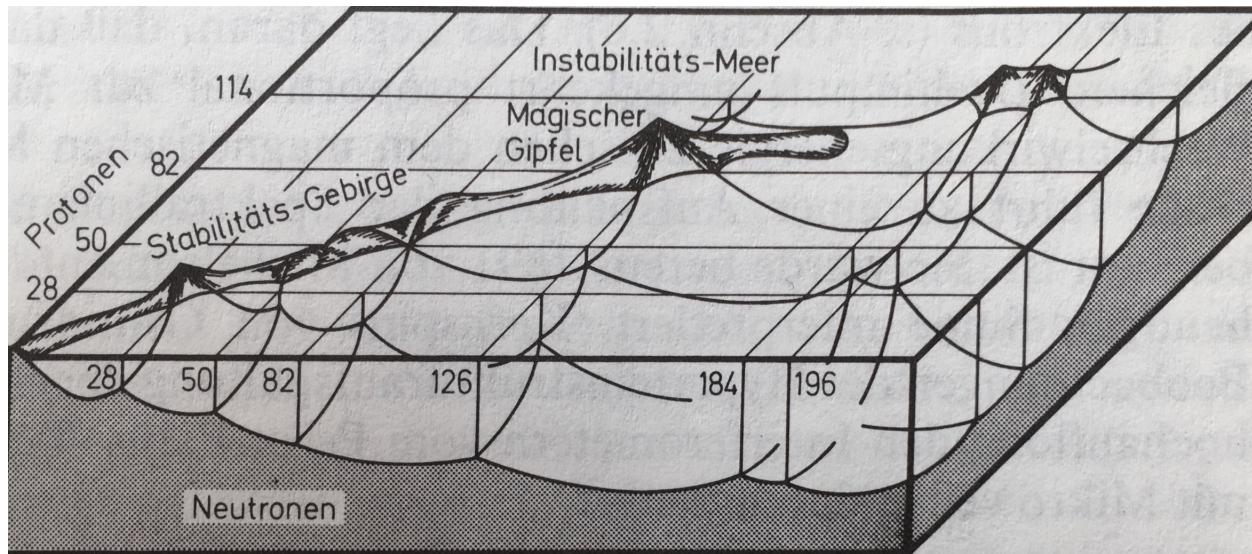


Abbildung 8.11: Bindungsenergien der Kerne in Abhängigkeit von Z und N . In dieser Darstellung sind nur die über die Oberfläche herausragenden Kerne stabil. Die Stabilitätsinsel bei $N \approx 190$ enthält die superschweren Kerne (Quelle [MK13b]).

		Pu	Pu 228 ?	Pu 229 ?	Pu 230 ?	Pu 231 8.6 m	Pu 232 8.6 m	Pu 233 20.9 m	Pu 234 8.8 h	Pu 235 25.3 m	Pu 236 2,858 a	Pu 237 45.2 a	Pu 238 87,74 a	Pu 239 2,411- 10^4 a	Pu 240 6563 a	Pu 241 14,35 a		
94																		
93	Np	Np 225 ?	Np 226 31 ms	Np 227 0,51 s	Np 228 61,4 s	Np 229 4,0 m	Np 230 4,6 m	Np 231 48,8 m	Np 232 14,7 m	Np 233 36,2 m	Np 234 4,4 d	Np 235 39,1 d	Np 236 22,8 d	Np 237 154- 10^4 a	Np 238 2,144- 10^6 a	Np 239 2,355 d	Np 240 7,22 m	
	U 222 1 μ s	U 223 18 μ s	U 224 0,7 ms	U 225 95 ms	U 226 0,2 s	U 227 9,1 m	U 228 58 m	U 229 20,8 d	U 230 4,2 d	U 231 68,9 a	U 232 1,592- 10^4 a	U 233 2,455- 10^4 a	U 234 26- 10^4 a	U 235 7,538- 10^4 a	U 236 128 m	U 237 2,342- 10^4 a	U 238 99,2745	U 239 23,5 m
	Pa 221 5,9 μ s	Pa 222 4,3 ms	Pa 223 6,5 ms	Pa 224 0,95 s	Pa 225 1,8 s	Pa 226 1,6 m	Pa 227 38,3 m	Pa 228 22 h	Pa 229 1,50 d	Pa 230 68,9 a	Pa 231 1,31 d	Pa 232 2,455- 10^4 a	Pa 233 26- 10^4 a	Pa 234 7,538- 10^4 a	Pa 235 128 m	Pa 236 2,342- 10^4 a	Pa 237 99,2745	Pa 238 2,3 m
	Th 220 9,7 μ s	Th 221 1,68 ms	Th 222 2,2 ms	Th 223 0,66 s	Th 224 1,04 s	Th 225 8,72 m	Th 226 31 m	Th 227 17,4 d	Th 228 1,50 d	Th 229 1,592- 10^4 a	Th 230 1,31 d	Th 231 2,455- 10^4 a	Th 232 26- 10^4 a	Th 233 7,538- 10^4 a	Th 234 128 m	Th 235 2,342- 10^4 a	Th 236 99,2745	Th 237 2,3 m
130	132	134	136	138	140	142	144											

Abbildung 8.12: Ein Ausschnitt aus der Karlsruher Nuklidkarte.

9

Isospin und Kernkräfte

TBD

10

Kernmodelle

Wie im letzten Kapitel dargelegt sind die Kernkräfte äußerst kompliziert. Eine Lösung des Problems der Kernbeschreibung mittels A Nukleonen welche durch die Kernkräfte wechselwirken ist somit praktisch aussichtslos. Es handelt sich im ein Vielkörperproblem mit komplizierter Wechselwirkung. Gleichzeitig ist A zu gering um statistische Methoden anzuwenden.

Somit versucht man stattdessen Kerneigenschaften mit Kernmodellen zu erhalten. Diese Modelle sollen einfach genug sein um Berechnungen möglich zu machen aber auch physikalisch realistisch genug, damit diese Berechnungen dem tatsächlichen Kernverhalten möglichst nahe kommen. Verschiedene Modelle konzentrieren sich auf verschiedene Aspekte des Kernverhaltens (Energie des Grundzustandes und angeregter Zustände, elektromagnetische Eigenschaften, Kernreaktionen bei unterschiedlichen Energien, usw.) und auf verschiedene Gruppen von Kernen.

Im Großen und Ganzen fallen diese Modelle in eine von zwei Klassen. In der ersten Klasse nimmt man an, dass die Nukleonen stark im Kern wechselwirken und ihre mittlere freie Weglänge klein ist. Das ist ähnlich der Situation von Molekülen einer Flüssigkeit und das zu besprechende Tröpfchenmodell gehört in diese Klasse. Diese Modelle nennt man **kollektive Modelle** und mit ihnen studiert man Phänomene die den ganzen Kern umfassen.

Unabhängig davon existiert eine Klasse von **Modellen unabhängiger Teilchen**, welche annehmen, dass das Pauli-Prinzip die Kollisionen der Nukleonen im Kern einschränkt, was zu einer größeren mittleren freien Weglänge führt. Die verschiedenen Schalenmodelle fallen in diese Klasse.

Mittlerweile wissen wir, dass Kerne das Verhalten beider Klassen zeigen und dass jedes Modell nützlich ist für die Erklärung einer spezifischen Gruppe von Kerneigenschaften. Wir betrachten im Folgenden die grundlegenden Modelle, welche zum Verständnis der Kernenergieniveaus (Energien, Spins und Paritäten) sowie deren elektromagnetischer Eigenschaften (magnetischer Dipol- und elektrischer Quadrupolmomente) beitragen.

10.1 Das Tröpfchenmodell

Experimente (Streuung, Quadrupolmoment, usw.) zeigen, dass Kerne ungefähr sphärisch sind mit einem Volumen direkt proportional zu A , sodass ein Kern einem Tropfen inkompressibler Flüssigkeit von sehr hoher Dichte ($\sim 10^{17} \text{ kg m}^{-3}$) analog ist.

10.1.1 Semi-Empirische Massenformel

Hier leiten wir eine Gleichung für die Masse eines beliebigen Atoms als Funktion von A und Z her. Diese Gleichung gestattet uns die Stabilität eines Kerns vorherzusagen gegenüber Teilchenemission sowie der Energiefreisetzung und Stabilität von Kernen bei der Fission.

Der erste Term besteht aus der Summe der Massen seiner Konstituenten

$$M_0 = Zm_p + (A - Z)m_n + Zm_e . \quad (10.1)$$

Die erste Korrektur ist die „**Kondensationswärme**“ aufgrund der kurzreichweiten Kernkräfte. Wir haben ja bereits bemerkt, dass die Bindungsenergie pro Nukleon für nicht sehr kleine A ungefähr bei 8 MeV liegt. Somit erwarten wir hier eine Korrektur von der Größenordnung 10 MeV

$$M_1 = -a_V A . \quad (10.2)$$

Indem wir dieselbe Energie für die Anziehung allen Nukleonen zugeordnet haben, haben wir tatsächlich überkorrigiert da die Kerne an der Kernoberfläche nur von einer Seite Anziehung erfahren. Wir führen deshalb als weitere Korrektur zur großen Korrektur M_1 eine „**Oberflächenspannung**“ ein, die proportional zur Oberfläche ist

$$M_2 = a_S A^{2/3} . \quad (10.3)$$

Als nächstes bemerken wir, dass stabile Kerne dazu tendieren sich aus $N - P$ Paaren zusammenzusetzen. Wir addieren eine positive Massenkorrektur für die Anzahl von **ungepaarten Nukleonen**

$$M_3 = a_A \frac{(A/2 - Z)^2}{A} . \quad (10.4)$$

Diese Form ist in *Appendix D.3* hergeleitet, basierend auf dem Fermigasmodell und spielt in der folgenden Diskussion noch eine große Rolle.

Als nächstes addieren wir einen positiven Term für die **elektrostatische Abstoßung**. Die potentielle Energie einer homogen geladenen Kugel ist (siehe *Appendix B.4*)

$$U = \frac{3}{5} \frac{(Ze)^2}{R} . \quad (10.5)$$

Da $R \approx r_0 A^{1/3}$ erhalten wir somit eine Korrektur der Form

$$M_4 = a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} . \quad (10.6)$$

Die letzte Korrektur bezeichnen wir mit $\delta(A, Z)$. Sie hängt von der Stabilität der Kerne ab und zwar ob Z und N gerade oder ungerade ist. Sie berücksichtigt, dass gepaarte Protonen und Neutronen stärker gebunden sind als ungepaarte, was sich an der Anzahl stabiler gg-, gu-, ug- und uu-Kerne zeigt (siehe Tabelle 8.1). Dies kann man mittels des Schalenmodells verstehen und ist auch im Fermigas-Modell ersichtlich, da die Zustände für Protonen und Neutronen wegen der Spinorientierung ungefähr zweifach entartet sind. Die übrigen Massenterme M_0

bis M_4 ändern sich kontinuierlich mit variierendem Z oder N . $\delta(A, Z)$ korrigiert das und berücksichtigt das Paarungsverhalten. Die genaue Form ist bis zu einem gewissen Grad eine Wahl. Wir nehmen an¹

$$\delta(A, Z) = \begin{cases} -a_P A^{-1/2}, & \text{gg-Kerne ,} \\ 0, & \text{für gu- \& ug-Kerne ,} \\ +a_P A^{-1/2}, & \text{uu-Kerne .} \end{cases} \quad (10.7)$$

Fasst man alle Terme zusammen erhält man die sogenannte **Bethe-Weizsäcker Formel**

$$M(A, Z) = Zm_p + (A - Z)m_n + Zm_e - a_V A + a_S A^{2/3} + a_A \frac{(A/2 - Z)^2}{A} + a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \delta(A, Z). \quad (10.8)$$

Die Parameter dieser Gleichung fitted man nun an experimentelle Daten. Gute Übereinstimmung ergeben die Werte

	MeV/c ²
a_V	15.85
a_S	18.34
a_A	92.86
a_C	0.71
a_P	11.46

Die Gleichung beschreibt die Atommassen und somit Kernmassen sehr gut für $A > 15$. Für die (totale) **Bindungsenergie** eines Kerns Gleichung (8.11) erhalten wir somit aus der Bethe-Weizsäcker Formel²

$$B(A, Z) = \left(a_V A - a_S A^{2/3} - a_A \frac{(A/2 - Z)^2}{A} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - \delta(A, Z) \right) c^2. \quad (10.9)$$

Pro Nukleon erhalten wir somit aus der Bethe-Weizsäckergleichung

$$\frac{B(A, Z)}{A} = \left(a_V - a_S A^{-1/3} - a_A \frac{(A/2 - Z)^2}{A^2} - a_C \frac{Z^2}{A^{4/3}} - \frac{\delta(A, Z)}{A} \right) c^2. \quad (10.10)$$

In Abbildung 10.1 sind die einzelnen Beiträge abgebildet und Abbildung 10.2 zeigt einen Vergleich zwischen der Bethe-Weizsäckerformel und experimentellen Werten für ug-Kerne.

10.1.2 Isobares Verhalten

Isobare für ungerades A sind in Abbildung 10.3.a abgebildet und jene für gerades A in 10.3.b. Die Form ist eine Parabel, da die Bethe-Weizsäcker Formel quadratisch in Z ist. Die Minima

¹Eine häufig verwendete Form, die auf *Enrico Fermi* zurück geht, ist proportional $A^{-3/4}$ anstatt $A^{-1/2}$.

²Hierbei wurde, wie üblich, die Bindungsenergie der Elektronen vernachlässigt.

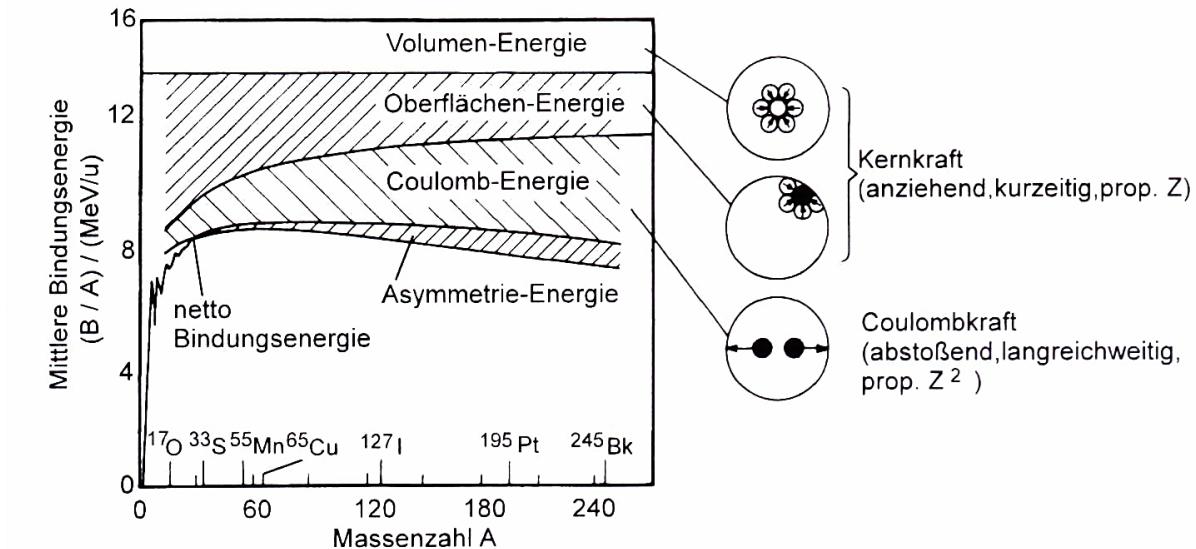


Abbildung 10.1: Beitrag der einzelnen Terme der Massenformel zur mittleren Bindungsenergie pro Nukleon (Quelle [MK13b]).

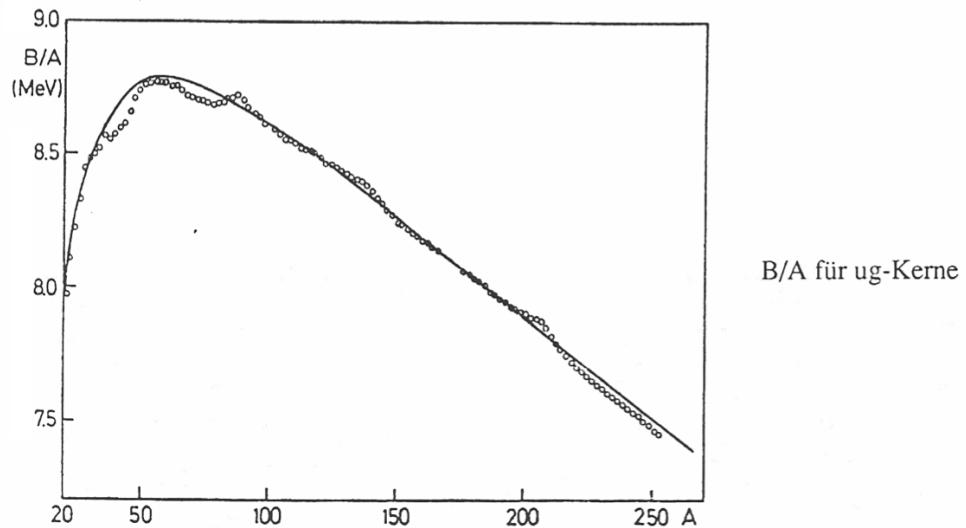


Abbildung 10.2: Die Bindungsenergie pro Nukleon B/A als Funktion der Nukleonenzahl A . Der Vergleich zwischen der halbempirischen Bindungsenergieformel oder Weizsäckerformel (Linie) mit den experimentellen Werten (offene Kreise) zeigt eine Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment in der Größenordnung von 100 keV (Quelle: Gernot Eder: *Kernmaterie - Grundlagen und Probleme der Kernphysik*. Spektrum Akademischer Verlag, 1995).

müssen nicht auf einem ganzzahligen Z liegen und ergeben sich aus

$$\left. \frac{\partial M(A, Z)}{\partial Z} \right|_{A=konst} = 0 , \quad (10.11)$$

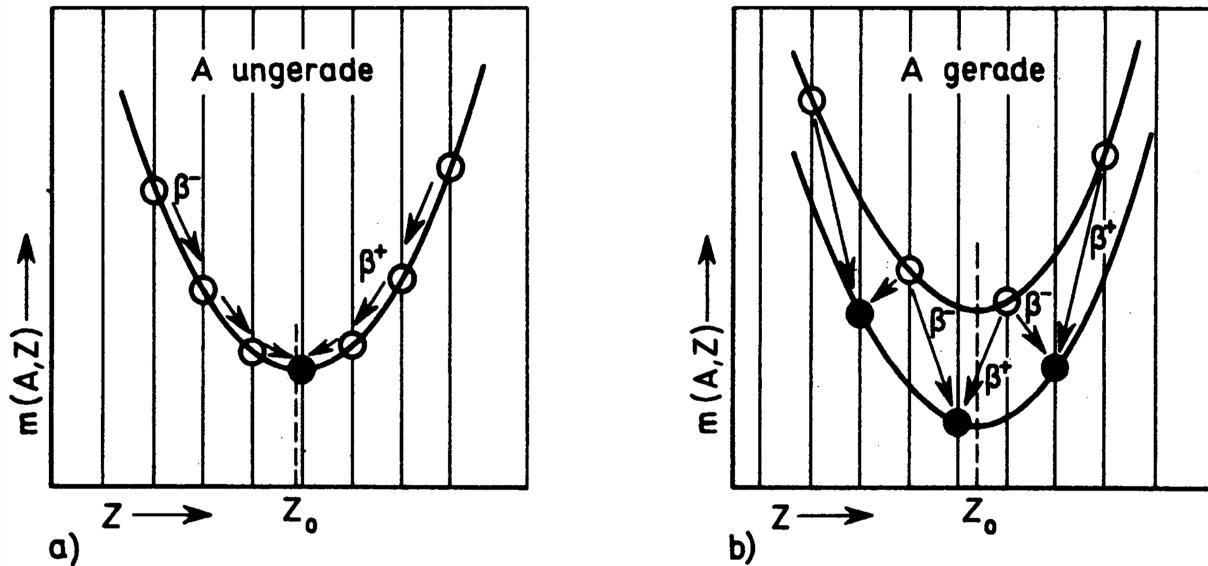


Abbildung 10.3: Energieverhältnisse bei Kernen mit gleichem A . Stabile Kerne sind durch gefüllte Kreise markiert (Quelle [MK13b]).

zu³

$$Z_0 = \frac{A}{2} \left(\frac{m_n - m_p - m_e + a_A}{a_C A^{2/3} + a_A} \right) = \frac{A}{1.98 + 0.015 A^{2/3}}. \quad (10.12)$$

Das zeigt, dass A/Z_0 bei 2 beginnt und anwächst aufgrund des $A^{2/3}$ Terms, der von der Coulombabstößung M_4 herrührt. Gleichung (10.12) sagt in der Tat die stabilen Elemente von 1 bis 92 voraus. In Abbildung 10.4 ist die Lage der stabilen Kerne in der $N - Z$ -Ebene wiedergeben. In Abbildung 10.3.b unterscheiden sich die beiden Parabeln um $2\delta(A, Z)$. Die Punkte markieren mögliche Kerne. Im Allgemeinen existiert nur ein **stabiler** Kern für ungerades A , während für gerades A zwei oder sogar drei stabile Kerne existieren können. In den Abbildungen sind stabile Kerne durch gefüllte Kreise markiert. Die instabilen Kerne können durch β^+ - oder β^- -Zerfall wie in den Abbildungen eingezeichnet zerfallen. Die Weite der Parabeln nimmt mit A zu wie man aus der Bethe-Weizsäcker Formel ablesen kann.

Wie aus Tabelle 8.1 ersichtlich, existieren nur 4 stabile uu-Kerne. Diese liegen auf der oberen Parabel in Abbildung 10.3.b. Für diese 4 Kerne ist A so klein ($A \leq 14$) und somit die Parabel so schmal, dass ihre Masse unter denjenigen der benachbarten gg-Isobare auf der unteren Parabel liegt. Wie später in Kapitel 11 gezeigt wird, sind die Lebensdauern beim β -Zerfall größer, wenn die β Energien sinken. Mit dieser Information sieht man tatsächliche Übereinstimmung bei den folgenden Zerfallsreihen:

- Die β^- -Zerfallsreihe, welche durch die Kernspaltung von $^{239}_{92}\text{U}$ entsteht ($A = 139$ ungerade)



zeigt stetig anwachsende Lebensdauern.

³Hierbei verwenden wir $\frac{\partial \delta(A, Z)}{\partial Z} = 0$.

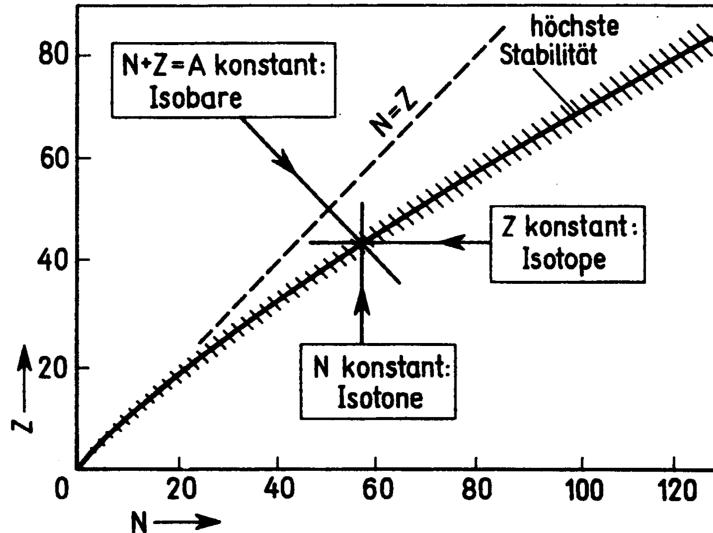
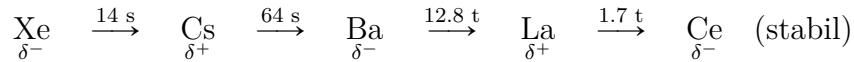


Abbildung 10.4: Lage der stabilen Kerne in der $N - Z$ -Ebene (Quelle [MK13b]).

- Die folgende Zerfallsreihe zeigt alternierende Lebensdauern ($A = 140$ gerade)



Jeder zweite Übergang ist von einer δ^+ Kurve (obere Parabel in Abbildung 10.3.b) zu einer δ^- Kurve (untere Parabel in derselben Abbildung).

