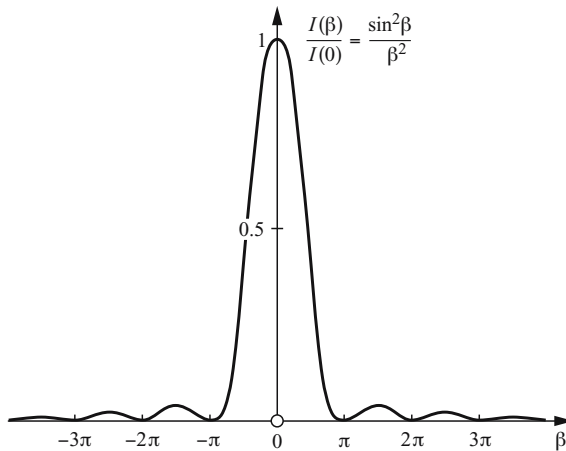


# Lösungen der Aufgaben

- 1  $s(\nu, T) = \frac{c}{4} \rho(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$
- 2  $S(T) = \sigma T^4$  ;  $\sigma = \frac{2\pi^5}{15} \frac{k^4}{c^2 h^3} = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
- 3  $E = 4.35 \times 10^{-19} \text{ J} = 2.72 \text{ eV}$
- 4  $E_n = -\frac{1}{2} \mu c^2 \frac{\alpha^2}{n^2}$
- 5  $E_\gamma = 2875 \text{ eV}$
- 6 1.  $I(\theta) = I_0 \frac{\sin^2(k \frac{a}{2} \sin \theta)}{(k \frac{a}{2} \sin \theta)^2}$  ;  $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$

2.



3.  $\lambda \lesssim a$  ( $\lambda$ -Regel!)
- 7  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{R^2}{4}$  (isotrop!) ;  $\sigma = \pi R^2$

8 -

9  $I(\theta) = I_0 \cos^2(\pi \frac{d}{\lambda} \sin \theta)$

10 1.  $\lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos \theta)$

2.  $T = \frac{E^2(1 - \cos \theta)}{mc^2 + E(1 - \cos \theta)}$

11  $E_{\gamma_1} = E_{\gamma_2} = mc^2 = 511 \text{ keV}$

12 1.  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

2.  $\omega = kc$

13 1.  $\lambda = \lambda_C \left[ \left( \frac{T}{mc^2} \right)^2 + 2 \frac{T}{mc^2} \right]^{-1/2}$

2.  $\lambda = \lambda_C \left( \frac{2T}{mc^2} \right)^{-1/2}$

3.  $\lambda = \lambda_C \frac{mc^2}{T}$