10.1.3 α -Zerfall und Kernspaltung

Mit der Bethe-Weizsäcker Formel kann man die Bindungsenergie eines Neutrons im Kern ermitteln

$$B(1, 0) = (M(A - 1, Z) + 1.00866 - M(A, Z)) c^2, \quad (10.13)$$

welche sich als positiv herausstellt für die stabilen Elemente. Das zeigt, dass diese nicht dazu tendieren Neutronen spontan zu emittieren. Allerdings wird

$$B(4, 2) = (M(A - 4, Z - 2) + 4.00260 - M(A, Z)) c^2, \quad (10.14)$$

negativ in der Mitte des Periodensystems, noch lange bevor die „natürlichen α -Emmitter“ $A \gtrsim 150$ erreicht werden. Die dazwischen liegenden Elemente sind nur deshalb gegen α -Zerfall stabil, weil die entsprechenden α -Energien so klein sind, dass die Lebensdauern verboten lang sind.

Bei der Kernspaltung zerfällt der Kern in zwei Teile ungefähr gleicher Größe. Das ist möglich wenn

$$B(A, Z) = (2M(A/2, Z/2) - M(A, Z)) c^2, \quad (10.15)$$

negativ wird, was bei $A \gtrsim 90$ der Fall ist.

Das Periodensystem endet im Bereich $Z = 90 - 100$ da $B(A, Z)$ für α -Zerfall und Kernspaltung zunehmend negativer werden.

10.1.4 Periodische Schalenstruktur

Zusätzlich zum allgemeinen Verhalten wie es vom Tröpfchenmodell vorhergesagt wird, zeigen Kerne periodische Variationen in der Bindungsenergie, welche nicht von der Bethe-Weizsäcker Formel vorhergesagt werden. Diese Variationen haben nichts mit der Periodizität der atomaren (chemischen) Eigenschaften zu tun. Die leichteren Kerne haben Maxima der Bindungsenergie bei $A = 4, 8, 12, 16, \dots$ was auf eine Sättigung bei Subeinheiten von $2N + 2P$ hinweist. Darüber hinaus wird auch eine größere Schalenstruktur beobachtet. Das kann nur von Modellen erklärt werden, welche den Kern als Quantensystem beschreiben.

Andere Eigenschaften, außer Bindungsenergie und Stabilität, nämlich Spin, Parität, elektromagnetische Eigenschaften und Energieniveaus können mit dem Tröpfchenmodell nicht untersucht werden.

10.2 Das Fermigasmodell

Dieses Modell basiert darauf, dass Nukleonen sich innerhalb des Kerns beinahe frei bewegen aufgrund des Pauli-Prinzips. Das liegt daran, dass zwei Nukleonen nicht aneinander streuen können, denn alle Endzustände in welche die Streuung führen würde, sind bereits besetzt.⁴ Nähert sich ein Nukleon der Kernoberfläche und versucht den Kern zu verlassen, spürt es die starke Anziehung der anderen Nukleonen, welche es zur Rückkehr ins Kerninnere zwingen. Im Kerninneren spürt es die Anziehung aller umgebenden Nukleonen, deren aufsummierte Kraft näherungsweise verschwindet. Man kann sich den Kern wie einen Ballon vorstellen, in dessen Inneren sich die Nukleonen frei bewegen, jedoch Zustände unterschiedlicher Energie besetzen. Da das Kernvolumen sehr klein ist, haben die Energieniveaus große Abstände (wie unten erläutert wird). Solange keine sehr hohen Anregungen angenommen werden, werden die Nukleonen die Zustände mit den geringsten verfügbaren Energien besetzen.

Die Nukleonen im Fermigasmodell gehorchen der freien Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m_N} \Delta\varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (10.16)$$

mit der Nukleonenmasse m_N und Nukleonenenergie E . Zur Vereinfachung nehmen wir für die Form des Kerns einen Würfel an, anstatt einer Kugel. Das wird unser Endresultat nicht ändern. Somit ergeben sich die Randbedingungen

$$\varphi(x, y, z) = 0,$$

für x, y oder $z = 0$ und x, y oder $z = L$, wobei L die Seitenlänge des Würfels ist. Die normierten Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung die diese Randbedingungen erfüllen sind

$$\varphi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right),$$

(10.17)

⁴Das gilt für Kerne im Grundzustand. Für angeregte Kerne werden zunehmend Endzustände, in welche die Streuung führen kann vorhanden und die Annahme von frei beweglichen Nukleonen im Kern verliert an Gültigkeit.

mit den positive ganze Zahlen n_x, n_y, n_z .⁵ Die entsprechenden erlaubten Energiewerte sind offensichtlich

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_N L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_N L^2} n^2, \quad (10.18)$$

bzw.

$$E = \frac{1}{2m_N} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{p^2}{2m_N}, \quad (10.19)$$

wobei $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. Wir sehen, dass jedes Energieniveau n im Allgemeinen von mehreren Sätzen der Werte (n_x, n_y, n_z) erhalten wird und somit entartet ist.

Da Nukleonen Spin 1/2 haben müssen wir noch mit der Spinfunktion $\chi(\sigma)$ multiplizieren und erhalten

$$\psi_{n_x n_y n_z \sigma}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L} z\right) \chi(\sigma), \quad (10.20)$$

wobei $\sigma = \pm 1/2$. Jeder Zustand (n_x, n_y, n_z) kann somit 4 Mal besetzt werden: von einem Proton mit $\sigma = 1/2$, einem Proton mit $\sigma = -1/2$, einem Neutron mit $\sigma = 1/2$ und einem Neutron mit $\sigma = -1/2$. Die Entartung für das Energieniveau n wird somit vierfach erhöht. Um nun die Anzahl ebener Wellen welche Energien zwischen E und $E + dE$ haben, für ein Teilchen das sich irgendwo im Volumen $V = L^3$ aufhält, zu ermitteln gehen wir wie folgt vor. Die Anzahl an Zuständen $N(p)$ für Impulsbeiträge kleiner p entspricht der Anzahl an diskreten Werten (p_x, p_y, p_z) für die $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 < p^2$ bzw. $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 < \frac{p^2 L^2}{\hbar^2 \pi^2}$ gilt. Die Anzahl an Sätzen (n_x, n_y, n_z) , welche obige Bedingung erfüllen ist $1/8$ der Anzahl von Punkten eines kubischen Gitters welches von einer Kugel mit Radius $\frac{pL}{\hbar\pi}$ eingeschlossen wird (siehe Abbildung 10.5).⁶ Für recht grosse Werte von (n_x, n_y, n_z) ist die Gesamtanzahl an Zuständen gleich dem Volumen eines Oktanten einer Kugel mit Radius n im n -Raum

$$N(p) = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} n^3 = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{pL}{\hbar\pi}\right)^3. \quad (10.21)$$

Sind nun die untersten Zustände mit Protonen besetzt haben wir $Z = 2N(p_F^p)$, wobei p_F^p der höchste besetzte Impulsbetrag der Protonen ist und der Faktor 2 von den zwei Spinwerten des Protons herrührt. Wir haben somit

$$p_F^p = (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{Z}{V}\right)^{1/3}. \quad (10.22)$$

Analog gilt für Neutronen

$$p_F^n = (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{A-Z}{V}\right)^{1/3}. \quad (10.23)$$

⁵Negative n_x, n_y, n_z ergeben keine neuen unabhängigen Lösungen, denn $\int \varphi_{-n_x, n_y, n_z}^*(\mathbf{r}) \varphi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) dV \neq 0$ (und analog für n_y und n_z). Somit dürfen keinesfalls negative n_x, n_y, n_z bei der Zählung der Zustände verwendet werden. Verwendung negativer n_x, n_y, n_z bei der Zählung würde falsche physikalische Resultate liefern.

⁶Der Faktor $1/8$ röhrt daher, dass wir nur $n_x, n_y, n_z > 0$ betrachten dürfen.

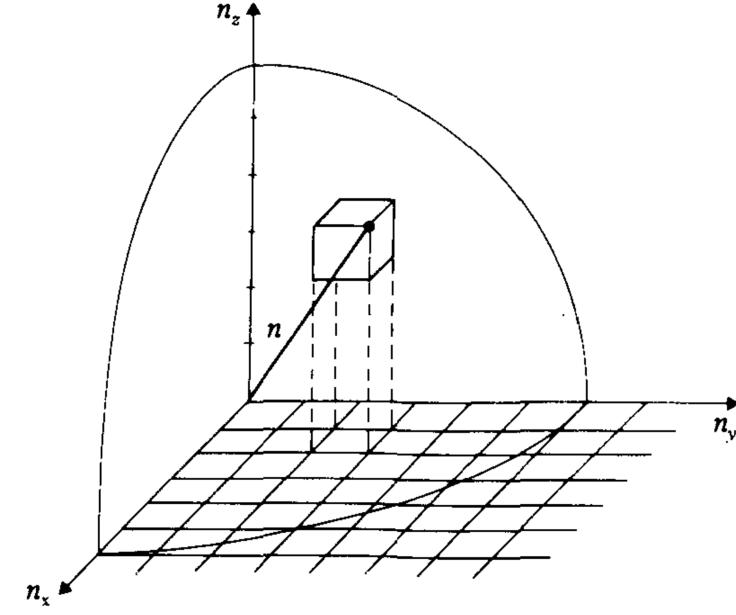


Abbildung 10.5: Der dreidimensionale n -Raum. Jedem Zustand (n_x, n_y, n_z) ist ein Würfel mit Einheitsvolumen zugeordnet. Für recht grosse Werte von (n_x, n_y, n_z) ist die Gesamtanzahl an Zuständen innerhalb $n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^{1/2}$ gleich dem Volumen eines Oktanten einer Kugel mit Radius n im n -Raum (Quelle [BJP03]).

Allgemein nennt man p_F den **Fermi-Impuls**. In einer groben Näherung gilt $Z = N = A/2$. Verwenden wir weiters für das Volumen $V = \frac{4\pi}{3} R_s^3$ den Radius aus Gleichung (8.7) erhalten wir

$$p_F = (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{\frac{A}{2}}{\frac{4\pi}{3} (1.128 A^{1/3})^3} \right)^{1/3}. \quad (10.24)$$

Wir bemerken, dass unter den gemachten Näherungen der Fermi-Impuls eine Konstante ist, welche unabhängig von A und somit für alle Kerne gleich ist. Die entsprechende kinetische Energie nennt man **Fermi-Energie**

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_N} \approx 38 \text{ MeV}. \quad (10.25)$$

Sie ist in unserer groben Näherung ebenfalls unabhängig von A . E_F ist die kinetische Energie des höchsten besetzten Neutron Zustandes. Die Energie wird vom Boden des Potentials gemessen. Weiters wissen wir bereits, dass die Bindungsenergie pro Nukleon ungefähr 8 MeV beträgt. Somit ist E_F ungefähr 8 MeV unter der Nullpunktsenergie. Das fixiert die Tiefe des Potentials für Neutronen. Tatsächlich sind weniger Protonen als Neutronen im Kern, aber das höchste Protonniveau muss ebenfalls Energie E_F haben, andernfalls käme es zum β -Zerfall. Deshalb ist die Tiefe des Potentials für Protonen etwas geringer als für Neutronen in diesem Modell. Weiters wirkt das Coulomb-Potential auf Protonen (siehe Abbildung 10.6).

Diese Betrachtungen gelten für Kerne im Grundzustand bei Temperatur $T = 0$. Man nennt das Fermigas dann **vollständig entartet**.

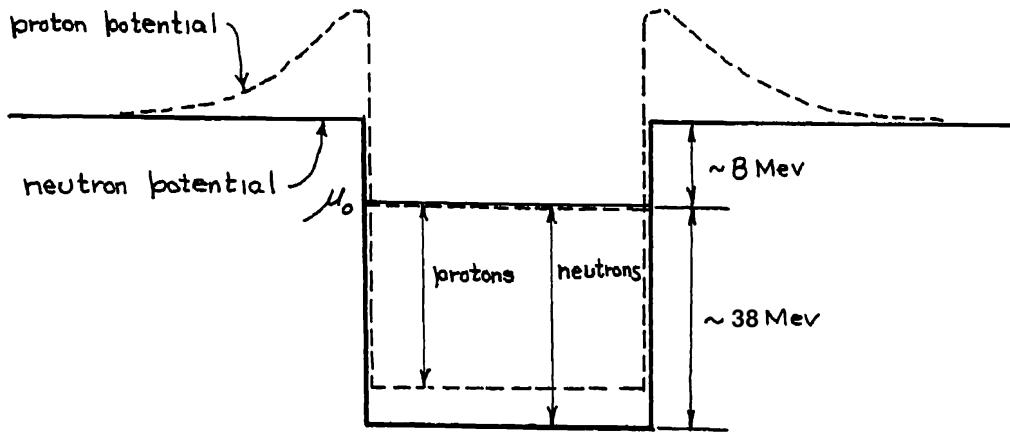


Abbildung 10.6: Das Potential für das Fermigasmodell (Quelle nach [Fer50]).

Um die Zustandsdichte eines Nukleons (Neutron oder Proton) bezüglich der Energie, $\frac{dN_N(E)}{dE}$, zu erhalten multiplizieren wir Gleichung (10.21) mit einem Faktor 2 (für die zwei Spinzustände eines Nukleons) und verwenden die Beziehung $E = \frac{p^2}{2m_N}$

$$N_N(E) = 2N(E) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_N}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{3/2} V, \quad (10.26)$$

bzw. für das Differential

$$\frac{dN_N(E)}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_N}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} V. \quad (10.27)$$

Diese Verteilung nennt man **Fermi-Verteilung** für $T = 0$. Für sie gilt, dass keine Teilchen für $E > E_F$ vorhanden sind, was dem Grundzustand des Kerns entspricht. Ein angeregter Zustand ($T > 0$) kann erreicht werden, wenn ein Nukleon einen Zustand über dem Fermiplateau E_F annimmt und ein Loch im Zustand den es zuvor hatte, zurücklässt.

In Abbildung 10.7 sind nochmals die Potentiale für Protonen und Neutronen wiedergegeben sowie die Zustandsdichte bezüglich der Energie. Letztere ist dafür verantwortlich, dass die Energiedifferenzen benachbarter Niveaus mit zunehmender Energie kleiner werden. Zwar wachsen die Energieniveaus mit n^2 , das wird jedoch durch die steigende Entartung wett gemacht. Durch die Coulombabstößung liegt das Protonpotential höher als das Neutronpotential. Zieht man das Coulombpotential vom Protonpotential ab, liegt das Protonpotential tiefer als das Neutronpotential. Ein Proton spürt also eine stärkere Anziehungskraft als ein Neutron. Die Neutron-Proton Wechselwirkung ist stärker als die Proton-Proton und die Neutron-Neutron Wechselwirkung. In einem Kern mit $N > Z$ wechselwirkt ein herausgegriffenes Proton mit mehr Neutronen als ein herausgegriffenes Neutron mit Protonen. Das Pauliprinzip schwächt die Wechselwirkung zwischen gleichen Teilchen, da es Zustände, deren Raum- und Spinanteil gleichzeitig symmetrisch oder antisymmetrisch sind, verbietet. Die Wechselwirkung zwischen Neutronen und Protonen ist jedoch in allen Zuständen erlaubt. Das erklärt qualitativ die größere Stärke des Neutron-Protonpotentials.

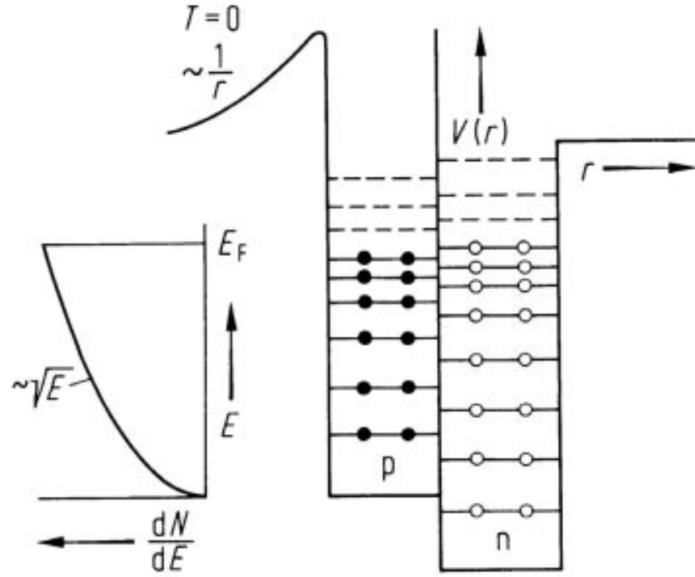


Abbildung 10.7: Zustandsdichte in einem Fermigas für $T = 0$ K und Potentialverlauf und Fermigas-Zustände für Protonen (p) und Neutronen (n) (schematisch) (Quelle nach [MK13b]).

Mit dem Fermigasmodell kann man die Massenkorrektur M_3 der Bethe-Weizsäcker Formel in Gleichung (10.4) für einen Überschuss an Neutronen herleiten. Das ist in Appendix D.3 ausgeführt.

Wir wollen auch noch anmerken, dass es neben der Fermi-Energie E_F und dem Fermi-Impuls p_F auch noch eine sogenannte **Fermi-Geschwindigkeit** v_F und **Fermi-Temperatur** T_F gibt, die folgendermaßen verknüpft sind

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{mv_F^2}{2} = k_B T_F , \quad (10.28)$$

wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist. Da das Fermimodell auch bei den Elektronen der Atomhülle (Thomas-Fermi) und der Festkörperphysik Anwendung findet bedeutet obige Masse m bei jeder Anwendung etwas anderes. In unserer Anwendung auf den Kern ist m die Nukleonemasse.

Abschließend bemerken wir noch, dass das Fermigasmodell Oberflächeneffekte wie die Kapillarität vernachlässigt, was eine schwerwiegende Unterlassung darstellt. Trotz seiner Einfachheit kann das Modell viele Kerneigenschaften erklären. In leichten Kernen ist $Z \sim N$, da dort die Energie am Geringsten ist. Für schwere Kerne wird wegen der Coulombkraft das Protonpotential flacher als für Neutronen. Deshalb wird die Protonenzahl geringer, wie es tatsächlich der Fall ist. Weiters erklärt es die große Anzahl von gg-Kernen im Gegensatz zur fast vollständigen Abwesenheit von uu-Kernen. Das liegt an Folgendem. In einem uu-Kern befindet sich auf dem höchsten Energieniveau jeweils ein einzelnes Proton und Neutron. Da die höchsten Niveaus für Proton und Neutron leicht unterschiedlich sind, wird das höherenergetische der Nukleonen mittels β -Zerfall in das Potential des niederenergetischen Nukleons wandern. Das ist energetisch günstiger und resultiert in einem gg-Kern. Man kann in diesem Modell auch die Ausstrahlung von Teilchen als einen Verdampfungsprozess beschreiben

sowie die Anregung eines Kerns, soweit es die Besetzung höherer Zustände betrifft, mittels der Zuordnung einer Temperatur für das Gas. Beides werden wir hier jedoch nicht weiter verfolgen.

10.3 Das Schalenmodell

Viele Eigenschaften der Kerne können mit dem Schalenmodell gut beschrieben werden. Dieses Modell beschreibt den Kern mittels Nukleon-Orbitalen analog der Beschreibung des Atoms mittels Elektron-Orbitalen. Bei dieser Beschreibung wird jedes Nukleon im Kern so angesehen, als bewege es sich im selbstkonsistenten Feld von allen anderen Nukleonen (da die Reichweite der Kernkräfte kurz ist, nimmt dieses Feld außerhalb des Volumens, das von der Kern-„Oberfläche“ begrenzt wird, rasch ab). Dementsprechend wird ein Zustand des ganzen Kerns durch die Angabe der Zustände der einzelnen Nukleonen beschrieben.

Das Bild von Nukleon-Orbitalen ist dann gültig wenn Kollisionen so selten stattfinden, dass sich ein Nukleon zumindest quer durch den Kern ohne Kollision bewegen kann. Zwei Überlegungen, welche dieses Bild stützen sind folgende. Wenn ein Nukleon ein anderes passiert, bewegt es sich durch einen Potentialwall. Wenn das Nukleon permanent andere dicht gepackte Nukleonen passiert, können die einzelnen Wälle so nah aneinander liegen, dass diese überlappen und ein annähernd gleichförmiges Potential formen. Zweitens haben wir bereits im Fermigasmodell gesehen, dass der Kern als ein entartetes System beschrieben werden kann, in welchem die niederen Energiezustände großteils gefüllt sind. Eine Kollision zweier Nukleonen kann nur stattfinden, wenn die Kollision die Nukleonen in leere Zustände überführt. Das Pauli-Verbot verhindert, dass zwei Nukleonen derselben Art denselben Zustand einnehmen. Würden die besetzten Zustände im Impulsraum eine Kugel vollständig auffüllen, könnten keinerlei Kollisionen stattfinden. Insofern die obigen zwei Überlegungen die wahre Situation tatsächlich wiedergeben, ist das Schalenmodell gerechtfertigt.

Das selbstkonsistente Feld ist kugelsymmetrisch, wobei das Symmetriezentrum natürlich der Massenmittelpunkt des Kernes ist.⁷ Wir gehen analog zum Fall der Mehrelektronenatome vor und schreiben den Hamilton-Operator für A Nukleonen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_N} \sum_{i=1}^A \Delta_i + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) . \quad (10.29)$$

Beschränken wir uns auf 2-Körper Wechselwirkungen (Nukleon-Nukleon Wechselwirkung) wird der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_N} \sum_{i=1}^A \Delta_i + \sum_{i < j=1}^A V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) . \quad (10.30)$$

⁷In diesem Zusammenhang tritt jedoch eine Komplikation auf, welche in *Appendix D.4* behandelt wird. Wir wollen sie an dieser Stelle nicht weiter verfolgen.

Wieder analog zum Mehrelektronenfall spalten wir den Operator auf in

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{i=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m_N} \Delta_i + V_i(r_i) \right), \\ \hat{V} &= \sum_{i < j=1}^A V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \sum_{i=1}^A V_i(r_i).\end{aligned}\tag{10.31}$$

Nun muss das Zentralpotential $V_i(r_i)$ so gewählt werden, dass \hat{V} nur eine kleine Störung darstellt. Im Anschluss vernachlässigen wir \hat{V} wieder und untersuchen nur noch \hat{H}_0 .

Die Form des Zentralpotentials ist vorerst unbekannt. Wir nehmen an, dass das Potential für alle Nukleonen gleich ist, d.h. $V_i(r) = V(r)$ und dass in der Kernmitte die Nukleonen von allen Seiten im Mittel die gleiche Kraft erfahren. Somit erwarten wir, dass das Potential in der Mitte flach ist. Wir können diese Vorstellung noch präzisieren, wenn wir beachten, dass der Potentialverlauf in der Umgebung des Kernmittelpunkts symmetrisch und stetig sein muss, damit sich vernünftige Lösungen ergeben. Das ist nur erfüllt für $(\frac{dV}{dr})_{r=0} = 0$. Weiters muss wegen des relativ scharf definierten Kernradius das Potential dort rasch gegen Null gehen.

Das kugelsymmetrische Rechteckpotential erfüllt diese Bedingungen, doch ist es für das Kernpotential sicher nur eine grobe Näherung. Es hat aber den Vorteil, dass sich dafür die Energiezustände mittels sphärischer Besselfunktionen leicht berechnen lassen (siehe *Appendix C.6*). Eine andere Potentialform, die unseren Forderungen entspricht, ist das Potential des harmonischen Oszillators

$$V(r) = -V_0 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right).\tag{10.32}$$

Da das Potential mit r stetig ansteigt, möchte man meinen, dass dies das Nukleopotential das am Kernrand schnell gegen Null geht, nur schlecht repräsentiert. Wenn wir jedoch nur die Bindungszustände betrachten, erwarten wir, dass der Verlauf ausserhalb des Kernradius nicht allzu relevant ist. Eigenzustände können mithilfe der zugeordneten Laguerre Polynome berechnet werden (siehe *Appendix C.7*).

Am Realistischsten wird eine Potentialform sein, die zwischen diesen beiden Fällen liegt. Ein Potentialverlauf, der dies erfüllt, ist das **Woods-Saxon-Potential**, das zudem die gemessene DichteVerteilung für die Nukleonen gut wiedergibt (siehe Kapitel 8.2). Es hat die Form⁸

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}.\tag{10.33}$$

Der Parameter a ist ein Maß für die Randunschärfe (siehe Abbildung 10.8 (a)).⁹ Das Woods-

⁸Tatsächlich verschwindet für das Woods-Saxon-Potential $(\frac{dV}{dr})_{r=0}$ nicht, diese Ableitung ist jedoch so klein, dass zumindest noch $(\frac{dV}{dr})_{r=0} \approx 0$ gilt.

⁹Wir bemerken, dass in Abbildung 10.8 (a) (aus [MK13b]) fälschlicherweise das Oszillator-Potential $V(r) = -V_0 \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right)$ eingezeichnet ist, während für Abbildung 10.8 (b) das Oszillator-Potential $V(r) = -V_0 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right)$ verwendet wurde.

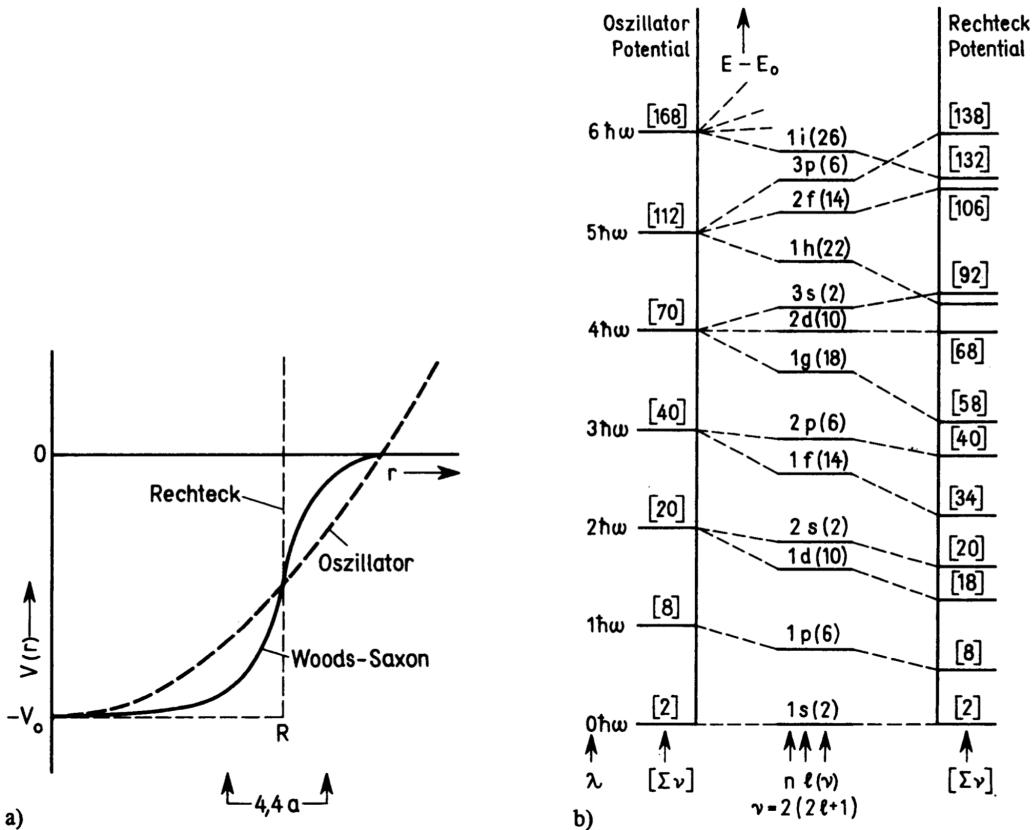


Abbildung 10.8: (a) Drei häufig gebrauchte Potentialformen. Die Größen R und a beziehen sich auf das Woods-Saxon-Potential. (b) Energieniveaus im Oszillator- und im Rechteckpotential mit unendlich hohen Wänden, in der Mitte interolierte Werte (Quelle [MK13b]).

Saxon-Potential hat den Nachteil, dass sich Lösungen der Schrödinger-Gleichung dafür nicht in geschlossener Form angeben lassen. Um einigermaßen realistische Energieniveaus zu erhalten, kann man entweder die Energiewerte zwischen den Lösungen für Rechteck- oder Oszillatortpotential interpolieren, oder man berechnet sie numerisch aus dem Woods-Saxon-Potential. Ein „Schalenabschluss“ tritt für Teilchenzahlen auf, bei denen ein Niveau gerade voll besetzt ist und das einen besonders großen Abstand zum nächsthöheren Niveau hat. Für keines der drei besprochenen Potentiale ergeben sich jedoch bei diesem Verfahren die richtigen Schalenabschlüsse bei allen magischen Nukleonenzahlen.

In Abbildung 10.8 (b) sind die Energieniveaus dargestellt, die man für den harmonischen Oszillator (links) und das Rechteckpotential mit unendlich hohen Wänden (rechts) erhält. In der Mitte befinden sich die interpolierten Werte. Die Nukleonenzustände mit gleicher l (und j) versieht man normalerweise (in der Reihenfolge zunehmender Energie) mit einer „Hauptquantenzahl“ n . n nimmt alle ganzzahligen Werte von 1 beginnend an.¹⁰ Beim Oszillator

¹⁰Das ist anders als bei der für die Elektronenniveaus in einem Atom üblichen Bedingung, nach der die Zahl n Werte durchläuft, die mit $l + 1$ beginnen. Die Zahl $n - 1$ gibt hier die Anzahl an Knoten der Radialfunktion wieder.

mit dem Potential $\frac{1}{2}m\omega^2r^2$ ergibt sich für die Energiedichten (siehe *Appendix C.7*)¹¹

$$E_{nl} = \hbar\omega\left(2n + l - \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{3}{2}\right) = E_\lambda , \quad (10.34)$$

wobei

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots , \\ l &= 0, 1, 2, \dots , \\ \lambda &= 2(n-1) + l = 0, 1, 2, \dots . \end{aligned}$$

Die Energieniveaus sind also äquidistant und in Abbildung 10.8 (b) links nach Abzug der Nullpunktssnergie $(3/2)\hbar\omega$ aufgetragen. Abgesehen von den zwei untersten Niveaus sind die Lösungen für verschiedene Paare der Werte von n und l beim Oszillatoren „zufällig“ entartet. Diese Entartung wird beim Übergang zum Rechteckpotential aufgehoben. Daher hängen die Energien, die in der Mitte und rechts in Abbildung 10.8 (b) eingezeichnet sind, von n und l explizit ab. Statt $l = 0, 1, 2, \dots$ haben wir die üblichen Symbole s, p, d, \dots geschrieben ($2p$ bedeutet also $n = 2, l = 1$). Jeder Zustand mit dem Bahndrehimpuls l hat hinsichtlich der magnetischen Quantenzahl m eine $(2l+1)$ -fache Entartung, sodass er nach dem Pauli-Prinzip mit $\nu = 2(2l+1)$ Teilchen vom Spin $1/2$ besetzt werden kann. Die Zahl ν ist in Abbildung 10.8 (b) in runden Klammern hinzugefügt. In eckigen Klammern steht die Summe aller ν bis zu dem betreffenden Niveau.

Die Niveauverschiebung vom Rechteckpotential mit endlich hohen Wänden zum Woods-Saxon-Potential¹² lässt sich folgendermaßen verstehen. Wir gehen vom endlich hohen Rechteckpotential aus mit Eigenzuständen ψ_k . Die Niveauverschiebung beim Woods-Saxon-Potential des Zustandes k ergibt sich mittels Störungstheorie in erster Ordnung mit ψ_k als ungestörten Zuständen. Als Störoperator betrachten wir die Differenz von Woods-Saxon-Potential und Rechteckpotential \hat{V} . Somit haben wir

$$\begin{aligned} \Delta E^{(1)} &= \int \psi_k^* \hat{V} \psi_k dV \\ &= \int_0^\infty dr r^2 \int [4\pi] d\Omega R_{nl}^*(r) Y_{lm}^*(\Omega) \hat{V}(r) R_{nl}(r) Y_{lm} \\ &= \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) \hat{V}(r) R_{nl}(r) \\ &= \int_0^\infty dr \chi_{nl}^*(r) \hat{V}(r) \chi_{nl}(r) , \end{aligned} \quad (10.35)$$

wobei wir Gleichungen (1.11) und (1.15) verwendet haben. Graphisch veranschaulicht ist $\hat{V} = \Theta(R-r) H_1(r) + \Theta(r-R) H_2(r)$ in Abbildung 10.9. $H_1(r)$ gibt die Rundung auf der

¹¹Es ergibt sich unmittelbar, dass $\omega = \sqrt{\frac{2V_0}{mR^2}}$.

¹²Oder allgemeiner einem Rechteckpotential mit abgerundeten Ecken.

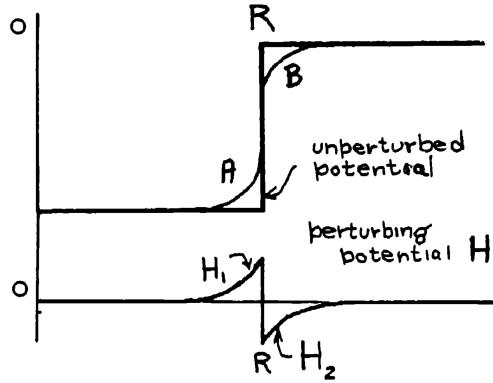


Abbildung 10.9: Der Störoperator als Differenz von Woods-Saxon-Potential und Rechteckpotential \hat{V} veranschaulicht (Quelle [Fer50]).

Innenseite bei A und $H_2(r)$ die Rundung ausserhalb bei B wieder. Somit finden wir

$$\begin{aligned}\Delta E^{(1)} &= \int_0^R dr |\chi_{nl}(r)|^2 H_1(r) + \int_R^\infty dr |\chi_{nl}(r)|^2 H_2(r) \\ &= \overline{H_1} \int_0^R dr |\chi_{nl}(r)|^2 + \overline{H_2} \int_R^\infty dr |\chi_{nl}(r)|^2.\end{aligned}\quad (10.36)$$

Es ist zwar $\overline{H_2}$ negativ, allerdings gilt auch

$$\int_0^R dr |\chi_{nl}(r)|^2 > \int_R^\infty dr |\chi_{nl}(r)|^2,$$

weshalb wir

$$\boxed{\Delta E^{(1)} > 0}, \quad (10.37)$$

finden. Nukleonen mit höherem Drehimpuls l verbringen vergleichsweise mehr Zeit nahe der Kante der Wand in Region A bzw. haben sie dort eine höhere Wahrscheinlichkeitsdichte $|\chi_{nl}(r)|^2$. Somit ist $\Delta E^{(1)}$ für diese Zustände höher. Das erklärt beispielsweise warum der $1d$ -Zustand sich näher zum $2s$ -Zustand hin oder der $1f$ sich näher zum $2p$ hin verschiebt. Dieses Verhalten ist auch in Abbildung 10.8 (b) ersichtlich, obwohl sich die Niveauverschiebungen in dieser Abbildung durch Interpolation zwischen den Niveaus eines Rechteckpotentials mit unendlich hohen Wänden und einem Oszillatorkontakt ergeben.¹³

Wie wir beim Fermigasmodell gesehen haben ist die Tiefe des Potentialwalls entlang dem Periodensystem ungefähr konstant. Der Radius R wächst jedoch mit A ungefähr wie $R \approx 1.3 \times 10^{-15} A^{1/3}$ m. Für kleine Radien ist nur der $1s$ -Zustand gebunden. Mit wachsendem

¹³In Abbildung 10.8 (b) werden nicht alle Niveaus erhöht wenn man vom Rechteckpotential zum Woods-Saxon Potential übergeht. Das steht nicht im Widerspruch zu Gleichung (10.37), denn in Abbildung 10.8 (b) wird ein Rechteckpotential mit unendlich hohen Wänden verwendet und die Nullpunktsenergie vernachlässigt.

Radius werden Zustände mit höherem l möglich und zwar so wie in Abbildung 10.8 (b) gereiht.

Man kann nun im Rahmen des Schalenmodells versuchen die Arten von Kernen aus Kernschalen aufzubauen, so wie sich das Periodensystem aus der Atomtheorie ergibt.

Mutmaßliche Konfiguration $(P; N)$:

- (1) ^2H , D $(1s; 1s)$ d.h. ein Proton im $1s$, ein Neutron im $1s$ Zustand. Gemäß Pauli-Prinzip wäre Spin 0 oder 1 möglich. Tatsächlich beobachtet wird Spin 1.

(2) ^3He $(1s^2; 1s)$ notwendigerweise Spin $1/2$, da Proton Spins entgegengesetzt sein müssen.

(3) ^3H $(1s; 1s^2)$ notwendigerweise Spin $1/2$, ähnlich zu oben.

(4) ^4He $(1s^2; 1s^2)$ Spin 0, ein Kern mit „abgeschlossener Schale“.

Der $1s$ Orbit für beide Neutronen und Protonen ist nun gefüllt. Der nächste Orbit ($1p$) bringt sechs Neutronen und sechs Protonen unter, was ^{16}O als den nächsten Kern mit abgeschlossener Schale ergibt.

- (5) ${}^5\text{He}$ $(1s^2; 1s^21p)$ existiert nicht, der $1p$ -Zustand ist nicht gebunden. ${}^5\text{He}$ ist der zusammengesetzte Kern der Reaktion $n + {}^4\text{He} \rightarrow n + {}^4\text{He}$. Bei der Streuung wird eine Resonanz bei etwa 1 MeV beobachtet. Dies sind ein $P_{1/2}$ und ein tiefer liegender $P_{3/2}$ Zustand (siehe Abbildung 10.10).

(6) ${}^6\text{Li}$ $(1s^21p; 1s^21p)$ Es gibt hier zwei unabhängige Systeme, jedes besteht aus Spin 1 (Bahndrehimpuls) und Spin 1/2 (Spin). Es gibt viele mögliche Kernspins, eingeschlossen den tatsächlich beobachteten, nämlich 1.

Am Ende dieser Periode steht ^{16}O , der nächste Kern mit abgeschlossener Schale. Er hat Spin 0 und ist außergewöhnlich stabil.

Im Schalenmodell, wie bislang beschrieben, gibt es geschlossene Schalen entweder für Proton- oder Neutronkonfigurationen mit (siehe Abbildung 10.8 (b)) 2, 8, 20, 40, 70, 112, 168, ... Neutronen und/oder Protonen. Für große Kerne reduziert die Coulomb-Energie die Anzahl der Protonen gegenüber der Anzahl an Neutronen und, mit Ausnahme von $^{208}\text{Pb}_{126}$, können Kerne keine geschlossenen Schalen für beide gleichzeitig haben. Empirisch finden wir einen Abschluss für die **magischen Zahlen** (siehe Gleichung (8.18))

2, 8, 20, 50, 82, 126, 184

wobei letztere beiden Zahlen nur für Neutronen gelten.¹⁴

¹⁴Die Zustände $1f_{7/2}$ mit ihren 8 freien Plätzen werden manchmal als besondere Gruppe herausgestellt, weil die Zahl 28 auch die Eigenschaften magischer Zahlen hat.

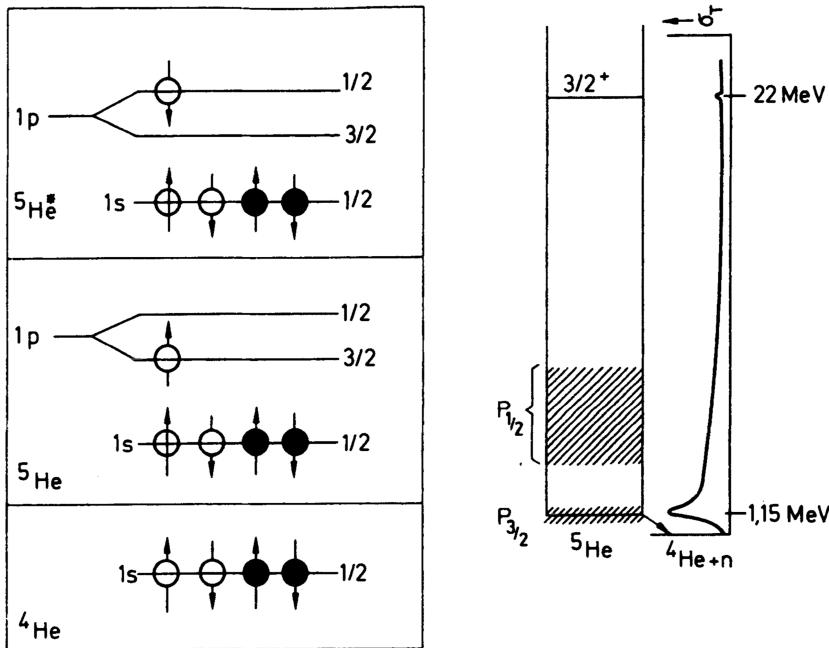


Abbildung 10.10: Durch Streuung von Neutronen an ^4He gewonnene Drehimpulsszuordnung der tiefeliegenden Zustände im ^5He . (links) Konfigurationen (rechts) Termschema (Quelle [MK13b]).

Die sogenannten **doppelt magischen Kerne**, bei denen sowohl Z als auch N magische Zahlen sind, sind besonders stabil. Im Vergleich zu den ihnen benachbarten Kernen haben sie ein anomal kleines Bestreben, ein weiteres Nukleon anzulegen, und ihre ersten angeregten Niveaus liegen anomal hoch.¹⁵ Die magischen Zahlen stimmen nicht mit den Zahlen für geschlossene Schalen über 20 überein. Die Ursache liegt an der nicht berücksichtigten Spin-Bahn-Kopplung (*Maria Göppert-Mayer*, 1949; *Otto Haxel, Johannes H. D. Jensen, Hans E. Suess*, 1949). Wie wir gesehen haben, ist in der nichtrelativistischen Näherung die Wechselwirkung eines Nukleons mit dem selbstkonsistenten Feld unabhängig vom Nukleonenspin. Eine solche Abhängigkeit könnte nur durch ein Glied proportional zu $\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}$ gegeben werden, wobei \mathbf{n} der Einheitsvektor in Richtung des Ortsvektors \mathbf{r} des Nukleons ist; dieses Produkt ist aber kein echter, sondern ein Pseudoskalar. Hier wird angenommen, dass die Kernkräfte invariant gegenüber einer räumlichen Inversion sind, d.h., dass sie keine pseudoskalaren Glieder enthalten können. Gegenwärtig gibt es keine experimentellen Daten, die für das Gegenteil sprechen würden.

Die Spinabhängigkeit der Nukleonenergie ergibt sich aber bei Berücksichtigung der geschwindigkeitsabhängigen relativistischen Glieder. Das größte Glied ist proportional zur ersten Potenz der Geschwindigkeit.¹⁶ Aus den drei Vektoren \mathbf{s} , \mathbf{n} und \mathbf{v} kann man einen echten Skalar bilden: $(\mathbf{n} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{s}$. Der Operator für die **Spin-Bahn-Kopplung** eines Nukleons

¹⁵Doppelt magischen Kerne sind $^4_2\text{He}_2$, $^{16}_8\text{O}_8$, $^{40}_{20}\text{Ca}_{20}$, $^{208}_{82}\text{Pb}_{126}$. Der Kern $^4_2\text{He}_2$ ist überhaupt nicht in der Lage noch ein Nukleon an sich zu binden.

¹⁶Man geht hier von der relativistischen Entwicklung nach Ordnungen von v/c aus. Für $v \ll c$ ist der größte geschwindigkeitsabhängige Term proportional zu v .

im Kern hat daher die Gestalt

$$\hat{V}_{sl} = -\varphi(r) (\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{v}}) \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (10.38)$$

$\varphi(r)$ ist darin eine Funktion von r . Da $m_p \mathbf{r} \times \mathbf{v}$ der Bahndrehimpuls \mathbf{l} eines Teilchens ist, kann man Gleichung (10.38) auch in der Form

$$\hat{V}_{sl} = -f(r) \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}},$$

(10.39)

mit $f = \varphi/(r m_p)$ schreiben. Diese Wechselwirkung ist von erster Ordnung in v/c , während die Spin-Bahn-Kopplung eines Elektrons im Atom ein Effekt zweiter Ordnung ist. Dieser Unterschied hängt damit zusammen, dass die Kernkräfte bereits in nichtrelativistischer Näherung spinabhängig sind, während die nichtrelativistische Wechselwirkung der Elektronen (Coulomb-Kräfte) spinunabhängig ist. Die Energie der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist im Wesentlichen an der Kernoberfläche konzentriert, d.h., die Funktion $f(r)$ nimmt in den Kern hinein ab.¹⁷ Die Wechselwirkung Gleichung (10.39) bewirkt die Aufspaltung der Nukleonenniveaus mit dem Bahndrehimpuls l in zwei Niveaus mit den Drehimpulsen $j = l \pm 1/2$. Wegen¹⁸

$$\begin{aligned} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} &= \frac{\hbar^2 l}{2}, & \text{für } j &= l + \frac{1}{2}, \\ \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} &= -\frac{\hbar^2 (l+1)}{2}, & \text{für } j &= l - \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (10.40)$$

ist diese Aufspaltung

$$\Delta E = E_{l-1/2} - E_{l+1/2} = \overline{f(r)} \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right).$$

(10.41)

Das Experiment lehrt, dass das Niveau mit $j = l + 1/2$ (die Vektoren \mathbf{l} und \mathbf{s} sind parallel) niedriger als das Niveau mit $j = l - 1/2$ liegt. Das bedeutet, dass die Funktion $f(r) > 0$ ist.¹⁹

Die sich nach Einführung der Spin-Bahn-Aufspaltung ergebende Niveaufolge ist in Abbildung 10.11 wiedergegeben und zwar getrennt für Protonen und Neutronen, da das für die Protonen zusätzliche vorhandene Coulomb-Potential etwas verschiedene Niveaufolgen für die beiden Nukleonarten bewirkt. Links sind wieder die nichtaufgespaltenen Niveaus eingezeichnet, wie sie sich im Mittelteil von Abbildung 10.8 (b) ergeben haben. Bei den aufgespaltenen Niveaus ist der Wert von j als Index beigefügt. Es bedeutet also $2p\ 3/2$: $n = 2, l = 1, j = 1 + 1/2 = 3/2$. Jedes Niveau mit gegebenem j kann jetzt mit $2j + 1$ Teilchen besetzt werden. Die resultierenden Besetzungszahlen stehen wieder in runden Klammern.

¹⁷Tatsächlich könnte es in unbegrenzter Kernmaterie eine derartige Wechselwirkung überhaupt nicht geben; denn allein wegen der Homogenität eines solchen Systems fehlt darin eine ausgezeichnete Richtung, in die der Vektor \mathbf{n} zeigen könnte.

¹⁸Wobei wir wieder in $\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2)$ die Operatoren auf der rechten Seite durch die Eigenwerte ersetzen und so den Eigenwert des Operators auf der linken Seite erhalten.

¹⁹Die Termfolge dieser Aufspaltung ist also genau umgekehrt wie die Termfolge bei der Feinstrukturaufspaltung in der Atomhülle.

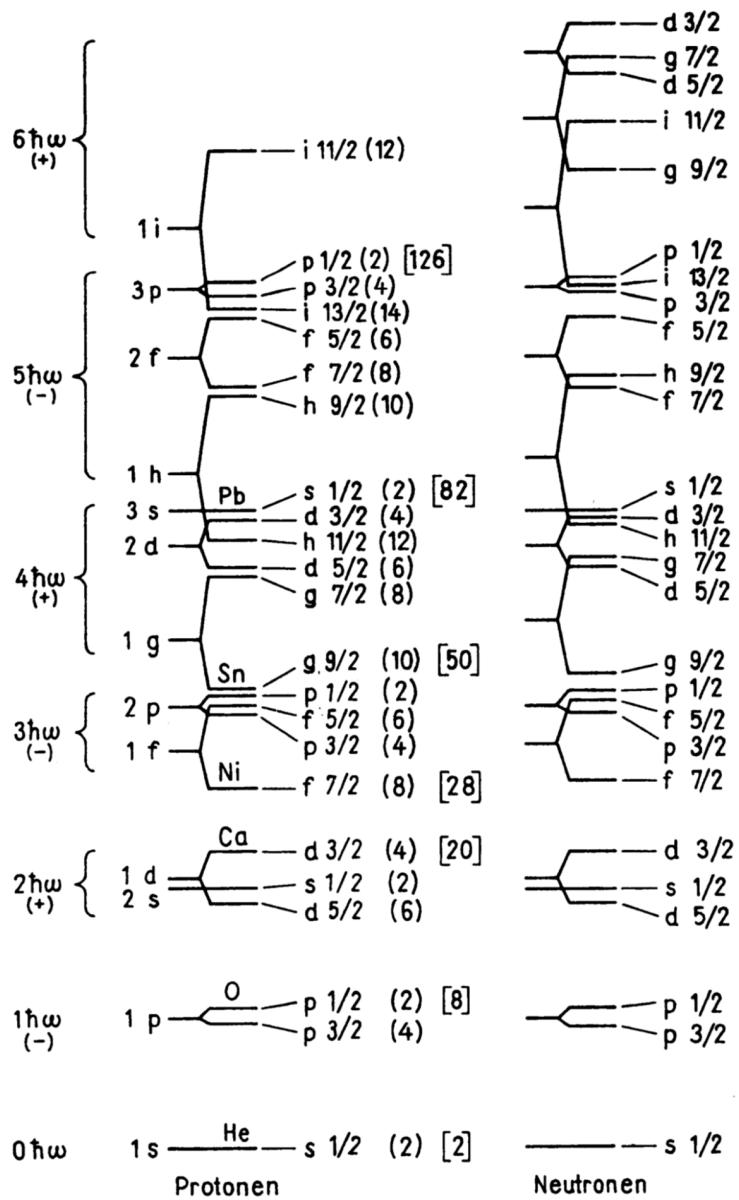


Abbildung 10.11: Niveaufolge des Schalenmodells mit Spin-Bahn-Aufspaltung. Die Aufspaltung ist experimentellen Werten angepaßt (Quelle [MK13b]).

Wenn man alle Teilchen, die bis zu einem bestimmten Niveau untergebracht werden können, aufsummiert, ergeben sich die Zahlen in eckigen Klammern. Es treten jetzt tatsächlich bei den magischen Zahlen besonders große Energieabstände auf. Die Ursache der Veränderung gegenüber Abbildung 10.8 (b) ist leicht zu sehen: Jedesmal, wenn oberhalb der Teilchenzahl 20 ein neuer Bahndrehimpuls auftritt (f, g, h, i), bewirkt die zu l proportionale Aufspaltung einen besonders großen Abstand der beiden Niveaus mit $l + 1/2$ und $l - 1/2$.

Die in Abbildung 10.8 (b) geschlossene Schale Nummer 40, beispielsweise, wird durch die Spin-Bahn-Kopplung geändert (siehe Abbildung 10.12). Die nächsten Schalen sind in Abbildung 10.13 angegeben. Die Größe der Spin-Bahn-Aufspaltung in Abbildung 10.11 ist

Kernmodelle

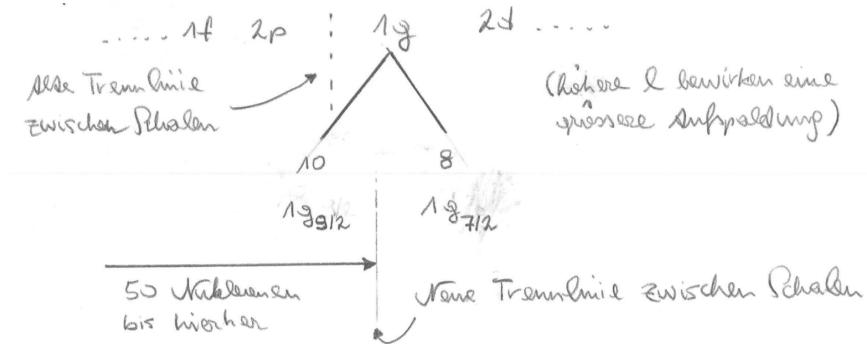


Abbildung 10.12: (Quelle nach [Fer50]).

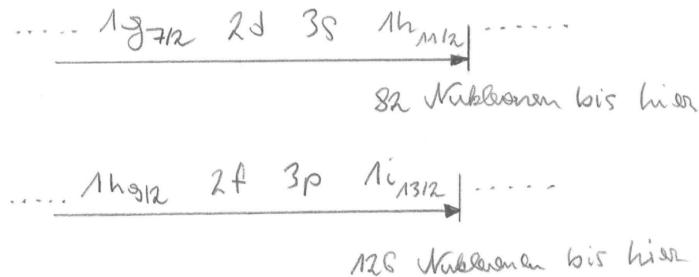


Abbildung 10.13: (Quelle nach [Fer50]).

durch Anpassung an die empirisch bekannten Energieverhältnisse festgelegt worden. Ganz links in der Abbildung sind noch einmal die Oszillatorzustände angegeben, aus denen die aufgespaltenen Niveaus hervorgingen. Sie bewirken eine Gruppierung nach geraden oder ungeraden Werten von l , sodass jeder Gruppe eine bestimmte Parität (bezeichnet mit + und - für gerade bzw. ungerade Parität) zugeordnet werden kann. Mit

$$V_i = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}} - f(r) \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (10.42)$$

haben wir in empirischer Weise ein mittleres Kernpotential gefunden, mit dessen Hilfe man die Schalenabschlüsse bei den magischen Zahlen erklären kann. Wir sind dabei im Wesentlichen den Überlegungen gefolgt, die zur Aufstellung des Schalenmodells geführt haben. Inzwischen ist es mit Erfolg gelungen, die empirischen Annahmen des Schalenmodells aus mesonentheoretisch begründeten Nukleon-Nukleon-Potentialen nach einem Hartree-Verfahren selbstkonsistenter Felder herzuleiten. Die Spin-Bahn-Kopplung eines Nukleons im Kern ist relativ schwach gegenüber der Wechselwirkung mit dem selbstkonsistenten Feld. Gleichzeitig ist sie im Allgemeinen groß gegenüber der Energie der restlichen paarweisen Wechselwirkung zweier Nukleonen im Kern (letztere ist durch den Operator \hat{V} gegeben), weil diese mit zunehmendem Atomgewicht schneller abnimmt.

Dieses Verhältnis zwischen den Energien der verschiedenen Wechselwirkungen erfordert, die Kernniveaus nach der jj -Kopplung zu klassifizieren. Die Spins und die Bahndrehimpulse

eines einzelnen Nukleons werden zu dem Gesamtdrehimpulsen $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ addiert. Die \mathbf{j} sind wohldefinierte Größen, weil die Kopplung zwischen \mathbf{l} und \mathbf{s} durch die Restwechselwirkung der Teilchen miteinander nicht gestört wird. Die Vektoren \mathbf{j} der einzelnen Nukleonen werden dann zum resultierenden Kerndrehimpuls $\mathbf{I} = \sum \mathbf{j}_k$ addiert (den man gewöhnlich, wie in Kapitel 8.4 besprochen, einfach als Kernspin bezeichnet, als würde der Kern ein Elementarteilchen sein). In dieser Hinsicht ist die Klassifizierung der Kernniveaus wesentlich anders als die Klassifizierung der Atomniveaus. Für die leichtesten Kerne, bei denen die Restwechselwirkung der Teilchen gegenüber der Spin-Bahn-Kopplung nicht mehr vernachlässigt werden kann, ähnelt die Kopplung mehr der LS -Kopplung. Bei dieser werden zuerst die Bahndrehimpulse $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_k$ und Spins $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_k$ addiert, welche den Kernspin $\mathbf{I} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ergeben. Für etwas schwerere Kerne bis $N = Z = 20$, liegt normalerweise keine der beiden Kopplungsformen rein vor. Man spricht vom Bereich der „intermediären Kopplung“.^a

Der Zustand eines Nukleons im Kern wird durch seinen Drehimpuls j und durch seine Parität bestimmt. Obwohl die Vektoren \mathbf{l} und \mathbf{s} nicht einzeln erhalten bleiben, ist der Betrag des Bahndrehimpulses eines Nukleons trotzdem eine bestimmte Größe; denn der Drehimpuls j kann entweder aus dem Zustand mit $l = j - 1/2$ oder aus dem Zustand mit $l = j + 1/2$ hervorgehen. Bei gegebenem Wert von j (halbzahlig) haben diese beiden Zustände verschiedene Parität $(-1)^l$, und daher wird durch die Angabe von j und der Parität auch die Quantenzahl l bestimmt.

Die Nukleonenzustände mit gleichem l und j (man nennt dies „Unterschale“ oder „ j -Schale“ im Gegensatz zu den durch die magischen Zahlen definierten Schalen) versieht man normalerweise (in der Reihenfolge zunehmender Energie) mit einer „Hauptquantenzahl“ n . n nimmt alle ganzzahligen Werte von 1 beginnend an.^b Man versieht die verschiedenen Zustände mit den Symbolen $1s_{1/2}, 1p_{1/2}, 1p_{3/2}$ usw. Die Zahl vor dem Buchstaben ist die Hauptquantenzahl, die Buchstaben s, p, d, \dots geben in der gewohnten Weise den l -Wert an, der Index am Buchstaben ist der Wert von j . In einem Zustand mit gegebenen Werten n, l, j können sich nicht mehr als $2j + 1$ Neutronen und ebenso viele Protonen gleichzeitig befinden.

Ein Zustand des ganzen Kerns (bei gegebener Konfiguration) wird üblicherweise mit einer Zahl für den Wert von I und einem Index + oder – für die Parität des Zustandes beschrieben.^c Durch Analyse der experimentellen Ergebnisse über die Kerneigenschaften kann man eine ganze Reihe von Gesetzmäßigkeiten über die Anordnung der Kernniveaus feststellen.

Vor allem ergibt sich, dass die Energie der Nukleonenniveaus mit zunehmendem Bahndrehimpuls l wächst. Diese Regel hängt damit zusammen, dass mit wachsendem l die Zentrifugalenergie eines Teilchens größer wird, und daher wird die Bindungsenergie kleiner. Ferner liegt das Niveau mit $j = l + 1/2$ (mit parallelen Vektoren \mathbf{l} und \mathbf{s}) bei gegebenem l niedriger als das Niveau mit $j = l - 1/2$. Diese Regel ist bereits im Zusammenhang mit den Eigenschaften der Spin-Bahn-Kopplung eines Nukleons im Kern erwähnt worden. Es gibt auch Regeln zum Isospin der Kerne, die wir hier nicht besprechen wollen.

Man kann auch einige Regeln für die Spins der Grundzustände von Kernen formulieren. Diese Regeln geben an, wie die Drehimpulse \mathbf{j} der einzelnen Nukleonen zum resultierenden Kernspin addiert werden. Sie resultieren aus dem Bestreben der Protonen und Neutronen im Kern in gleichen Zuständen, zu Paaren (pp und nn) mit entgegengesetzten Drehimpulsen zusammenzutreten.^d

Diese Erscheinung äußert sich zum Beispiel in Folgendem. Falls ein Kern eine gerade

Anzahl von Protonen und eine gerade Anzahl von Neutronen enthält (gg-Kerne), sind die Drehimpulse aller Nukleonen paarweise kompensiert, sodass der resultierende Drehimpuls des Kerns gleich Null ist.

Sehen wir uns einen Kern mit einer ungeraden Anzahl von Protonen oder Neutronen an. Alle Nukleonen oberhalb der gefüllten Schalen sollen sich in gleichen Zuständen befinden. Normalerweise ist dann der resultierende Kerndrehimpuls gleich dem Drehimpuls eines Nukleons. Es sieht so aus, als seien alle möglichen Protonen und Neutronen gepaart und als bliebe nur ein Nukleon mit einem unkompenzierten Drehimpuls übrig (die resultierenden Drehimpulse aufgefüllter Schalen sind Null). Für uu-Kerne (ungerades Z und ungerades N) gibt es keine genügend allgemeine Regel für den Spin des Grundzustandes.

Die verschiedenen Zustände in den einzelnen Gruppen wie in Abbildung 10.11 wiedergegeben, sind etwa so aufgezählt, wie sie in einer Reihe von Kernen nacheinander aufgefüllt werden. In Wirklichkeit gibt es aber bei der Auffüllung dieser Zustände beträchtliche Unregelmäßigkeiten. Außerdem muss man beachten, dass die Abstände zwischen verschiedenen Niveaus in schweren Kernen (weit weg von magischen Kernen) mit der „Paarungsenergie“ vergleichbar werden können. Unter diesen Bedingungen verliert selbst der Begriff individueller Zustände für die Komponenten eines Paares weitgehend seinen Sinn.

Wir wollen noch einige Bemerkungen über die Berechnung des magnetischen Kernmomentes im Schalenmodell anfügen. Falls außerhalb der abgeschlossenen Schalen nur ein einziges Nukleon vorhanden ist, geben die in Kapitel 8 hergeleiteten Schmidtschen Gleichungen unmittelbar das magnetische Kernmoment an. Wie wir in Kapitel 8 festgestellt haben, erreicht man aber faktisch keine große Genauigkeit, wenn man die magnetischen Kernmomente in einem „Einteilchen“-Schema berechnet. Die Schmidt-Gleichungen sind eher die oberen und unteren Grenzwerte als die exakten Werte für die Momente. Für zwei Nukleonen ist die Addition ihrer magnetischen Momente ebenfalls elementar auszuführen. Für mehrere Nukleonen muss die Mittelung des magnetischen Momentes mit einer Wellenfunktion für das System erfolgen, die in geeigneter Weise aus den individuellen Wellenfunktionen der Nukleonen gebildet wird. Gibt man die Nukleonenkonfiguration und den Zustand des ganzen Kerns vor, so kann diese Wellenfunktion in den Fällen eindeutig gebildet werden, wenn zu der gegebenen Konfiguration nur ein einziger Zustand des Systems mit den gegebenen Werten I und T (Isospin) gehören kann. Andernfalls ist der Kernzustand ein Gemisch aus einigen unabhängigen Zuständen (mit gleichen I und T), und die Koeffizienten in der Linearkombination für die Wellenfunktion des Kerns bleiben im Allgemeinen unbekannt.

Schließlich wollen wir noch darauf hinweisen, dass die Protonen in einem Kern ein (in Bezug auf $\hat{\mu}_I/\mu_K = g_I \hat{I}/I$) zusätzliches magnetisches Moment in Folge der Spin-Bahn-Kopplung der Nukleonen im Kern haben (*Maria Göppert-Mayer, Johannes H. D. Jensen*, 1952). Wenn der Operator für die Wechselwirkung explizit von der Teilchengeschwindigkeit abhängt, erfolgt der Übergang zum Fall eines äußeren Feldes, indem man den Impulsoperator gemäß $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ ersetzt. Wir führen diese Substitution in

$$\hat{V}_{sl} = -\varphi(r) (\mathbf{n} \times \mathbf{v}) \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (10.43)$$

aus, benutzen $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ für das Vektorpotential und finden folgenden Zusatzterm zum

Hamilton-Operator eines Protons

$$\begin{aligned}\varphi(r) \frac{e}{cm_p} (\mathbf{n} \times \mathbf{A}) \cdot \hat{\mathbf{s}} &= f(r) \frac{e}{2c} (\mathbf{r} \times [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]) \cdot \hat{\mathbf{s}} \\ &= f(r) \frac{e}{2c} (\mathbf{r} \times [\hat{\mathbf{s}} \times \mathbf{r}]) \cdot \mathbf{B}.\end{aligned}\quad (10.44)$$

Dieses Glied ist einem zusätzlichen magnetischen Moment mit dem Operator

$$\begin{aligned}\hat{\mu}_{\text{zus}} &= -\frac{e}{2c} f(r) (\mathbf{r} \times [\hat{\mathbf{s}} \times \mathbf{r}]) \\ &= -\frac{e}{2c} r^2 f(r) (\hat{\mathbf{s}} - (\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}),\end{aligned}\quad (10.45)$$

äquivalent.

Als nächstes betrachten wir die elektrischen Quadrupolmomente \tilde{Q} . Wir haben gesehen, dass nur Kerne mit $I > \frac{1}{2}$ ein nichtverschwindendes \tilde{Q} haben. Deshalb betrachten wir nur Kerne mit ungeradem A . Im Falle eines Kerns mit einem ungepaarten Proton, kommt \tilde{Q} durch das ungepaarte Proton im Einteilchen-Schalenmodell zustande. Vernachlässigt man die spinabhängigen Terme, erhält man größtenteils (die z -Achse ist die durch den Kernspin definierte Symmetriechse)

$$\tilde{Q}_0 = (3\langle z^2 \rangle - \langle r^2 \rangle), \quad (10.46)$$

wobei $Z = 1$ ist (für 1 Proton), e entsprechend der quantenmechanischen Definition nicht vorkommt und die Mittelung über das Proton-Orbital genommen wird. Im Mittel erhält man $\simeq 1 \times 10^{-30} \text{ m}^2$ für die leichtesten Kerne bis zu $\simeq 6 \times 10^{-29} \text{ m}^2$. Im Falle eines Kerns mit ungepaartem Neutron wird $Q = 0$ vorhergesagt, bis auf einen sehr kleinen Rückstoßeffekt, da das Neutron keine elektrische Ladung hat.

Die experimentelle Situation sieht jedoch ganz anders aus. Erstens findet man keinen großen Unterschied für Q für ungepaartes Proton und ungepaartes Neutron. Zweitens findet man für viele Kerne Werte von Q die eine Größenordnung größer sind als die Einteilchenwerte. Dies geschieht im ungefähren Bereich $150 < A < 190$ und $A > 225$, weit weg von geschlossenen Schalen. Diese große Diskrepanz kann nur erklärt werden, wenn in diesen Regionen viele Nukleonen zu Q beitragen. Das weist auf eine „kollektive“ Bewegung von Nukleonen im Kern hin. In Kapitel 10.4 werden wir sehen, wie dieses Verhalten im Kollektiven Modell berücksichtigt wird.

10.3.1 Angeregte Zustände

Bislang haben wir uns im einfachen Schalenmodell nur die Eigenschaften von Kernen im Grundzustand angesehen. Im Falle eines Kerns mit ungeradem A ist die natürliche Erklärung für niedere Anregungszustände die, dass sie dadurch zustande kommen, dass das ungepaarte Nukleon einen angeregten Schalenmodellzustand einnimmt.

Beispielsweise hat der Grundzustand von ^{17}O ein ungepaartes Neutron im $1d_{5/2}$ -Zustand und unmittelbar darüber liegen der $2s_{1/2}$ - und der $1d_{3/2}$ -Zustand, welche somit als angeregte Zustände erwartungsgemäß fungieren. In Kapitel 8 haben wir die Anregungsniveaus von ^{17}O wiedergegeben. Der erste angeregt Zustand ist tatsächlich $\frac{1}{2}^+$ und könnte somit als $2s_{1/2}$ -Schalenmodell-Zustand interpretiert werden. Weiters gibt es einen $\frac{3}{2}^+$ -Zustand bei 5.08 MeV,

welcher der $1d_{3/2}$ -Zustand sein könnte. Detaillierte Studien zu Kernreaktionen unterstützen diese Interpretation, welche auch auf ein $1d_{5/2} - 1d_{3/2}$ Spin-Orbit-Splitting von $\simeq 5$ MeV hinweisen. Das passt mit den experimentellen Hinweisen des Mittelwerts (*Aage N. Bohr, Benjamin R. Mottelson, 1969*)

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{j=l-1/2} - E_{j=l+1/2} \\ &\simeq 10(2l+1) A^{-2/3} \text{ MeV},\end{aligned}\tag{10.47}$$

überein. Allerdings weist die Plethora von anderen Zuständen darauf hin, dass der ^{16}O -Kern aufbrechen muss um sie zu bilden. Für gg-kerne (wie ^{16}O), selbstverständlich, in denen im Grundzustand alle Nukleonen gepaart sind, involvieren angeregte Zustände unweigerlich das Aufbrechen von zumindest einem Paar und die Situation wird sehr kompliziert.

10.4 Das Kollektive Modell

Im soeben diskutierten Einteilchen-Schalenmodell wird das ungepaarte Nukleon behandelt als wenn es sich innerhalb eines sphärisch symmetrischen Potentials aufgrund der anderen Nukleonen bewegt. Natürlich kann das Orbital des ungepaarten Nukleons sehr asymmetrisch sein in Abhängigkeit von l . Wegen der Wechselwirkung mit den anderen Nukleonen, kommt es unweigerlich zu Abweichung des Kerns von der sphärischen Symmetrie. Je weiter der Kern von der sehr stabilen Konfiguration geschlossener Schalen entfernt ist desto ausgeprägter wird diese Abweichung wahrscheinlich sein. Es überrascht somit nicht, dass große Quadrupolmomente, welche Deformationen des Kerns anzeigen, gerade für $150 < A < 190$ und $A > 225$ beobachtet werden. Dieser kollektive Effekt, der viele Nukleonen involviert, ist was man erwarten darf unter Berücksichtigung, dass der Kern sich in mancher Beziehung wie ein Flüssigkeitstropfen verhält (siehe Abschnitt 10.1).

Die Möglichkeit dieser Art von Verhalten führte *James Rainwater, Aage N. Bohr* (Sohn von *Niels Bohr*) und *Benjamin R. Mottelson* in den frühen 1950er Jahren zur Einführung des Kollektiven Modells eines Kerns. Es wird am besten an einem gg-Kern illustriert.

Für einen gg-Kern erwartet man eine sphärische Symmetrie im Grundzustand recht nahe bei einer abgeschlossenen Schale. Allerdings ist dieser sphärische Kern deformierbar und es werden angeregte Zustände erwartet, in welchen der Kern um seine sphärische Form oszilliert. Für einen fixen Schwerpunkt ist die einfachste Möglichkeit einer asphärischen Deformation, wenn der Kern „Quadrupol“-Oszillationen erfährt, bei welchen seine Form zwischen sphärisch und ellipsoid variiert. Da wir es mit einem Quantensystem zu tun haben, werden diese Oszillationen quantisiert sein mit einer Energie $\hbar\omega$, respektive, wo ω die Kreisfrequenz der Oszillation ist. Diese quantisierten Oszillationen werden üblicherweise als „Phononen“ bezeichnet. Da der Radius einer elliptischen Form als Funktion von ϑ durch einen Ausdruck der Form $r = A + B Y_{20}(\vartheta)$ gegeben ist (siehe Appendix A.5), hat jedes Phoron eine Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 2$ und gerade Parität. Kerne, welche genau durch so ein Modell beschrieben werden, sollten daher äquidistante tiefliegende Anregungszustände haben (so wie alle quantenmechanischen Anregungen eines Oszillators) entsprechend der Anwesenheit von 1, 2, ... Phononen wie in Abbildung 10.14 (a). Man beachte, dass für 2 Phononen (jedes mit $l = 2$) aufgrund der Symmetrie die Gesamtdrehimpulsquantenzahlen auf 0, 2 oder 4 beschränkt sind. In Abbildung 10.14 (b) sind die tiefen Energieniveaus für einen

typischen „Vibrations-Kern“ (^{114}Cd) dargestellt. Es zeigt das erwartete Verhalten obwohl die 2-Phonon-Zustände nicht ganz entartet sind wie vorhergesagt.

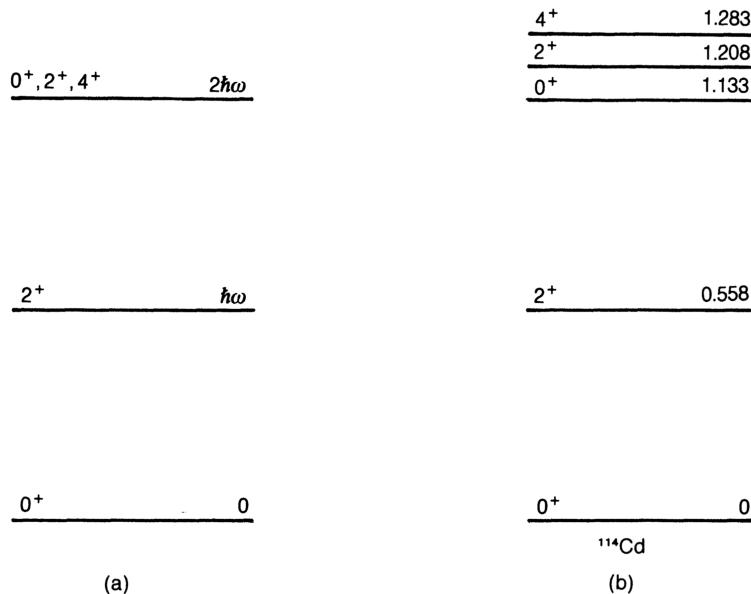


Abbildung 10.14: (a) Theoretische Niveauunterschiede der Quadrupol-Vibrationsniveaus; (b) Tiefliegende Energieniveaus von ^{114}Cd (Quelle [BS13]).

Eine andere Form von kollektiver Oszillation, welche stattfinden kann, ist eine in welcher Protonen und Neutronen im Kern in Antiphase miteinander vibrieren und damit einen oszillierenden elektrischen Dipol bilden. Der resultierende Zustand, bekannt als **Dipol-Riesenresonanz**, wurde in vielen Kernen mittels Studien zu Kernreaktionen entdeckt. Dies geschieht bei sehr hohen Energien, von der Größenordnung 10 – 25 MeV je nach Kern, und hat den Spin (Parität) 1^- . Im Schalenmodell entspricht dies der Anregung von Nukleonen zwischen unterschiedlichen Hauptschalen - daher die hohe Energie und ungerade Parität.

Weiter weg von geschlossenen Schalen kann das ungepaarte Nukleon den Kern so deformieren, dass die Gleichgewichtsform eines Kerns nicht mehr sphärisch ist und der Kern permanent ellipsoid ist - entweder prolat oder oblat. Für einen derart deformierten Kern erwartet man Rotationen um die kleine Achse des Ellipsoids (siehe Abbildung 10.15).

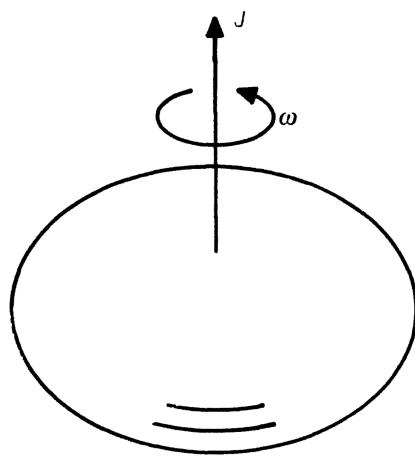


Abbildung 10.15: Nukleare Rotationsbewegung mit Kreisfrequenz ω (Quelle [BS13]).

Die Bewegung wird wieder quantisiert sein und der übliche Ausdruck für die Energie einer Rotationsbewegung gilt

$$E_I = \frac{(\text{Drehmoment})^2}{2I_T} = \frac{I(I+1)\hbar^2}{2I_T}, \quad (10.48)$$

wobei I_T das zur Bewegung zugehörige Trägheitsmoment ist. Aufgrund der ellipsoiden Symmetrie ist I auf die Werte $0, 2, 4, 6, \dots$ für gg-Kerne beschränkt. Somit wird für „rotierende“ Kerne eine einfache Folge von Niveaus vorhergesagt ($I^P = 0^+, 2^+, 4^+, \dots$) mit Energien E_I entsprechend der obigen Gleichung. Dies wird häufig beobachtet und Abbildung 10.16 zeigt die tiefen Rotationsniveaus von ^{238}U .

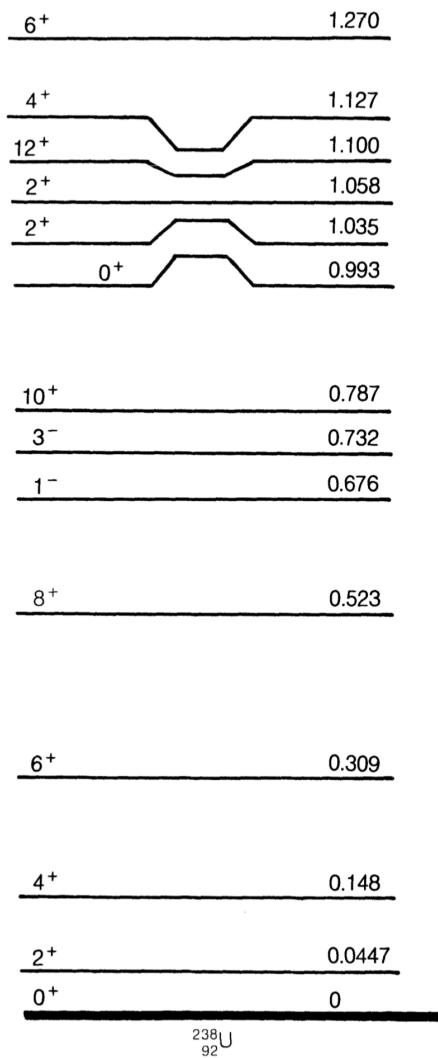


Abbildung 10.16: Rotations-Energieniveaus von ^{238}U (Quelle [BS13]).

Von den Abständen der Rotationsniveaus ist es offensichtlich möglich die Trägheitsmomente I_T für unterschiedliche Kerne zu bestimmen. Im Allgemeinen findet man, dass sie bedeutend kleiner sind (um einen Faktor 2 – 3) als die Werte für eine starre Rotation, was darauf hindeutet, dass die Rotationsbewegung ein wenig wie bei einer Flüssigkeit ist. Das kann auf die Paarungswechselwirkung zurückgeführt werden, welche dazu führt, dass Nukleonen sich in Orbitalen paaren mit gegengesetztem Drehmoment ((j, m) und $(j, -m)$). Eine derartige Bewegung unterscheidet sich vollständig von einer starren Rotation, in welcher sich alle Nukleonen gemeinsam bewegen.

Von den Werten für die Quadrupolmomente und detaillierten Untersuchungen der Rotationszustände und elektromagnetischer Übergänge zwischen ihnen ergibt sich, dass Kerne oblater Form relativ geringe Asymmetrien aufweisen, während Kerne prolaten Form Verhältnisse von Haupt- zu Nebenachsen von bis zu 1.5:1 und in einem Fall (^{152}Dy - ein **superdeformierter** Kern) von 2:1 haben! Für denselben Kern hat man Rotationszustände mit I bis zu 60 identifiziert. Das ist nahe dem Limit (geschätzt bei $I \simeq 80$) über dem ein Kern erwartungsgemäß zerfällt, aufgrund der riesigen Zentrifugalkraft, welche durch das hohe Drehmoment generiert

wird.

Für solche Zustände findet man auch, dass das Trägheitsmoment sich dem einer starren Rotation annähert. In Abbildung 10.17 ist das Trägheitsmoment I_T als Funktion der Kreisfrequenz ω für den Zustand tiefster Energie bei gegebenem Drehimpuls J abgebildet.

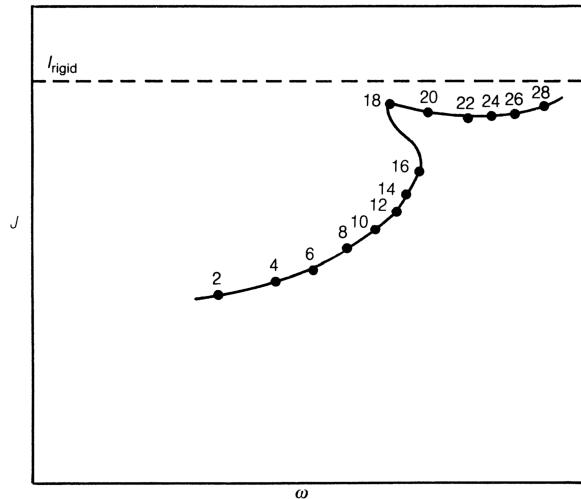


Abbildung 10.17: Abbildung von I über ω für Yrast-Zustände von ^{156}Dy (Quelle [BS13]).

Solche Zustände werden **Yrast-Zustände**^e genannt und diese sind für ^{156}Dy in Abbildung 10.17 wiedergegeben.

Man sieht ab einem gewissen ω wächst I_T rapide. Dieses Phänomen, der sogenannte „Rückbiege-Effekt“ („Backbending Effekt“), stammt von der Corioliskraft ($\propto \omega$), welche bei hohen Winkelgeschwindigkeiten die Paarungskraft übertrifft. Letztere, wie schon erwähnt, ist verantwortlich für die geringen Werte von I_T .

Die vorhergehende Besprechung zeigt die Natur der kollektiven Bewegung für gg-Kerne. Für Kerne mit ungeradem A ist die Situation weit komplizierter und betrifft die Kopplung der Bewegung des ungepaarten Nukleons (bzw. Nukleonen) an den vibrierenden oder rotierenden Kern. Darüber hinaus muss im Falle eines permanent deformierten Kerns die Bewegung der Nukleonen in einem ellipsoiden Potential ermittelt werden, was zu weiteren Komplikationen führt. Unter Berücksichtigung all dieser Komplikationen gibt dieses Modell dennoch ein gutes Verständnis der Struktur vieler Kerne entlang dem Periodensystem.

10.5 Entwicklung von Kernmodellen

Das Einteilchen-Schalenmodell und das Kollektive Modell von gg-Kernen sind zwei extreme Darstellungen der Kernstruktur. Keine von beiden ergibt eine vollständige oder präzise Beschreibung. Auf welche Weise sie verbessert werden können wurde bereits kurz angedeutet.

Im Fall des Schalenmodells wurden viele Berechnungen durchgeführt unter Berücksichtigung aller Valenz-Nukleonen außerhalb geschlossener Schalen sowie der Restwechselwirkung zwischen ihnen. Besonders erfolgreich sind sie für die Beschreibung der Eigenschaften von Kernen in den Bereichen $4 < A < 16$ (Auffüllen der $1p$ Schale) und $16 < A < 40$ (Auffüllen der $1d$, $2s$ Schalen). Das ist sehr aufwändig unter Berücksichtigung vieler Parameter um

die Restwechselwirkung zu beschreiben und verlangt die Diagonalisierung von Matrizen mit tausenden von Termen. Interessanterweise können diese Rechnungen kollektive Phänomene reproduzieren beim bloßen Beginn vom Teilchenbild. Somit treffen einander die zwei Modelle in diesem Rahmen.

Wie bereits erwähnt, müssen noch Berechnungen erzielt werden, welche vom Kollektiven Modell ausgehen aber die Bewegung der „Valenz“ Nukleonen in einem ellipsoiden Potential berücksichtigen, was einige Einsicht der Kerneigenschaften in Bereichen großer Deformation ermöglichen wird.

Vor kurzem wurde ein Ansatz entwickelt (*Akito Arima, Francesco Iachello, 1975*) aufgrund der Komplexität bei der Behandlung von vielen individuellen Nukleonen, in welchem Nukleonpaare wie Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) behandelt werden. Das ist bekannt als „interacting boson model“ (IBM) und die Bosonen, welche Anregungen von geschlossenen Schalen beschreiben können, werden mit Spin-Parität $I^P = 0^+$ oder 2^+ genommen, den zwei tiefsten möglichen Zuständen für ein Paar von Nukleonen. Es werden Ein- und Zwei-Boson Wechselwirkungen eingeführt und die Berechnungen können dann einfacher voranschreiten und mit weniger Parametern als bei dem gewöhnlichen Schalenmodell. Das IBM kann nicht die Genauigkeit von Schalenmodell Berechnungen erreichen (dort wo diese durchgeführt werden können), aber der wichtige Punkt ist, dass es in Bereichen verwendet werden kann wo Schalenmodell Berechnungen einfach zu schwierig sind, insbesondere in den Bereichen zwischen sphärischen und stark deformierten Kernen. Das Modell ist nun eines der Hauptmittel um die Struktur vieler Kerne zu verstehen.

^aIn der Elektronenhülle eines Atoms ist die relativistische Spin-Bahn-Kopplung im Allgemeinen klein gegenüber der direkten elektrischen und der Austauschwechselwirkung, und deshalb werden die Atomniveaus normalerweise nach der *LS*-Kopplung klassifiziert.

^bDas ist anders als bei der für die Elektronenniveaus in einem Atom üblichen Bedingung, nach der die Zahl n Werte durchläuft, die mit $l + 1$ beginnen.

^cDie Parität des Kerns wird im Schalenmodell dadurch bestimmt, ob die algebraische Summe der l -Werte aller Nukleonen eine gerade oder eine ungerade Zahl ist.

^dDie Bindungsenergie solcher Paare ist von der Größenordnung 1 ... 2 MeV.

^e„Yrast“ ist der Superlativ des schwedischen Wortes für „rotierend“, bedeutet also ungefähr „am meisten rotierend“.

11

Kernzerfälle und Kernreaktionen

TBD

Teil III: Teilchenphysik

12

Grundlegende Teilcheneigenschaften

TBD

Appendix

A

Mathematische Grundlagen

A.1 Laplace-Operator in gekrümmten Koordinaten

Wir haben ein 3-dimensionales Koordinatensystem mit Koordinaten u_1 , u_2 und u_3 . Der Ortsvektor $\mathbf{r} = \mathbf{r}(u_1, u_2, u_3)$ bzw. sein Differential

$$\begin{aligned} d\mathbf{r} &= du_1 \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_1} + du_2 \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_2} + du_3 \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u_3} \\ &= du_1 h_1 \mathbf{e}_1 + du_2 h_2 \mathbf{e}_2 + du_3 h_3 \mathbf{e}_3, \end{aligned}$$

definieren (lokale) Einheitsvektoren \mathbf{e}_k (mit $k = 1, 2, 3$) und positive metrische Funktionen $h_k(u_1, u_2, u_3)$ (wobei $k = 1, 2, 3$).

Die Koordinaten seien orthogonal und rechtshändig, d.h.

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j &= \delta_{jk} \quad \text{für} \quad j, k = 1, 2, 3 \\ \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 &= \mathbf{e}_3. \end{aligned}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} ds^2 &= dx^2 + dy^2 + dz^2 \\ &= h_1^2 du_1^2 + h_2^2 du_2^2 + h_3^2 du_3^2, \end{aligned}$$

und für das Volumselement

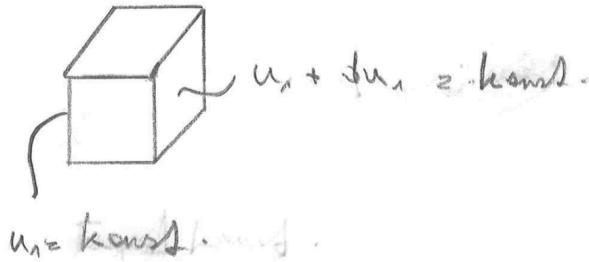
$$\begin{aligned} d^3r &= dx dy dz \\ &= \underbrace{h_1 h_2 h_3}_{\equiv h} du_1 du_2 du_3, \end{aligned}$$

sowie den Gradienten

$$\nabla \psi = \left(\mathbf{e}_1 \frac{1}{h_1} \frac{\partial}{\partial u_1} + \mathbf{e}_2 \frac{1}{h_2} \frac{\partial}{\partial u_2} + \mathbf{e}_3 \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial u_3} \right) \psi.$$

Für den Laplace-Operator verwenden wir den Gausschen Integralsatz

$$\int_V d^3r \nabla \cdot \nabla \psi = \oint_S d\mathbf{S} \cdot \nabla \psi,$$



über das kleine Volumen, welches durch Flächen mit u_1 bzw. u_2 bzw. $u_3 = \text{const.}$ begrenzt wird

$$\begin{aligned} du_1 du_2 du_3 h \Delta\psi &= du_2 du_3 \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial u_1} \Big|_{u_1+du_1} - \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial u_1} \Big|_{u_1} \right) + \dots \\ &= du_2 du_3 \frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial u_1} \right) du_1 + \dots \\ &= du_1 du_2 du_3 \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial u_k} \left(\frac{h}{h_k^2} \frac{\partial \psi}{\partial u_k} \right). \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\boxed{\Delta\psi = \frac{1}{h} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial u_k} \left(\frac{h}{h_k^2} \frac{\partial \psi}{\partial u_k} \right)}. \quad (\text{A.1})$$

Z.B. in sphärischen Koordinaten gilt $h_1 = 1$, $h_2 = r$, $h_3 = r \sin \vartheta$ und somit $h = r^2 \sin \vartheta$ und für den Laplace-Operator

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \right] \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned}$$

A.2 Die konfluent hypergeometrische Funktion

Die konfluent hypergeometrische Funktion wird durch die für alle z konvergente Reihe definiert

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma, z) &= 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma+k)} \frac{z^k}{k!}, \end{aligned}$$

und ist gleich der verallgemeinerten hypergeometrischen Funktion ${}_1F_1(\alpha; \gamma; z)$.

Durch Koeffizientenvergleich überprüft man leicht, dass sie folgende Differentialgleichung erfüllt

$$z u'' + (\gamma - z) u' - \alpha u = 0.$$

Mit Hilfe der Laplaceschen Methode lassen sich Integraldarstellungen finden.
Wenn n eine positive ganze Zahl ist, reduziert sich

$$F(-n, \gamma, z) = \frac{1}{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)} z^{1-\gamma} e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^{\gamma+n-1}),$$

auf obiges Polynom. Mit einer positiven ganzen Zahl m gilt weiters

$$F(-n, m, z) = \frac{(-1)^{m-1}}{m(m+1)\cdots(m+n-1)} e^z \frac{d^{m+n-1}}{dz^{m+n-1}} (e^{-z} z^n).$$

Für $0 \leq m \leq n$ stimmt $F(-n, m, z)$ bis auf einen Faktor mit den verallgemeinerten Laguerreschen Polynomen überein

$$\begin{aligned} L_n^m(z) &= (-1)^m \frac{(n!)^2}{m!(n-m)!} F(-(n-m), m+1, z) \\ &= \frac{n!}{(n-m)!} e^z \frac{d^n}{dz^n} e^{-z} z^{n-m} \\ &= (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^z z^{-m} \frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}} e^{-z} z^n. \end{aligned}$$

Für $m = 0$ gehen diese in die Laguerreschen Polynome $L_n(z)$ über

$$L_n(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n).$$

A.3 Das Integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx$

Wir lösen das Integral mit dem Cauchyschen Integralsatz. Dazu regularisieren wir zuerst den Nenner

$$\frac{1}{x^2} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{x^2 + \delta^2}.$$

Da

$$\frac{1}{x^2 + \delta^2} = \frac{1}{2i\delta} \left(\frac{1}{x - i\delta} - \frac{1}{x + i\delta} \right),$$

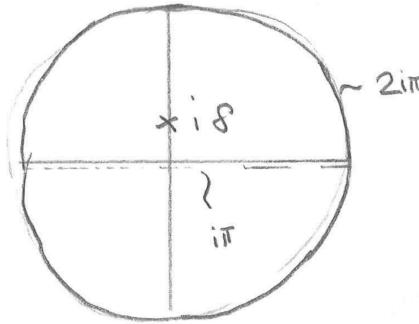
gilt folgt daraus

$$\begin{aligned} \frac{\sin^2 x}{x^2} &= \lim_{\delta \rightarrow 0} i \frac{(e^{ix} - e^{-ix})^2}{8\delta} \left(\frac{1}{x - i\delta} - \frac{1}{x + i\delta} \right) \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} i \frac{e^{2ix} + e^{-2ix} - 2}{8\delta} \left(\frac{1}{x - i\delta} - \frac{1}{x + i\delta} \right). \end{aligned}$$

Für die Integrale ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{i}{8\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2ix}}{x - i\delta} dx &= 2\pi i \left(\frac{i}{8\delta} e^{-2\delta} \right) = -\frac{\pi}{4\delta} e^{-2\delta}, \\ -\frac{i}{8\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2ix}}{x + i\delta} dx &= 0, \quad (\text{kein Pol umschlossen}) \\ \frac{i}{8\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2ix}}{x - i\delta} dx &= 0, \quad (\text{kein Pol umschlossen}) \\ -\frac{i}{8\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2ix}}{x + i\delta} dx &= -\frac{\pi}{4\delta} e^{-2\delta}. \end{aligned}$$

Ohne Rechnung ist graphisch sofort einsichtig



$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x - i\delta} = i\pi,$$

und analog

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x + i\delta} = -i\pi,$$

und damit

$$\begin{aligned} -\frac{i}{4\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x - i\delta} &= \frac{\pi}{4\delta}, \\ \frac{i}{4\delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{x + i\delta} &= \frac{\pi}{4\delta}, \end{aligned}$$

und somit folgt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\pi}{2\delta} (1 - e^{-2\delta}),$$

und nach Durchführung des Limes letztlich

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi}.$$

Das kann man auch für eine Darstellung der Delta-Distribution verwenden

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} dx &= \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x/\alpha) \frac{\sin^2 x}{x^2} dx \\ &= f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx \\ &= f(0) \pi. \end{aligned}$$

Somit folgt die Darstellung

$$\boxed{\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x)}. \quad (\text{A.2})$$

A.4 Das Integral $\int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}}$

Zur Lösung des Integrals verwenden wir die bekannte Entwicklung

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_-^l}{r_+^{l+1}} Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2),$$

wobei r_- (r_+) der kleinere (größere) Radius von r_1 und r_2 ist. Wir finden somit

$$\begin{aligned} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}} &= \\ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} \int_0^{\infty} dr_1 r_1^2 \int_0^{\infty} dr_2 r_2^2 e^{-2Z(r_1+r_2)} \frac{r_-^l}{r_+^{l+1}} &\int_{[4\pi]} d\Omega_1 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2). \end{aligned}$$

Wir verwenden $1 = \sqrt{4\pi} Y_{00}$ um die Oberflächenintegrale zu lösen

$$\begin{aligned} \int_{[4\pi]} d\Omega_1 Y_{lm}^*(\Omega_1) &= \sqrt{4\pi} \int_{[4\pi]} d\Omega_1 Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{00} = \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0}, \\ \int_{[4\pi]} d\Omega_2 Y_{lm}(\Omega_2) &= \sqrt{4\pi} \int_{[4\pi]} d\Omega_2 Y_{00}^* Y_{lm}(\Omega_2) = \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0}, \end{aligned}$$

womit wir erhalten

$$\begin{aligned} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}} &= (4\pi)^2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_>} \\ &= 2(4\pi)^2 \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-2Zr_1} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 e^{-2Zr_2}. \end{aligned}$$

Der zusätzliche Faktor 2 folgt aus Symmetriegründen anstatt der r_2 -Integration von r_1 bis ∞ .

Zur Lösung benötigen wir folgende drei Integrale

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(A, B; \lambda) &= \int_A^B dr r e^{-\lambda r} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \lambda} \int_A^B dr e^{-\lambda r} \\ &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{e^{-\lambda B} - e^{-\lambda A}}{\lambda} \\ &= -e^{-\lambda B} \left(\frac{B}{\lambda} + \frac{1}{\lambda^2} \right) + e^{-\lambda A} \left(\frac{A}{\lambda} + \frac{1}{\lambda^2} \right), \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2(A, B; \lambda) &= \int_A^B dr r^2 e^{-\lambda r} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{I}_1(A, B; \lambda) \\ &= -e^{-\lambda B} \left(\frac{B^2}{\lambda} + \frac{2B}{\lambda^2} + \frac{2}{\lambda^3} \right) + e^{-\lambda A} \left(\frac{A^2}{\lambda} + \frac{2A}{\lambda^2} + \frac{2}{\lambda^3} \right), \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3(A, B; \lambda) &= \int_A^B dr r^3 e^{-\lambda r} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \lambda} \mathcal{I}_2(A, B; \lambda) \\ &= -e^{-\lambda B} \left(\frac{B^3}{\lambda} + \frac{3B^2}{\lambda^2} + \frac{6B}{\lambda^3} + \frac{6}{\lambda^4} \right) + e^{-\lambda A} \left(\frac{A^3}{\lambda} + \frac{3A^2}{\lambda^2} + \frac{6A}{\lambda^3} + \frac{6}{\lambda^4} \right). \end{aligned}$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned}
 (4\pi)^2 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{>}} &= 2(4\pi)^2 \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-2Zr_1} \left[\frac{2}{(2Z)^3} - e^{-2Zr_1} \left(\frac{r_1^2}{2Z} + \frac{2r_1}{(2Z)^2} + \frac{2}{(2Z)^3} \right) \right] \\
 &= (4\pi)^2 \frac{4}{(2Z)^3} \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-2Zr_1} - (4\pi)^2 \frac{1}{Z} \int_0^\infty dr_1 r_1^3 e^{-4Zr_1} \\
 &\quad - (4\pi)^2 \frac{4}{(2Z)^2} \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-4Zr_1} - (4\pi)^2 \frac{4}{(2Z)^3} \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-4Zr_1} \\
 &= \frac{5\pi^2}{8Z^5}.
 \end{aligned}$$

Für die Energiekorrektur zur ersten Ordnung bei Helium und heliumartigen Ionen erhalten wir somit

$$\begin{aligned}
 E_0^{(1)} &= \frac{Z^6}{\pi^2} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}} \\
 &= \frac{5Z}{8}.
 \end{aligned}$$

A.5 Radius einer „leicht“ elliptischen Form

Wir leiten die Ellipsengleichung in Polarkoordinaten bzgl. des Mittelpunktes her. Aus der Ellipsengleichung in kartesischen Koordinaten

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1,$$

und der Parametrisierung der kartesischen in Polarkoordinaten $x = r \cos \varphi$ und $y = r \sin \varphi$ folgt

$$\frac{r^2 \cos^2 \varphi}{a^2} + \frac{r^2 \sin^2 \varphi}{b^2} = 1,$$

und somit

$$r = \frac{ab}{\sqrt{a^2 \sin^2 \varphi + b^2 \cos^2 \varphi}},$$

und mit $\varepsilon = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$ letztlich

$$r = \frac{b}{\sqrt{1 - \varepsilon^2 \cos^2 \varphi}}.$$

Für eine „leicht“ elliptische Form ist $\varepsilon \simeq 0$. Somit entwickeln wir nach ε um 0

$$\begin{aligned} r &\simeq \frac{b}{1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \cos^2 \varphi} \\ &\simeq b + \frac{b}{2} \varepsilon^2 \cos^2 \varphi. \end{aligned}$$

Der Winkel φ startet auf einer großen Halbachse und wächst im Gegenuhrzeigersinn. Nun führen wir den Winkel $\varphi' = \varphi + \pi/2$ ein, der bei gleicher Laufrichtung auf einer kleinen Halbachse startet. Da

$$\begin{aligned} \cos^2 \varphi &= \cos^2 \left(\varphi' - \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \sin^2 \varphi' \\ &= 1 - \cos^2 \varphi', \end{aligned}$$

erhalten wir

$$r \simeq b + \frac{b}{2} \varepsilon^2 - \frac{b}{2} \varepsilon^2 \cos^2 \varphi',$$

und da aus $\varepsilon = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$ folgt $a = \frac{b}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} \simeq b + \frac{b}{2} \varepsilon^2$ letztlich

$$\begin{aligned} r &\simeq a - \frac{b}{2} \varepsilon^2 \cos^2 \varphi' \\ &\simeq a - \frac{a}{2} \varepsilon^2 \cos^2 \varphi'. \end{aligned}$$

Für ein „leichtes“ Rotationsellipsoid gilt somit

$$r = C_1 + C_2 \cos^2 \vartheta,$$

wobei ϑ der Polarwinkel von der Symmetriearchse ist und C_1 und C_2 Konstante. Da (siehe Gleichung (C.2))

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \vartheta),$$

ist, können wir für den Radius eines „leichten“ Rotationsellipsoids schreiben

$$r = A + B Y_{20},$$

mit Konstanten A und B .

B

Klassische Physik und Elektrodynamik

B.1 Zweikörper-Problem

Mit dem Abstandsvektor

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 ,$$

und dem Schwerpunkt

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} ,$$

folgt

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_1 &= \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r} , \\ \mathbf{r}_2 &= \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r} .\end{aligned}$$

Für die kinetische Energie erhalten wir

$$\begin{aligned}E_{kin} &= \frac{m_1}{2} \dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2} \dot{\mathbf{r}}_2^2 \\ &= \frac{m_1 + m_2}{2} \dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{r}}^2 .\end{aligned}$$

Das ergibt den Gesamtimpuls

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \frac{\partial E_{kin}}{\partial \dot{\mathbf{R}}} \\ &= (m_1 + m_2) \dot{\mathbf{R}} \\ &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 ,\end{aligned}$$

Relativimpuls

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &= \frac{\partial E_{kin}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \\ &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{r}} \\ &= \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} ,\end{aligned}$$

mit der Gesamtmasse $M = m_1 + m_2$ und der reduzierten Masse $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Die kinetische Energie in Impulsen ausgedrückt lautet

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} \\ &= \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \end{aligned}$$

B.2 Klassische Multipolmomente

Das elektrostatische Potential $\varphi(\mathbf{r})$, das von einer Ladungsdichte $\rho(\mathbf{r}')$ erzeugt wird, ist bekanntlich

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r'.$$

Für die übliche Multipolentwicklung, also eine Taylorreihe um $\mathbf{r}' = \mathbf{0}$, geht man wie folgt vor. Wir verwenden Einsteins Summenkonvention (über gleiche Indizes wird summiert) und verwenden die Komponenten x_i, x'_i für \mathbf{r} und \mathbf{r}' . Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial x'_i} f(x_i - x'_i) \Big|_{x'_i=0} = -\frac{\partial}{\partial x_i} f(x_i),$$

und somit

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \int \rho(\mathbf{r}') d^3 r' - \int \rho(\mathbf{r}') x'_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{r} d^3 r' + \frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r}') x'_i x'_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} d^3 r' + \dots.$$

Mit

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{r} = -\frac{x_i}{r^3}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} = \frac{3x_i x_j - \delta_{ij} r^2}{r^5},$$

ergibt das

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \int \rho(\mathbf{r}') d^3 r' + \frac{x_i}{r^3} \int \rho(\mathbf{r}') x'_i d^3 r' + \frac{1}{2} \frac{x_i x_j}{r^5} \int \rho(\mathbf{r}') \left(3x'_i x'_j - \delta_{ij} r'^2 \right) d^3 r' + \dots.$$

Mit dem elektrischen

$$\begin{aligned} \text{Monopol} \quad q &= \int \rho(\mathbf{r}) d^3 r, \\ \text{Dipol} \quad \mathbf{p} &= \int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r} d^3 r, \\ \text{Quadropol} \quad Q_{ij} &= \int \rho(\mathbf{r}) \left(3x_i x_j - \delta_{ij} r^2 \right) d^3 r, \end{aligned}$$

(Q_{ij} hat 5 unabhängige Komponenten, da es ein symmetrischer Tensor 2. Stufe (6 Komponenten) mit $Q_{ii} = 0$ (-1 Komponente) ist) kann man das Potential in der Form

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{q}{r} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \frac{1}{2} \frac{Q_{ij} x_i x_j}{r^5} + \dots,$$

schreiben. Für große Abstände r verlieren die höheren Ordnungen rasch an Bedeutung.

Analog kann man im magnetischen Fall vorgehen. Anstatt $\rho(\mathbf{r})$ ist nun eine Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ die Quelle des Vektorpotentials $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ anstatt von $\varphi(\mathbf{r})$. Da kein Monopol existiert ist ein Dipol das führende magnetische Multipolmoment.

Abschließend wollen wir noch ergänzend eine alternative Herleitung des Quadrupolmoments angeben. Wir nehmen an, dass eine Ladungsverteilung um die z -Achse rotiert (so wie die Kernladung um I rotiert). Wie auch immer die Ladungsverteilung aussieht, im zeitlichen Mittel erscheint sie zylindersymmetrisch um die z -Achse. Außerhalb der Ladungsverteilung gilt für das Potential $\Delta\varphi = 0$, somit können wir φ nach Legendre-Polynomen entwickeln

$$\varphi(r, \vartheta) = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{r^n} P_n(\cos \vartheta). \quad (\text{B.1})$$

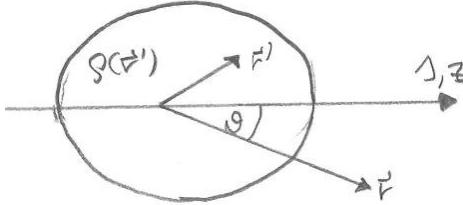
Mit dem Laplace-Operator in sphärischen Koordinaten (siehe Appendix A.1), der Eigenwertgleichung für $\hat{\mathbf{L}}^2$ (siehe Appendix C.1) und der Proportionalität $P_n(\cos \vartheta) \propto Y_{n0}(\vartheta, \phi)$ zeigt man leicht, dass jeder Term der Reihe aus Gleichung (B.1) die Laplace-Gleichung erfüllt.

Der erste Term aus Gleichung (B.1) ist das gewöhnliche Coulomb-Potential. Der nächste Term, der permanente Dipol, verschwindet für Kerne im statischen Fall aufgrund von Paritätsüberlegungen, wie bereits besprochen. Der folgende Term, nämlich $2a_2 = Q$, ist das Quadrupolmoment.

Aus der Definition der Legendre-Polynome (siehe Appendix C.1) kann man ersehen, dass für $\vartheta = 0$ alle $P_n(1) = 1$ sind. Entlang der z -Achse ergibt Gleichung (B.1) somit

$$\varphi(r, 0) = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{z^n} \quad (\text{B.2})$$

Kann man nun φ entlang der z -Achse berechnen, mit welcher Methode auch immer, und in eine



konvergente Reihe nach ganzzahligen Potenzen von z entwickeln, erhält man die Koeffizienten a_n durch Koeffizientenvergleich. Wir interessieren uns nur für a_2 . Vom Coulombschen-Gesetz erhalten wir

$$d\varphi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r}') dV'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Mit dem Einheitsvektor $\mathbf{e}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}$ erhalten wir

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = (r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')^{1/2} = r \left\{ 1 - \underbrace{\left(\frac{2\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}'}{r} - \frac{r'^2}{r^2} \right)}_{\chi} \right\}^{1/2},$$

$$\frac{1}{\sqrt{1-\chi}} = 1 + \frac{1}{2}\chi + \frac{3}{8}\chi^2 + \dots, \quad \chi < 1,$$

somit

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \left\{ 1 + \frac{\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}'}{r} + \frac{1}{r^2} \left(-\frac{r'^2}{2} + \frac{3}{8} 4(\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}')^2 \right) + \dots \right\}, \quad \frac{r'}{r} < 1.$$

Für den Vergleich mit dem Term a_2 in Gleichung (B.2) interessieren uns nur die zwei Terme proportional zu $1/r^3$.

$$d\varphi^{(2)}(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r}') dV'}{2r^3} \left(3(\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}')^2 - \mathbf{r}'^2 \right),$$

und wenn r entlang der z -Achse liegt

$$\varphi^{(2)}(z) = \frac{1}{2z^3} \int \rho(\mathbf{r}') \left(3z'^2 - \mathbf{r}'^2 \right) dV'.$$

Der Vergleich mit Gleichung (B.2) liefert ($Q = 2a_2$)

$$Q = \int \rho(\mathbf{r}') \left(3z'^2 - \mathbf{r}'^2 \right) dV'.$$

B.3 Quadrupolmoment eines Ellipsoids

Ein Rotationsellipsoid ist ein Spezialfall eines Ellipsoids. Letztere sind 3-dimensionale Entsprechungen der Ellipse und durch

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, \quad \text{mit } a, b, c > 1,$$

beschrieben. Solch ein Ellipsoid ist punktsymmetrisch um den Punkt $(0, 0, 0)$, hat Halbachsen a, b, c und die 6 Scheitel $(\pm a, 0, 0)$, $(0, \pm b, 0)$, $(0, 0, \pm c)$. Alle Ellipsoide sind symmetrisch zu den 3 Koordinatenebenen.

Stimmen 2 Halbachsen überein, ist das Ellipsoid ein Rotationsellipsoid welches zusätzlich eine Rotationssymmetrie bzgl. der Rotationsachse hat. Die Transformation

$$x = x' a, \quad y = y' b, \quad z = z' c,$$

führt die Integration über das Ellipsoid über in eine Integration über das Volumen einer Kugel vom Radius 1

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = 1.$$

Für das Integral einer beliebigen Funktion $f(x, y, z)$ über das Volumen des Ellipsoids gilt somit (mit der Heaviside Θ Funktion)

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Theta\left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} - \frac{z^2}{c^2}\right) f(x, y, z) \\ &= abc \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \Theta\left(1 - x'^2 - y'^2 - z'^2\right) f(ax', by', cz') . \end{aligned}$$

Für das Volumen des Ellipsoids setzen wir $f(x, y, z) = 1$ und erhalten sofort

$$V = \frac{4\pi}{3} abc .$$

Wir betrachten ein Ellipsoid mit homogener Ladungsverteilung $\rho = \frac{Ze}{V}$. Für die Quadrupolmomente

$$Q_{ij} = \int_V \rho (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}) dV ,$$

brauchen wir nur das Integral

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \Theta\left(1 - x'^2 - y'^2 - z'^2\right) x'_i x'_j \\ &= \frac{1}{3} \delta_{ij} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \Theta\left(1 - x'^2 - y'^2 - z'^2\right) r'^2 \\ &= \frac{4\pi}{15} \delta_{ij} , \end{aligned}$$

und

$$\rho = \frac{3Ze}{4\pi} \frac{1}{abc} ,$$

und erhalten damit

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= 0 , \quad \text{für } i \neq j , \\ Q_{xx} &= abc (3a^2 - a^2 - b^2 - c^2) \frac{4\pi}{15} \frac{3Ze}{4\pi} \frac{1}{abc} \\ &= \frac{Ze}{5} (2a^2 - b^2 - c^2) , \\ Q_{yy} &= \frac{Ze}{5} (2b^2 - a^2 - c^2) , \\ Q_{zz} &= \frac{Ze}{5} (2c^2 - a^2 - b^2) . \end{aligned}$$

Wir erhalten daraus unmittelbar die Quadrupolmomente für ein Rotationsellipsoid. Wählen wir $a = b$, was die z -Achse zur Rotationsachse macht, erhalten wir ($Q := Q_{zz}$)

$$Q = \frac{2Ze}{5} (c^2 - a^2).$$

Wir sehen ein positives Quadrupolmoment entspricht einer größeren Ausdehnung in Richtung der Symmetriearchse während ein negatives Quadrupolmoment einer kleineren Ausdehnung in Richtung der Symmetriearchse entspricht. Wie in Kapitel 8.4.1 allgemeiner gezeigt, gilt auch hier für ein verschwindendes Quadrupolmoment $a = b = c$, was einer homogen geladenen Kugel entspricht – also kugelsymmetrische Ladungsverteilung heißt $Q = 0$. Wie in Kapitel 8.4.1 erwähnt, ist es üblich bei der quantenmechanischen Definition des Quadrupolmoments den Faktor e wegzulassen.

B.4 Potentielle Energie einer gleichförmig geladenen Kugel

Die potentielle Energie einer gleichförmig geladenen Kugel mit Radius R lautet

$$U = \frac{1}{2} \int_{V_K} dV_1 \int_{V_K} dV_2 \frac{\rho^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

wobei V_K das Volumen der Kugel bezeichnet. Für eine Gesamtladung Ze ergibt sich für ρ

$$\rho = \frac{3Ze}{4\pi R^3}.$$

Wir ermitteln das Integral über das Kugelvolumen

$$\begin{aligned} \int_{V_K} dV_1 \int_{V_K} dV_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} &= \int_0^R dr_1 r_1^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_1 \int_0^R dr_2 r_2^2 \int_{[4\pi]} d\Omega_2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2) \\ &= (4\pi)^2 \int_0^R dr_1 r_1^2 \int_0^R dr_2 r_2^2 \frac{1}{r_>} , \end{aligned}$$

wobei wir analog zu *Appendix A.4* wieder $1 = \sqrt{4\pi} Y_{00}$ sowie die Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen verwendet haben. Weiters finden wir

$$\begin{aligned} (4\pi)^2 \int_0^R dr_1 r_1^2 \int_0^R dr_2 r_2^2 \frac{1}{r_>} &= 2(4\pi)^2 \int_0^R dr_1 r_1^2 \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 \frac{1}{r_1} \\ &= 2(4\pi)^2 \int_0^R dr_1 \frac{r_1^4}{3} \\ &= 2(4\pi)^2 \frac{R^5}{15}. \end{aligned}$$

Der zusätzliche Faktor 2 folgt aus Symmetriegründen anstatt der r_2 Integration von r_1 bis R . Für die potentielle Energie der Kugel erhalten wir somit

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \frac{(3Ze)^2}{(4\pi R^3)^2} 2 (4\pi)^2 \frac{R^5}{15} \\ &= \frac{3}{5} \frac{(Ze)^2}{R}. \end{aligned}$$

C

Quantenmechanische Grundlagen

C.1 Drehimpulsoperator in Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten

Der Bahndrehimpulsoperator in der Ortsdarstellung lautet

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla .$$

In Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi , \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi , \\ z &= r \cos \vartheta , \end{aligned}$$

folgt nach kurzer Rechnung

$$\begin{aligned} \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} , \\ \hat{L}_{\pm} &= \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) , \end{aligned}$$

und für das Betragsquadrat

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 &= \hat{L}_z^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \\ &= \hat{L}_z^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar \hat{L}_z \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) \right] . \end{aligned}$$

Das entspricht bis auf einen Faktor dem Winkelanteil des Laplace-Operators.

C.1.1 Eigenfunktionen des Drehimpulses

Man kann die Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z wie folgt separieren

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\vartheta) .$$

Hierbei sind Φ_m die normierten Eigenfunktionen von \hat{L}_z

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},$$

und somit ist

$$\begin{aligned}\hat{L}_z \Phi_m &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_m \\ &= m\hbar \Phi_m.\end{aligned}$$

Damit die Eigenfunktion eindeutig ist, muss sie 2π periodisch sein. Daraus folgt

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Die Norm lautet

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}.$$

Die Funktionen $\Theta_{lm}(\vartheta)$ sind keine Eigenfunktionen eines Drehimpulsoperators, sie sind orthogonal in l nicht jedoch in m . Die Eigenwertgleichung für $\hat{\mathbf{L}}^2$ lautet

$$\left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right] Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = 0.$$

Endlichkeit und Eindeutigkeit verlangen $l \geq |m|$. Es gilt

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{\frac{(m+|m|)}{2}} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi},$$

im Speziellen

$$Y_{l0}(\vartheta, \varphi) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta).$$

Es gilt die Orthonormalität

$$\int_{[4\pi]} d\Omega Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

wobei $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ ist. Es gilt weiters

$$Y_{lm}^* = (-1)^{l-m} Y_{l,-m}.$$

Die Legendre-Polynome P_l sind folgendermaßen definiert

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{(d \cos \vartheta)^l} (\cos^2 \vartheta - 1)^l,$$

und die zugeordneten Legendre-Polynome

$$\begin{aligned} P_l^m(\cos \vartheta) &= \sin^m \vartheta \frac{d^m P_l(\cos \vartheta)}{(d \cos \vartheta)^m} \\ &= \frac{1}{2^l l!} \sin^m \vartheta \frac{d^{l+m}}{(d \cos \vartheta)^{l+m}} (\cos^2 \vartheta - 1)^l. \end{aligned}$$

Somit erhält man

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \frac{i^l}{2^l l!} (-1)^{\frac{(m+|m|)}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\varphi} \sin^{|m|} \vartheta \frac{d^{l+|m|}}{(d \cos \vartheta)^{l+|m|}} (\cos^2 \vartheta - 1)^l.$$

(C.1)

Die ersten Kugelflächenfunktionen lauten explizit

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_{10} &= i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \\ Y_{1,\pm 1} &= \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \vartheta), \\ Y_{2,\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{2,\pm 2} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}, \\ Y_{30} &= -i \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \cos \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 3), \\ Y_{3,\pm 1} &= \pm i \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{3,\pm 2} &= -i \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}, \\ Y_{3,\pm 3} &= \pm i \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}. \end{aligned} \tag{C.2}$$

C.2 Entwicklung nach Potenzen von 1/c der Dirac-Gleichung für ein Elektron in einem äußeren Feld

Wir nehmen die Dirac-Gleichung als gegeben an und besprechen nur die Entwicklung nach Potenzen von $1/c$. Bekanntermaßen verschwinden im nichtrelativistischen Grenzfall die zwei

Komponenten χ des Dirac-Spinors¹ $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$. Für kleine Elektronengeschwindigkeiten gilt somit $\chi \ll \varphi$.

Die Dirac-Gleichung für ein Elektron mit Ladung $-e$ im äußeren Feld lautet²

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta m_e c^2 - e \Phi \right] \psi .$$

In der relativistischen Energie steckt auch die Ruhemasse $m_e c^2$ welche abgetrennt werden muss

$$\psi = \psi' e^{-im_e c^2 t / \hbar} .$$

Für die Funktion ψ' gilt nun

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + m_e c^2 \right) \psi' = \left[c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta m_e c^2 - e \Phi \right] \psi' .$$

Mit $\psi' = \begin{pmatrix} \varphi' \\ \chi' \end{pmatrix}$ erhalten wir unter Verwendung von

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} , \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} ,$$

die Gleichungen

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e \Phi \right) \varphi' = c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi' , \quad (\text{C.3})$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e \Phi + 2m_e c^2 \right) \chi' = c \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi' . \quad (\text{C.4})$$

Im Folgenden werden wir der Einfachheit halber immer die Striche weglassen, da wir nur mehr die gestrichenen Variablen betrachten. In erster Ordnung vernachlässigen wir Terme c^0 und erhalten aus Gleichung (C.4)

$$\chi = \frac{1}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi . \quad (\text{C.5})$$

Wir sehen $\chi \sim \varphi/c$ und setzen obigen Ausdruck in Gleichung (C.3) ein

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e \Phi \right) \varphi = \frac{1}{2m_e} \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 \varphi .$$

¹Man darf χ des Dirac-Spinors hier keinesfalls mit der Spineigenfunktion aus Gleichung (2.16) verwechseln. Das kann jedoch kein Problem darstellen, da in diesem Appendix ausschliesslich χ des Dirac-Spinors vorkommt, während im Rest des Skriptums stets nur die entsprechende Spineigenfunktion vorkommt.

²Der Übersichtlichkeit der Ausdrücke halber werden wir in diesem Appendix das Operator-Zeichen $\hat{}$ sowohl auf den Pauli Matrizen als auch den beiden Dirac Matrizen $\boldsymbol{\alpha}$ und β weglassen.

Es gilt

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b},$$

$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ verschwindet in unserem Fall nicht, da $\hat{\mathbf{p}}$ und \mathbf{A} nicht kommutieren. Der nichtverschwindende Teil des Kreuzprodukts ist

$$\begin{aligned} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) &= \epsilon_{ijk} \left(\hat{p}_j \frac{e}{c} A_k \right) \\ &= -\frac{i\hbar e}{c} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir mit $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}$

$$\left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B},$$

und letztlich die **Pauli-Gleichung** für φ

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\Phi + \frac{e\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \varphi. \quad (\text{C.6})$$

Aus dem letzten Term ist ersichtlich, dass ein Elektron zur ersten Ordnung in $1/c$ ein Dipolmoment

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{e}{m_e c} \hat{\mathbf{s}},$$

hat. Das gyromagnetische Verhältnis $\frac{e}{m_e c}$ ist dabei doppelt so groß wie beim Bahndrehimpuls.

Die Dichte ist³ $\rho = \psi^* \psi = \varphi^* \varphi + \chi^* \chi$. In erster Ordnung ist der zweite Summand wegzulassen und es bleibt $\rho = |\varphi|^2$, wie bei der Schrödinger-Gleichung. Die Stromdichte der Dirac-Gleichung ist

$$\mathbf{j} = c \psi^* \boldsymbol{\alpha} \psi = c (\varphi^* \boldsymbol{\sigma} \chi + \chi^* \boldsymbol{\sigma} \varphi).$$

Mit Gleichung (C.5)

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(-i\hbar \boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi, \\ \chi^* &= \frac{1}{2m_e c} \left(i\hbar \boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \varphi^* \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned}$$

und den Relationen

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}) \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{a} + i\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{a} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}) = \mathbf{a} + i\mathbf{a} \times \boldsymbol{\sigma},$$

³Wir verwenden hier Matrizenmultiplikation. Die Spalten-Größen ψ , φ und χ werden entsprechend als Zeilen geschrieben wenn sie links bei einem Matrixprodukt erscheinen. Z.B. die Dichte hier ergibt sich als Matrixprodukt der Zeile ψ^* mit der Spalte ψ .

ergibt sich sofort das Resultat

$$\boxed{\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m_e} (\varphi \nabla \varphi^* - \varphi^* \nabla \varphi) + \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \varphi^* \varphi + \frac{\hbar}{2m_e} \nabla \times (\varphi^* \boldsymbol{\sigma} \varphi).} \quad (\text{C.7})$$

Als nächstes betrachten wir die Entwicklung bis zur Ordnung $1/c^2$ und betrachten nur ein äußeres elektrisches Feld ($\mathbf{A} = 0$). Für die Dichte gilt nun

$$\rho = |\varphi|^2 + |\chi|^2 = |\varphi|^2 + \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} |\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi|^2.$$

Dieser Ausdruck unterscheidet sich von dem der Schrödinger-Gleichung. Um eine analoge Gleichung zu finden benötigen wir statt φ eine andere (zweikomponentige) Funktion φ_{Schr} für die

$$\frac{d}{dt} \int |\varphi_{Schr}|^2 dV = 0,$$

gilt. Wir schreiben

$$\int \varphi_{Schr}^* \varphi_{Schr} d^3x = \int \left[\varphi^* \varphi + \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} (\nabla \varphi^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi) \right] d^3x.$$

Partielle Integration liefert

$$\begin{aligned} \int (\nabla \varphi^* \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi) d^3x &= - \int \varphi^* (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \varphi d^3x \\ &= - \int \varphi^* \Delta \varphi d^3x, \end{aligned}$$

und analog mit φ und φ^* vertauscht. Somit erhalten wir

$$\int \varphi_{Schr}^* \varphi_{Schr} d^3x = \int \left[\varphi^* \varphi - \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} (\varphi^* \Delta \varphi + \varphi \Delta \varphi^*) \right] d^3x,$$

und lesen daraus ab

$$\varphi_{Schr} = \left(1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right) \varphi, \quad \varphi = \left(1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right) \varphi_{Schr}. \quad (\text{C.8})$$

In der nächsten Näherung erhalten wir aus Gleichung (C.4) und (C.5)

$$\chi = \frac{1}{2m_e c} \left[1 - \frac{1}{2m_e c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e \Phi \right) \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \varphi.$$

Setzen wir dies in Gleichung (C.3) und verwenden (C.8)

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e \Phi \right) \left(1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right) \varphi_{Schr} &= \\ \frac{1}{2m_e} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \left[1 - \frac{1}{2m_e c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e \Phi \right) \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \left(1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right) \varphi_{Schr}. \end{aligned}$$

Auflösen und beibehalten der Terme bis Ordnung $1/c^2$ gibt

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{Schr}}{\partial t} = \left\{ -e\Phi - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2c^2} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{e}{8m_e^2c^2} [\Phi \hat{\mathbf{p}}^2 - 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})] + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{16m_e^3c^2} \right\} \varphi_{Schr} .$$

Wir verwenden Born-Iteration für den zweiten Term auf der rechten Seite und behalten wieder nur Terme bis $1/c^2$ und erhalten

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{Schr}}{\partial t} = \left\{ -e\Phi + \frac{e}{8m_e^2c^2} [\hat{\mathbf{p}}^2\Phi + \Phi \hat{\mathbf{p}}^2 - 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})] + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_e^3c^2} \right\} \varphi_{Schr} .$$

Durch Vergleich mit

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{Schr}}{\partial t} = \hat{H} \varphi_{Schr} ,$$

ergibt sich der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\Phi - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_e^3c^2} + \frac{e}{4m_e^2c^2} \left[\frac{1}{2} (\hat{\mathbf{p}}^2\Phi + \Phi \hat{\mathbf{p}}^2) - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \right] .$$

Mit $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ und den Umformungen

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \Phi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) &= -i\hbar (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\Phi)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \Phi \hat{\mathbf{p}}^2 \\ &= i\hbar (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \Phi \hat{\mathbf{p}}^2 , \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2\Phi + \Phi \hat{\mathbf{p}}^2 &= \hat{\mathbf{p}} \cdot (\hat{\mathbf{p}}\Phi) + \hat{\mathbf{p}} \cdot \Phi \hat{\mathbf{p}} - \Phi \hat{\mathbf{p}}^2 \\ &= -\hbar^2 \Delta\Phi + 2i\hbar \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{p}} , \end{aligned}$$

folgt der endgültige Ausdruck für den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\Phi - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_e^3c^2} + \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}} + \frac{e\hbar^2}{8m_e^2c^2} \nabla \mathbf{E} .$$

(C.9)

C.3 Zeitunabhängige Störungstheorie

Der Hamilton-Operator soll die Gestalt haben

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} ,$$

mit dem ungestörten Operator \hat{H}_0 und kleinen Störung \hat{V} . \hat{H}_0 und \hat{V} sollen nicht explizit von der Zeit abhängen. Wir betrachten ein diskretes Spektrum. Es sei

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)} ,$$

und $\psi^{(0)}$ und $E^{(0)}$ sollen bekannt sein. Wir suchen Näherungslösungen von

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi , \quad (\text{C.10})$$

d.h. Näherungsausdrücke für die Eigenfunktionen ψ_n und Eigenwerte E_n von \hat{H} . Vorerst betrachten wir den Fall, dass alle Eigenwerte von \hat{H} nicht entartet sind und dass es nur ein diskretes Energiespektrum gibt. Wir entwickeln

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)} ,$$

und eingesetzt in Gleichung (C.10) ergibt sich

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E \psi_m^{(0)} .$$

Multiplikation mit $\psi_k^{(0)*}$ und Integration liefert aufgrund der Orthonormalität

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m , \quad (\text{C.11})$$

mit

$$V_{km} = \int d^3r \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} .$$

Wir setzen die Reihen

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots , \\ c_m &= c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots , \end{aligned}$$

an, wobei $E^{(1)}$ und $c_m^{(1)}$ von der Größenordnung wie \hat{V} sind, $E^{(2)}$ und $c_m^{(2)}$ von zweiter Ordnung (mit \hat{V} von erster Ordnung) usw.

Zur Berechnung der Korrektur zum n -ten Eigenwert und Eigenfunktion setzten wir $c_m^{(0)} = \delta_{mn}$ in Gleichung (C.11) ein und behalten nur Terme erster Ordnung

$$(E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}, c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)})$$

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int d^3r \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} \quad \text{für } k = n . \quad (\text{C.12})$$

Aus Gleichung (C.11) erhält man weiters

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} , \quad k \neq 0 ,$$

$c_n^{(1)}$ bleibt willkürlich und wird so gewählt, dass $\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ bis zu Gliedern erster Ordnung normiert ist. Es zeigt sich, dass $c_n^{(1)} = 0$ gewählt werden muss. Somit erhalten wir

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} .$$

Somit ist $\psi_n^{(1)}$ orthogonal zu $\psi_n^{(0)}$ und $|\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}|^2$ von zweiter Ordnung.

Es zeigt sich nun die Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Methode, es muss erfüllt sein

$$c_k^{(1)} \ll 1 \quad \text{und somit} \quad |V_{mn}|^2 \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}| .$$

Analog geht man für die Korrekturen höherer Ordnung vor, was wir hier nicht durchführen wollen.

Nun betrachten wir den Fall mit **entarteten Eigenwerten** von \hat{H}_0 . Die s Eigenfunktionen zu $E_n^{(0)}$ bezeichnen wir $\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \dots$ der Entartungsgrad des n -ten Niveaus ist also s . Man kann auch s unabhängige Linearkombinationen dieser Funktionen wählen. Diese Wahl ist willkürlich für das ungestörte Problem. Bei Anwesenheit einer Störung ändert sich das wie folgt. Man wählt beliebig $\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \dots$ Die richtigen Funktionen sind Linearkombinationen der Gestalt $c_n^{(0)}\psi_n^{(0)} + c_{n'}^{(0)}\psi_{n'}^{(0)} + \dots$ Nun berechnen wir diese Koeffizienten. Wir setzen in Gleichung (C.11) nun $k = n, n', \dots$ und setzen $E = E_n^{(0)} + E^{(1)}$. Weiters nehmen wir $c_n = c_n^{(0)}, c_{n'} = c_{n'}^{(0)}, \dots$ und $c_m = 0$ für $m \neq n, n', \dots$ Wir erhalten

$$E^{(1)}c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'}c_{n'}^{(0)} ,$$

oder

$$\sum_{n'} (V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0 , \quad (\text{C.13})$$

n und n' durchlaufen alle Werte die zur Nummerierung der Zustände zu $E_n^{(0)}$ notwendig sind. Nichttriviale Lösungen existieren nur für

$$|V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}| = 0 .$$

Diese Gleichung heißt Säkulargleichung. Das ist eine Gleichung s -ten Grades in $E^{(1)}$, sie hat im Allgemeinen s verschiedene reelle Wurzeln. Diese Wurzeln sind in erster Näherung die Korrekturen zu den Eigenwerten. Die Summe der Wurzeln ist gleich der Summe der Diagonalelemente $V_{nn}, V_{n'n'}, \dots$ (das ist der Koeffizient von $E^{(1)s-1}$ in der Gleichung). Dabei sei erinnert, dass $E^{(1)s-1}$ sich aus dem Term

$$(E^{(1)} - V_{nn})(E^{(1)} - V_{n'n'}) \cdots (E^{(1)} - V_{n^{s'}n^{s'}}) ,$$

ergibt, was

$$E^{(1)s} - (V_{nn} + V_{n'n'} + V_{n^{s'}n^{s'}}) E^{(1)s-1} + \dots ,$$

entspricht. Für ein Polynom n -ten Grades $x^n + ax^{n-1} + \dots = 0$ bzw. $(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) = 0$ mit den Nullstellen x_1, x_2, \dots, x_n folgt, dass $a = -(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$. Setzt man die Wurzeln der Säkulargleichung in Gleichung (C.13) ein, und löst das Gleichungssystem findet man die $c_n^{(0)}$ und damit die Eigenfunktionen in nullter Näherung. Die Störung hebt im Allgemeinen die Entartung auf (die Wurzeln sind im Allgemeinen verschieden). Die Entartung kann dabei vollkommen oder teilweise aufgehoben werden. Es kann sein, dass die $V_{nn'}$ klein oder null sind. Dann kann es Sinn haben auch noch V_{nm} ($m \neq n, n', \dots$) in höheren Ordnungen zu berücksichtigen. Das wollen wir hier aber nicht betrachten.

C.4 Zeitabhängige Störungstheorie

Im Falle von zeitabhängigen Störungen kann man nicht von Korrekturen zu den Energienwerten sprechen, denn die Energie bleibt für einen zeitabhängigen Hamilton-Operator (der gestörte Operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ ist zeitabhängig) nicht erhalten. Somit gibt es überhaupt keine stationären Zustände. Somit besteht das Problem, aus den Wellenfunktionen der stationären Zustände des ungestörten Systems die Wellenfunktionen des gestörten Systems näherungsweise zu berechnen.

Der Hamilton-Operator soll die Gestalt haben

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t),$$

mit dem ungestörten Operator \hat{H}_0 und kleinen Störung $\hat{V}(t)$. \hat{H}_0 sollen nicht explizit von der Zeit abhängen, die Störung $\hat{V}(t)$ allerdings schon. Wir betrachten ein diskretes Spektrum. Die Eigenwertgleichung für das ungestörte Problem lautet

$$\hat{H}_0 \psi_k^{(0)} = E^{(0)} \psi_k^{(0)}. \quad (\text{C.14})$$

Für die Lösung der gestörten Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) \psi, \quad (\text{C.15})$$

machen wir den Ansatz

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k(t) \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) e^{-iE_k t/\hbar}, \quad (\text{C.16})$$

mit zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten. Einsetzen von Gleichung (C.16) in (C.15) und Verwendung von Gleichung (C.14) ergibt

$$i\hbar \sum_k \dot{c}_k \psi_k^{(0)} e^{-iE_k t/\hbar} = \sum_k c_k \hat{V} \psi_k^{(0)} e^{-iE_k t/\hbar}. \quad (\text{C.17})$$

Als nächstes multiplizieren wir beide Seiten der Gleichung von links mit $\psi_m^{(0)*}(\mathbf{r})$ und integrieren über den gesamten Raum. Unter Ausnutzung der Orthogonalität der Eigenfunktionen ergibt das

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_k c_k V_{mk} e^{i\omega_{mk} t}, \quad (\text{C.18})$$

mit $\omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar}$ und

$$V_{mk}(t) = \int \psi_m^{(0)*}(\mathbf{r}) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) dV. \quad (\text{C.19})$$

Wir betonen, dass Gleichung (C.18) exakt gültig ist.

Wir nehmen weiters an, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ das System im Zustand $\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$ ist. Die Anfangsbedingungen lauten somit

$$c_k(0) = c_k^{(0)} = \delta_{kn} . \quad (\text{C.20})$$

Wir setzen die Reihe⁴

$$c_k(t) = c_k^{(0)} + c_k^{(1)}(t) + c_k^{(2)}(t) + \dots ,$$

an, wobei $c_k^{(1)}(t)$ von der Größenordnung wie $\hat{V}(t)$ ist, $c_k^{(2)}(t)$ von zweiter Ordnung (mit $\hat{V}(t)$ von erster Ordnung) usw. mit den Anfangswerten

$$c_k^{(1)}(t) = c_k^{(2)}(t) = \dots = 0 .$$

Setzen wir dies in Gleichung (C.18) ein, finden wir in erster Ordnung

$$i\hbar \dot{c}_k^{(1)} = V_{kn} e^{i\omega_{kn} t} , \quad (\text{C.21})$$

wobei wir auf der rechten Seite verwendet haben, dass $c_k^{(0)} = \delta_{kn}$ ist. Um festzuhalten für welche ungestörte Funktion die Korrektur berechnet wird, führen wir einen zweiten Index für den Koeffizienten $c_k(t)$ ein und schreiben

$$\boxed{\psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_{kn}(t) \psi_k^{(0)}(\mathbf{r}) e^{-iE_k t/\hbar}} . \quad (\text{C.22})$$

Integrieren der Gleichung (C.21) ergibt unmittelbar

$$c_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn} t'} dt' , \quad (\text{C.23})$$

und somit bis zu erster Ordnung

$$c_{kn}(t) = c_{kn}^{(0)} + c_{kn}^{(1)}(t) , \quad (\text{C.24})$$

bzw.

$$\boxed{c_{kn}(t) = \delta_{kn} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{kn}(t') e^{i\omega_{kn} t'} dt'} . \quad (\text{C.25})$$

Bei allen hier angegebenen Formeln ist vorausgesetzt, dass es nur das diskrete Spektrum der ungestörten Energieniveaus gibt. Sie können unmittelbar für den Fall verallgemeinert werden, dass auch ein kontinuierliches Spektrum vorhanden ist, indem man zu den Summen über die Niveaus des diskreten Spektrums noch die entsprechenden Integrale über das kontinuierliche Spektrum addiert. Weiters muss für die Zustände im kontinuierlichen Spektrum der Kronecker-Tensor δ_{ij} durch die δ -Funktion ersetzt werden.

⁴Wir bemerken, dass Gleichung (C.18) zu nullter Ordnung ergibt, dass alle $c_k^{(0)}$ zeitunabhängig sind und die Zeitabhängigkeit erst ab $c_k^{(1)}(t)$ auftritt. Das ergibt sich unmittelbar durch Einsetzen.

C.5 Das Variationsprinzip

Ganz allgemein kann die Schrödinger-Gleichung der Form $\hat{H}\psi = E\psi$ aus dem Variationsprinzip erhalten werden

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = \int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq + \int \psi^* (\hat{H} - E) \delta \psi dq \quad (C.26)$$

$$= 0, \quad (C.27)$$

wobei q die Gesamtheit der Ortskoordinaten darstellt. Da ψ komplex ist, können ψ und ψ^* unabhängig voneinander variiert werden.⁵ Variation von ψ^* liefert

$$\int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0.$$

$\delta \psi^*$ ist frei wählbar, woraus folgt

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

Variation von ψ liefert nichts Neues

$$\int \psi^* (\hat{H} - E) \delta \psi dq = \int \delta \psi (\hat{H}^* - E) \psi^* dq = 0,$$

wobei wir die Hermitezität von \hat{H} verwendet haben. Das liefert die komplex konjugierte Gleichung $\hat{H}^* \psi^* = E \psi^*$. Gleichung (C.26) verlangt ein Extremum des Integrals ohne Nebenbedingung. Man kann E auch als Lagrange-Multiplikator in dem Variationsproblem

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dq = 0, \quad (C.28)$$

mit der Nebenbedingung

$$\int \psi^* \psi dq = 1, \quad (C.29)$$

auffassen. In der Tat folgt nämlich aus der Variation von

$$\int \psi^* \hat{H} \psi dq + \lambda \left(\int \psi^* \psi dq - 1 \right), \quad (C.30)$$

bezüglich ψ^* und anschließendem Nullsetzen

$$(\hat{H} + \lambda) \psi = 0, \quad (C.31)$$

dass

$$\int \psi^* (\hat{H} + \lambda) \psi dq = 0. \quad (C.32)$$

⁵D.h. jeder der beiden Summanden in Gleichung (C.26) verschwindet einzeln.

Variation von Gleichung (C.30) bezüglich λ und Nullsetzen ergibt die Nebenbedingung

$$\int \psi^* \psi dq - 1 = 0 .$$

Einsetzen in Gleichung (C.32) ergibt

$$\int \psi^* \hat{H} \psi dq + \lambda = 0 .$$

Da $\int \psi^* \hat{H} \psi dq = E$ folgt daraus

$$\lambda = -E ,$$

und in Gleichung (C.31) eingesetzt tatsächlich

$$(\hat{H} - E) \psi = 0 .$$

Der minimale Wert des Integrals (C.28) unter der Nebenbedingung (C.29) ist E_0 , die Energie des Grundzustandes. Die Funktion ψ die dieses Minimum realisiert ist ψ_0 , die Wellenfunktion des Grundzustandes.⁶

Die Wellenfunktion ψ_n ($n > 0$) der folgenden stationären Zustände gehören auch zu einem Extremwert, aber nicht zum absoluten Minimum des Integrals. Um aus der Bedingung, dass das Integral aus Gleichung (C.28) ein Minimum sein soll, ψ_1 und E_1 zu erhalten, darf man nur solche ψ als Vergleichsfunktionen zulassen, die Gleichung (C.29) und die Orthogonalitätsbedingung $\int \psi^* \psi_0 dq = 0$ erfüllen. Sind die ersten n Zustände, nach Energien geordnet, $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{n-1}$ bekannt, dann realisiert das ψ des folgenden Zustandes ein Minimum des Integrals aus Gleichung (C.28) mit den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi dq &= 1 , \\ \int \psi^* \psi_m dq &= 0 , \end{aligned}$$

mit $m = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

C.6 Das 3-dimensionale unendliche Rechteckpotential

Wir wollen hier die Anordnung der Energieniveaus mit verschiedenen Werten l des Drehimpulses in einem unendlich tiefen kugelsymmetrischen Potentialtopf angeben.

Die ebene Welle

$$\psi_{\mathbf{p}} \propto e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} ,$$

beschreibt einen stationären Zustand, in dem ein freies Teilchen einen bestimmten Impuls \mathbf{p} (und die Energie $E = p^2/2m$) hat. Wir wollen jetzt solche stationäre Zustände eines freien

⁶Im Folgenden kann man die Wellenfunktion auch reell annehmen, wie man sie immer wählen kann (wenn kein Magnetfeld vorhanden ist), d.h. $\psi^* = \psi$ setzen.

Teilchens betrachten, in denen dieses neben der Energie bestimmte Werte für den Betrag und die Projektion des Drehimpulses hat. Statt der Energie führen wir zweckmäßig die Wellenzahl ein

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} .$$

Die Wellenfunktion eines Zustandes mit dem Drehimpuls l und der Projektion m ist

$$\psi_{klm} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) .$$

Die Radialfunktion wird dabei aus der Gleichung

$$R''_{kl} + \frac{2}{r} R'_{kl} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl} = 0 , \quad (\text{C.33})$$

(siehe Kapitel 1 ohne $U(r)$) berechnet. Für $l = 0$ kann man Gleichung (C.33) als

$$\frac{d^2}{dr^2} (r R_{k0}) + k^2 r R_{k0} = 0 ,$$

schreiben. Die für $r = 0$ endliche Lösung dieser Gleichung ist

$$R_{k0} \propto \frac{\sin kr}{r} . \quad (\text{C.34})$$

Bei der Lösung der Gleichung (C.33) für $l \neq 0$ substituieren wir

$$R_{kl} = r^l \chi_{kl} .$$

Für χ_{kl} erhalten wir die Gleichung

$$\chi''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r} \chi'_{kl} + k^2 \chi_{kl} = 0 .$$

Wir leiten diese Gleichung nach r ab und erhalten

$$\chi'''_{kl} + \frac{2(l+1)}{r} \chi''_{kl} + \left[k^2 - \frac{2(l+1)}{r^2} \right] \chi'_{kl} = 0 .$$

Nach dem Einsetzen von $\chi'_{kl} = r \chi_{k,l+1}$ wird daraus

$$\chi''_{k,l+1} + \frac{2(l+2)}{r} \chi'_{k,l+1} + k^2 \chi_{k,l+1} = 0 .$$

Das ist tatsächlich die Gleichung, der die Funktion $\chi_{k,l+1}$ zu genügen hat. Aufeinanderfolgende Funktionen χ_{kl} hängen also über die Beziehung

$$\chi_{k,l+1} = \frac{1}{r} \chi'_{kl} ,$$

miteinander zusammen, und daher gilt

$$\chi_{kl} = \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \chi_{k0},$$

wobei $\chi_{k0} = R_{k0}$ durch die Gleichung (C.34) gegeben wird. Wir finden somit endgültig den folgenden Ausdruck für die Radialfunktionen der freien Bewegung eines Teilchens

$$R_{kl} \propto r^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin kr}{r}.$$

Da die Bessel-Funktion folgende Darstellung hat

$$J_{l+1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} x^{l+1/2} \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x},$$

und die sphärische Bessel-Funktion gegeben ist durch

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x),$$

finden wir schließlich

$$R_{kl} \propto \frac{1}{\sqrt{r}} J_{l+1/2}(kr) \propto j_l(kr).$$

Die Bedingung am Rande des Potentialtopfes bei $r = a$ fordert, dass die Wellenfunktion ψ dort verschwindet. Wir erhalten somit die Gleichung

$$J_{l+1/2}(ka) = 0,$$

deren Wurzeln die Lage der Niveaus über dem Boden des Topfes⁷ für die verschiedenen Werte von l angeben. Die Anordnung ist (mit dem Grundzustand beginnend) die folgende

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, \dots,$$

mit denselben Bezeichnungen wie in *Appendix C.7*.

C.7 Der 3-dimensionale harmonische Oszillator

Wir berechnen für den räumlichen harmonischen Oszillator (ein Teilchen im Feld $U = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$): die Energieniveaus, den Entartungsgrad und die möglichen Werte des Bahndrehimpulses in den entsprechenden stationären Zuständen.

Die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Feld $U = \frac{1}{2} m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$ erlaubt die Separation der Variablen, sodass man drei Gleichungen für je einen linearen Oszillator erhält. Die Energieniveaus sind deshalb

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \\ &\equiv \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right). \end{aligned}$$

⁷Das ist $\hbar^2 k^2 / 2m$.

Der Entartungsgrad des n -ten Niveaus ist gleich der Zahl der Möglichkeiten, n als Summe dreier positiver ganzer Zahlen (einschließlich der Zahl 0) darzustellen. Mit anderen Worten, das ist die Zahl der Möglichkeiten, n gleichartige Kugeln in drei Kästen unterzubringen. Dazu stellen wir uns zuerst vor n' Kugeln in zwei Kästen unterzubringen. Die Zahl der Möglichkeiten hierfür ist offensichtlich $n' + 1$. Somit ist die Zahl der Möglichkeiten n Kugeln in drei Kästen unterzubringen offensichtlich

$$\begin{aligned} \sum_{n'=0}^n (n' + 1) &= n \frac{n+1}{2} + n + 1 \\ &= \frac{1}{2} (n+1)(n+2). \end{aligned}$$

Die Wellenfunktion der stationären Zustände kann man als Produkt dreier Wellenfunktionen für den 1-dimensionalen Oszillator erhalten. Stattdessen lösen wir die Schrödinger-Gleichung direkt. In Kapitel 1 haben wir die Differentialgleichung für die Radialfunktion angegeben (aufgrund der sphärischen Symmetrie ist der winkelabhängige Teil wieder durch Y_{lm} gegeben)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right] R = 0.$$

Führen wir die dimensionslosen Größen

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \epsilon = \frac{E}{\hbar\omega},$$

ein, erhalten wir schließlich

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 2\epsilon - \rho^2 \right] R = 0. \quad (\text{C.35})$$

Für asymptotische Werte von ρ finden wir die geeigneten endlichen Funktionen

$$\rho \rightarrow \infty : \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2 \right) R \simeq 0,$$

liefert

$$R(\rho) \propto e^{-\frac{1}{2}\rho^2},$$

da

$$\frac{dR}{d\rho} = -\rho R, \quad \frac{d^2R}{d\rho^2} = (\rho^2 - 1) R \simeq \rho^2 R.$$

Weiters

$$\rho \rightarrow 0 : \quad \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R \simeq 0,$$

liefert

$$R(\rho) \propto \rho^l,$$

da

$$\begin{aligned} \left(\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} + 2\rho \frac{d}{d\rho} \right) \rho^l &= \rho \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} + 1 \right) \rho^l \\ &= l(l+1) \rho^l. \end{aligned}$$

Schreiben wir nun

$$R(\rho) \propto \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} L(\rho^2),$$

und setzen wir dies in Gleichung (C.35) ein, erhalten wir eine Differentialgleichung für die unbekannte Funktion $L(\rho^2)$. Wir setzen $x = \rho^2$ womit

$$\frac{d}{d\rho} = 2\sqrt{x} \frac{d}{dx}, \quad \frac{d^2}{d\rho^2} = 4x \frac{d^2}{dx^2} + 2 \frac{d}{dx},$$

und weiters

$$\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} = 4x \frac{d^2}{dx^2} + 6 \frac{d}{dx}.$$

Wir haben ($' = \frac{d}{dx}$)

$$\begin{aligned} R(x) &\propto x^{l/2} e^{-x/2} L(x), \\ R'(x) &\propto \left(\frac{l}{2} x^{l/2-1} L - \frac{1}{2} x^{l/2} L + x^{l/2} L' \right) e^{-x/2}, \\ R''(x) &\propto \left\{ \frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} - 1 \right) x^{l/2-2} L + \frac{l}{2} x^{l/2-1} L' - \frac{l}{4} x^{l/2-1} L - \frac{1}{2} x^{l/2} L' + \frac{l}{2} x^{l/2-1} L' + x^{l/2} L'' \right. \\ &\quad \left. - \frac{l}{4} x^{l/2-1} L + \frac{1}{4} x^{l/2} L - \frac{1}{2} x^{l/2} L' \right\} e^{-x/2} \\ &= \left\{ L'' + \left(\frac{l}{x} - 1 \right) L' + \left(\frac{l(l-2)}{4x^2} - \frac{l}{2x} + \frac{1}{4} \right) L \right\} x^{l/2} e^{-x/2}, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} 4x \frac{d^2 R}{dx^2} + 6 \frac{dR}{dx} &\propto \left\{ 4xL'' + 4(l-x)L' + \left(\frac{l(l-2)}{x} - 2l + x \right) L + \left(\frac{3l}{x} - 3 \right) L + 6L' \right\} x^{l/2} e^{-x/2} \\ &= \left\{ 4xL'' + 4 \left(l + \frac{3}{2} - x \right) L' + \left(\frac{l(l+1)}{x} - 2l - 3 + x \right) L \right\} x^{l/2} e^{-x/2}, \end{aligned}$$

und letztlich von Gleichung (C.35)

$$xL'' + \left(l + \frac{3}{2} - x \right) L' + \frac{1}{2} \left(\epsilon - l - \frac{3}{2} \right) L = 0.$$

Von *Appendix A.2* sehen wir, dass dies die konfluent hypergeometrische Differentialgleichung ist mit der Lösung

$$L(x) = {}_1F_1\left(-\frac{n-l}{2}, l + \frac{3}{2}, x\right),$$

wobei wir verwendet haben $\epsilon - l - \frac{3}{2} = n - l$. Für die Wellenfunktion erhalten wir somit

$$\psi_{mln} \propto r^l e^{-\alpha^2 r^2/2} {}_1F_1\left(-\frac{n-l}{2}, l + \frac{3}{2}, \alpha^2 r^2\right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Aus Konvergenzgründen, muss das erste Argument von ${}_1F_1$ Null oder eine negative ganze Zahl sein, wie man aus der Reihe in *Appendix A.2* ersieht. Somit ergibt sich

$$\begin{aligned} l &= 0, 2, \dots, n && \text{für } n \text{ gerade,} \\ l &= 1, 3, \dots, n && \text{für } n \text{ ungerade.} \end{aligned}$$

Dadurch werden die möglichen Werte des Bahndrehimpulses für die betrachteten Energieniveaus bestimmt.

Die Anordnung der Niveaus eines räumlichen Oszillators ist folgende⁸

$$(1s), (1p), (1d, 2s), (1f, 2p), (1g, 2d, 3s), \dots.$$

Die entarteten Zustände sind in Klammern eingeschlossen. Diese Entartung hängt, analog zum Fall des Coulombfeldes, mit einer zusätzlichen Symmetrie des Hamilton-Operators zusammen. Im vorliegenden Falle ergibt sich diese Symmetrie, weil $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + m\omega^2r^2/2$ sowohl die Operatoren \hat{p}_i als auch die Koordinaten x_i nur als Quadratsumme eingehen. Wir führen statt \hat{p}_i und x_i die Operatoren

$$\hat{a}_i = \frac{m\omega x_i + i\hat{p}_i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad \hat{a}_i^\dagger = \frac{m\omega x_i - i\hat{p}_i}{\sqrt{2m\hbar\omega}},$$

ein und erhalten

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} + \frac{3}{2} \right).$$

Dieser Ausdruck ist invariant unter beliebigen unitären Transformationen der Operatoren \hat{a}_i und \hat{a}_i^\dagger . Diese Transformationen bilden eine größere Gruppe als die dreidimensionale Drehgruppe (gegenüber der der Hamilton-Operator eines Teilchens in einem beliebigen kugelsymmetrischen Feld invariant ist).

Der besonderen Stellung des Coulomb-Feldes und des harmonischen Oszillators in der Quantenmechanik (der Existenz der zufälligen Entartung) entspricht auch eine besondere Stellung in der klassischen Mechanik: Für diese (und nur für diese) Felder existieren geschlossene Bahnkurven für die Teilchen.

⁸Die Ziffer vor dem Buchstaben kennzeichnet die Niveaus mit gleichem l nach zunehmender Energie geordnet. Diese Bezeichnung ist für die Niveaus von Teilchen im Kern üblich.

D

Kernphysik

D.1 Beziehung von Kern-Quadrupolmoment zu Q_{zz}

Wir betrachten einen beliebigen Ortsvektor \mathbf{e}_K mit Länge 1 im Koordinatensystem des Kerns

$$\mathbf{e}_K = \sin \vartheta_K \cos \phi_K \mathbf{e}_\zeta + \sin \vartheta_K \sin \phi_K \mathbf{e}_\eta + \cos \vartheta_K \mathbf{e}_\xi .$$

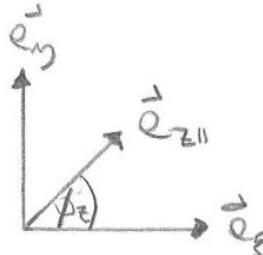
Es gilt offensichtlich

$$\cos \vartheta_K = \mathbf{e}_K \cdot \mathbf{e}_z .$$

Wir benötigen die ersichtlichen Relationen

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\zeta \cdot \mathbf{e}_z &= \sin \beta \cos \phi_z , \\ \mathbf{e}_\eta \cdot \mathbf{e}_z &= \sin \beta \sin \phi_z , \\ \mathbf{e}_\xi \cdot \mathbf{e}_z &= \cos \beta . \end{aligned}$$

Hierbei ist $\mathbf{e}_{z\parallel}$ die Projektion des Vektors \mathbf{e}_z auf die ζ, η -Ebene und hat die Länge $\sin \beta$. Der



Winkel zwischen $\mathbf{e}_{z\parallel}$ und \mathbf{e}_ζ ist ϕ_z .

Somit ergibt sich

$$\cos \vartheta = \sin \vartheta_K \cos \phi_K \sin \beta \cos \phi_z + \sin \vartheta_K \sin \phi_K \sin \beta \sin \phi_z + \cos \vartheta_K \cos \beta ,$$

und da

$$\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta ,$$

letztlich

$$\cos \vartheta = \cos \vartheta_K \cos \beta + \sin \vartheta_K \sin \beta \cos(\phi_K - \phi_z) .$$

Für das Quadrupolmoment ergibt sich somit

$$\begin{aligned} Q &= \int \rho(r, \vartheta, \phi) (3 \cos^2 \vartheta - 1) r^2 dV \\ &= \int \rho(r, \vartheta_K) (3 \cos^2 \vartheta_K \cos^2 \beta + 3 \sin^2 \vartheta_K \sin^2 \beta \cos^2(\phi_K - \phi_z) \\ &\quad + 6 \cos \vartheta_K \cos \beta \sin \vartheta_K \sin \beta \cos(\phi_K - \phi_z) - 1) r^2 dV . \end{aligned}$$

Aufgrund der Symmetrie der Ladungsverteilung bezüglich der ξ -Achse, verschwindet der Term linear in $\cos(\phi_K - \phi_z)$ und der quadratische Term kann durch $1/2$ ersetzt werden

$$Q = \int \rho(r, \vartheta_K) \left(3 \cos^2 \vartheta_K \cos^2 \beta + \frac{3}{2} \sin^2 \vartheta_K \sin^2 \beta - 1 \right) r^2 dV .$$

Da

$$\begin{aligned} 3 \cos^2 \vartheta_K \cos^2 \beta + \frac{3}{2} \sin^2 \vartheta_K \sin^2 \beta - 1 \\ &= 3 \cos^2 \vartheta_K \cos^2 \beta + \frac{3}{2} (1 - \cos^2 \vartheta_K) (1 - \cos^2 \beta) - 1 \\ &= \frac{1}{2} (1 - 3 \cos^2 \vartheta_K - 3 \cos^2 \beta + 9 \cos^2 \vartheta_K \cos^2 \beta) \\ &= \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) (3 \cos^2 \vartheta_K - 1) , \end{aligned}$$

folgt

$$Q = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) Q_0 ,$$

wobei

$$Q_0 = \int \rho(r, \vartheta_K) (3 \cos^2 \vartheta_K - 1) r^2 dV ,$$

das **innere Quadrupolmoment** des Kerns ist.

Ergänzend wollen wir die Relation zwischen Q und Q_0 auf „algebraische“ Weise herstellen. Betrachten wir ein Rotationsellipsoid mit der z -Achse als Symmetriearchse. Das Quadrupolmoment schreiben wir um

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= \int \rho(\mathbf{r}) (3x_i x_j - 3\delta_{ij} r^2) d^3r \\ &= (3\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{ij}\delta_{kl}) \int \rho(\mathbf{r}) x_k x_l d^3r . \end{aligned}$$

Aufgrund der Symmetrien des Rotationsellipsoids gilt

$$\begin{aligned}\int \rho(\mathbf{r}) x_k x_l d^3 r &= 0, \quad \text{für } k \neq l, \\ \int \rho(\mathbf{r}) x_1^2 d^3 r &= \int \rho(\mathbf{r}) x_2^2 d^3 r = \mathcal{I}_{xy}, \\ \int \rho(\mathbf{r}) x_3^2 d^3 r &= \mathcal{I}_z.\end{aligned}$$

Wir finden somit

$$Q_{ij} = (3\delta_{ij} - 3\delta_{i3}\delta_{j3} - 2\delta_{ij}) \mathcal{I}_{xy} + (3\delta_{i3}\delta_{j3} - \delta_{ij}) \mathcal{I}_z \quad (\text{D.1})$$

$$= (\delta_{ij} - 3\delta_{i3}\delta_{j3}) (\mathcal{I}_{xy} - \mathcal{I}_z), \quad (\text{D.2})$$

wobei wir $\delta_{i1}\delta_{j1} + \delta_{i2}\delta_{j2} = \delta_{ij} - \delta_{i3}\delta_{j3}$ verwendet haben. Speziell für $Q_{zz} = Q_{33}$ finden wir

$$Q_{zz} = -2 (\mathcal{I}_{xy} - \mathcal{I}_z). \quad (\text{D.3})$$

Vergleich der Gleichungen (D.1) und (D.3) liefert

$$Q_{ij} = \frac{1}{2} (3\delta_{i3}\delta_{j3} - \delta_{ij}) Q_{zz}.$$

δ_{i3} sind die Komponenten des Einheitsvektors in z -Richtung. Für die Verallgemeinerung für eine Symmetriearchse in beliebige Richtung \mathbf{n} (wobei $\mathbf{n}^2 = 1$ ist) erhalten wir offensichtlich

$$Q_{ij} = \frac{1}{2} (3n_i n_j - \delta_{ij}) Q_0,$$

wobei Q_0 das Quadrupolmoment in \mathbf{n} -Richtung ist. Schliesst nun \mathbf{n} mit der z -Achse den Winkel β ein, haben wir $n_3 = \cos \beta$ und somit für $Q = Q_{zz}$

$$Q = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) Q_0.$$

D.2 Inneres Quadrupolmoment in der Quantenmechanik

Wir drücken das Quadrupolmoment \tilde{Q}_{zz} eines rotierenden Kerns aus durch das Quadrupolmoment \tilde{Q}_{zz}^0 in Bezug auf die mit dem Kern verhefteten Achsen.

Der Operator für den Quadrupoltensor des rotierenden Kerns wird folgendermaßen durch \tilde{Q}_{zz}^0 ausgedrückt (siehe *Appendix D.1*)

$$Q_{ik} = \frac{3}{2} \tilde{Q}_0 \left(n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right).$$

Das ist ein symmetrischer Tensor mit der Spur Null aus den Komponenten des Einheitsvektors \mathbf{n} in Richtung der Kernachse, dabei ist $Q_{zz} = \tilde{Q}_0$. Über den Rotationszustand des Kerns wird wie folgt gemittelt.

Wir mitteln $n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik}$ für einen Zustand mit vorgegebenem $|I|$, aber nicht festgelegter Richtung von \mathbf{I} (d.h. unbestimmten I_z).

Der gesuchte Mittelwert ist ein Operator, den man durch den Operator $\hat{\mathbf{I}}$ allein ausdrücken kann. Wir setzen ihn in der Form

$$\overline{n_i n_k} - \frac{1}{3} \delta_{ik} = a \left(\hat{I}_i \hat{I}_k + \hat{I}_k \hat{I}_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} I(I+1)\hbar^2 \right),$$

an. Das ist die allgemeinste Form eines aus den Komponenten von $\hat{\mathbf{I}}$ aufgebauten symmetrischen Tensors zweiter Stufe mit der Spur Null. Zur Bestimmung der Konstanten a multiplizieren wir die aufgeschriebene Gleichung von links mit \hat{I}_i und von rechts mit \hat{I}_k (und summieren über i und k). Es ist $n_i \hat{I}_i = I\hbar$. Das Produkt $\hat{I}_i \hat{I}_i \hat{I}_k \hat{I}_k = (\hat{\mathbf{I}}^2)^2$ ersetzen wir durch den Eigenwert $I^2(I+1)^2\hbar^4$, das Produkt $\hat{I}_i \hat{I}_k \hat{I}_i \hat{I}_k$ formen wir mit Hilfe der Vertauschungsrelationen um

$$\begin{aligned} \hat{I}_i \hat{I}_k \hat{I}_i \hat{I}_k &= \hat{I}_i \hat{I}_i \hat{I}_k \hat{I}_k - i\hbar \epsilon_{ikl} \hat{I}_i \hat{I}_l \hat{I}_k \\ &= (\hat{\mathbf{I}}^2)^2 - \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ikl} \hat{I}_i \left(\hat{I}_l \hat{I}_k - \hat{I}_k \hat{I}_l \right) \\ &= (\hat{\mathbf{I}}^2)^2 + \frac{\hbar^2}{2} \epsilon_{ikl} \epsilon_{lmn} \hat{I}_i \hat{I}_m \\ &= (\hat{\mathbf{I}}^2)^2 - \hbar^2 \hat{\mathbf{I}}^2 \\ &= \hbar^4 I^2 (I+1)^2 - \hbar^4 I (I+1), \end{aligned}$$

(wir haben dabei $\epsilon_{ikl} \epsilon_{mkl} = 2\delta_{im}$ verwendet). Wir erhalten somit

$$I^2 \hbar^2 - \frac{1}{3} \hbar^2 I (I+1) = a \left(\hbar^4 I^2 (I+1)^2 + \hbar^4 I^2 (I+1)^2 - \hbar^4 I (I+1) - \frac{2}{3} \hbar^4 I^2 (I+1)^2 \right),$$

bzw.

$$\frac{I}{3} (2I-1) \hbar^2 = a \left(\frac{4}{3} I (I+1) - 1 \right) I (I+1) \hbar^4,$$

was nach einer einfachen Rechnung liefert

$$a = \frac{1}{(2I+3)(I+1)\hbar^2}.$$

Es ergibt sich somit der Ausdruck

$$\hat{Q}_{ik} = \frac{3}{2} \frac{\tilde{Q}_0}{(2I+3)(I+1)} \frac{1}{\hbar^2} \left(\hat{I}_i \hat{I}_k + \hat{I}_k \hat{I}_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} I (I+1) \hbar^2 \right).$$

Wir erhalten \tilde{Q} als

$$\begin{aligned} \tilde{Q} &= \langle I, m_I = I | \hat{Q}_{zz} | I, m_I = I \rangle \\ &= \frac{3}{2} \frac{\tilde{Q}_0}{(2I+3)(I+1)} \frac{1}{\hbar^2} \left(I^2 \hbar^2 + I^2 \hbar^2 - \frac{2}{3} I (I+1) \hbar^2 \right) \\ &= \tilde{Q}_0 \frac{(2I-1)I}{(2I+3)(I+1)}. \end{aligned}$$

Mit wachsendem I strebt \tilde{Q}/\tilde{Q}_0 recht langsam gegen 1. Obige Herleitung gilt für Kerne im Grundzustand, für angeregte Kerne hätte man in obiger Ableitung $n_i \hat{I}_i = \Omega$ zu verwenden, wobei Ω die Projektion des Gesamtdrehimpulses ist ($I = \Omega, \Omega + 1, \Omega + 2, \dots$). Der Rest der Herleitung ist dann analog durchzuführen.

D.3 Massenkorrektur für den Neutronenüberschuss M_3

Die Gleichungen (10.22) und (10.23) in Kapitel 10.2 zeigen, dass man Kerne als kaltes Fermi-Dirac Gas beschreiben kann mit einer Fermienergie (für Neutronen)

$$E_F^n = C_0 \left(\frac{N}{A} \right)^{2/3},$$

mit einer Konstanten C_0 . Hierbei haben wir in Gleichung (10.23) verwendet, dass $V \propto A$ und $E_F \propto p_F^2$.

Allgemein ergibt sich für die Gesamtenergie eines Fermigases im Grundzustand für Nukleonen

$$\begin{aligned} E_G &= \int_0^N E dN \\ &= \int_0^{E_F} E \frac{dN_N(E)}{dE} dE \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_N}{\hbar^2} \right)^{3/2} V \int_0^{E_F} E^{3/2} dE \\ &= \frac{1}{5\pi^2} \left(\frac{2m_N}{\hbar^2} \right)^{3/2} V E_F^{5/2} \\ &= \frac{3}{5} N E_F, \end{aligned}$$

wobei wir Gleichung (10.27) aus Kapitel 10.2 verwendet haben, sowie

$$E_F^{3/2} = 3\pi^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m_N} \right)^{3/2} \frac{N}{V}.$$

Somit ergibt sich für die Gesamtenergie der Neutronen vom Grund des Potentials aus gemessen

$$E_n = C_1 \frac{N^{5/3}}{A^{2/3}},$$

mit einer Konstanten C_1 . Analog haben wir für die Protonen

$$E_p = C_1 \frac{Z^{5/3}}{A^{2/3}}.$$

Der Massenterm M_4 korrigiert explizit für die elektrostatische Energie, somit ignorieren wir sie hier. Dann wird das Minimum der Gesamtenergie $E_{N+Z}(\min)$ bei $N = Z = A/2$ sein. Die Massenkorrektur wird dann proportional zu

$$E_{N+Z} - E_{N+Z}(\min) = C_1 A^{-2/3} \left[N^{5/3} + Z^{5/3} - 2 \left(\frac{A}{2} \right)^{5/3} \right],$$

sein. Wir definieren

$$\Delta \equiv \frac{N - Z}{2} = \begin{cases} N - \frac{A}{2}, \\ \frac{A}{2} - Z. \end{cases}$$

Somit ist

$$E_{N+Z} - E_{N+Z}(\min) = C_1 A^{-2/3} \left[\left(\frac{A}{2} + \Delta \right)^{5/3} + \left(\frac{A}{2} - \Delta \right)^{5/3} - 2 \left(\frac{A}{2} \right)^{5/3} \right].$$

Taylorreihenentwicklung der ersten zwei Terme bis zur Ordnung Δ^2 liefert

$$\begin{aligned} E_{N+Z} - E_{N+Z}(\min) &= C_1 A^{-2/3} \left[2 \frac{5/3 \times 2/3}{2} \left(\frac{A}{2} \right)^{-1/3} \Delta^2 \right] \\ &\propto \frac{\Delta^2}{A} \\ &= \frac{\left(\frac{A}{2} - Z \right)^2}{A}, \end{aligned}$$

wie in M_3 angenommen.

D.4 Der Massenmittelpunkt im selbstkonsistenten Feld

Bei der Methode des selbstkonsistenten Feldes wird die Wellenfunktion eines Systems als Produkt (oder als in geeigneter Weise symmetrierte Summe von Produkten) aus den Wellenfunktionen der einzelnen Teilchen aufgebaut. Eine derartige Funktion gewährleistet aber nicht, dass der Massenmittelpunkt fest bleibt, obwohl der mit dieser Wellenfunktion berechnete Mittelwert für die Geschwindigkeit des Massenmittelpunktes gleich Null sein wird, ergibt diese Wellenfunktion endliche Wahrscheinlichkeiten für von Null verschiedene Geschwindigkeitswerte. Im Falle der Atomelektronen ist diese Komplikation überhaupt nicht aufgetreten, weil die Ruhe des Massenmittelpunktes von selbst gewährleistet war, denn der Massenmittelpunkt lag in dem festen schweren Kern.

Diese Komplikation kann umgangen werden, indem man die Bewegung des Massenmittelpunktes bei der Berechnung einer beliebigen physikalischen Größe mit den Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A)$ nach der Methode des selbstkonsistenten Feldes vorher ausschließt. $f(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ sei eine beliebige physikalische Größe - eine Funktion von Orten und Impulsen der Nukleonen.

Bei der Berechnung der Matrixelemente mit den Funktionen ψ muss man dann, ohne $\psi(\mathbf{r}_i)$ zu ändern, die Argumente der Funktion f gemäß

$$\mathbf{r}_i \longrightarrow \mathbf{r}_i - \mathbf{R}, \quad \mathbf{p}_i \longrightarrow \mathbf{p}_i - \frac{\mathbf{P}}{A}, \quad (\text{D.4})$$

ersetzen, wobei \mathbf{R} der Ortsvektor des Massenmittelpunktes des Kerns, A die Teilchenzahl darin und \mathbf{P} der Impuls des ganzen Kerns sind. Die zweite Substitution in Gleichung (D.4) entspricht der Subtraktion der Geschwindigkeit \mathbf{V} des Massenmittelpunktes von den Nukleonengeschwindigkeiten, $\mathbf{v}_i \longrightarrow \mathbf{v}_i - \mathbf{V}$. \mathbf{V} hängt mit dem Impuls \mathbf{P} über die Beziehung $\mathbf{P} = A m_p \mathbf{V}$ zusammen (*S. Gartenhaus, C. Schwartz, 1957*).

Der Operator für das Dipolmoment des Kerns ist $\mathbf{d} = e \sum_p \mathbf{r}_p$ wobei über alle Protonen im Kern zu summieren ist. Bei der Berechnung der Matrixelemente nach der Methode des selbstkonsistenten Feldes ist dieser Operator durch den Operator $e \sum_p (\mathbf{r}_p - \mathbf{R})$ zu ersetzen. Die Koordinaten des Kernmittelpunktes sind

$$\mathbf{R} = \frac{1}{A} \left(\sum_p \mathbf{r}_p + \sum_n \mathbf{r}_n \right),$$

(es wird über alle Protonen und Neutronen summiert). Die Zahl der Protonen im Kern ist Z , daher muss der Operator für das Dipolmoment endgültig gemäß

$$e \sum_p \mathbf{r}_p \longrightarrow e \left(1 - \frac{Z}{A} \right) \sum_p \mathbf{r}_p - e \frac{Z}{A} \sum_n \mathbf{r}_n, \quad (\text{D.5})$$

ersetzt werden. Die Protonen gehen hier mit der „effektiven Ladung“ $e(1 - Z/A)$ ein, und die Neutronen mit der „Ladung“ $-eZ/A$. Die relative Größenordnung der bei der Berechnung des Dipolmoments auftretenden Korrekturglieder ist ~ 1 , wie aus Gleichung (D.5) zu ersehen ist. Die Korrekturen bei der Berechnung der magnetischen und der höheren elektrischen Multipolmomente ist von der relativen Ordnung $\sim 1/A$, wie man leicht erkennen kann.

Literaturverzeichnis

- [Ber07] BERTULANI, Carlos A.: *Nuclear physics in a nutshell*. Bd. 2. Princeton University Press, 2007
- [BJP03] BRANSDEN, Brian H. ; JOACHAIN, Charles J. ; PLIVIER, Theodor J.: *Physics of atoms and molecules*. Pearson education, 2003
- [BS13] BLIN-STOYLE, Roger J.: *Nuclear and particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013
- [BW91] BLATT, John M. ; WEISSKOPF, Victor F.: *Theoretical nuclear physics*. Courier Corporation, 1991
- [Fer50] FERMI, Enrico: *Nuclear physics: a course given by Enrico Fermi at the University of Chicago*. University of Chicago Press, 1950
- [Fer95] FERMI, Enrico: *Notes on quantum mechanics*. University of Chicago Press, 1995
- [FLS11a] FEYNMAN, Richard P. ; LEIGHTON, Robert B. ; SANDS, Matthew: *The Feynman Lectures on Physics, Vol. I: The New Millennium Edition: Mainly Mechanics, Radiation, and Heat*. Basic Books, 2011
- [FLS11b] FEYNMAN, Richard P. ; LEIGHTON, Robert B. ; SANDS, Matthew: *The Feynman Lectures on Physics, Vol. II: The New Millennium Edition: Mainly Electromagnetism and Matter*. Basic Books, 2011
- [FLS11c] FEYNMAN, Richard P. ; LEIGHTON, Robert B. ; SANDS, Matthew: *The Feynman Lectures on Physics, Vol. III: The New Millennium Edition: Quantum Mechanics*. Basic Books, 2011
- [Jac18] JACKIW, Roman: *Intermediate quantum mechanics*. CRC Press, 2018
- [LL86] LANDAU, Lew D. ; LIFSHITZ, Jewgeni M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik*. Bd. III: *Quantenmechanik*. 9. Europa Lehrmittel Verlag, 1986. – 660 S.
- [LL91] LANDAU, Lew D. ; LIFSHITZ, Jewgeni M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik*. Bd. IV: *Quantenelektrodynamik*. 7. Europa Lehrmittel Verlag, 1991. – 628 S.
- [LS93] LANDAU, Lev D. ; SMORODINSKY, Yakov A.: *Lectures on nuclear theory*. Courier Corporation, 1993

Literaturverzeichnis

- [MK13a] MAYER-KUCKUK, Theo: *Atomphysik: Eine Einführung*. Springer-Verlag, 2013
- [MK13b] MAYER-KUCKUK, Theo: *Kernphysik: Eine Einführung*. Springer-Verlag, 2013
- [MS19] MARTIN, Brian R. ; SHAW, Graham: *Nuclear and particle physics: an introduction*. John Wiley & Sons, 2019
- [PE00] PAULI, Wolfgang ; ENZ, Charles P.: *Pauli lectures on physics. vol. 5: Wave mechanics*. Courier Corporation, 2000
- [Sch03] SCHWINGER, Julian: *Quantum mechanics: symbolism of atomic measurements*. 2003
- [Tan19] TANABASHI, M: *et al.* (Particle Data Group): 2019 Review of Particle Physics. In: *Phys. Rev. D* 98 (2019), S. 030001
- [Woo75] WOODGATE, GK: *Elementare Struktur der Atome*. 1975
- [YH10] YANG, Fujia ; HAMILTON, Joseph H.: *Modern Atomic and Nuclear Physics: Revised*. World Scientific Publishing Company, 2010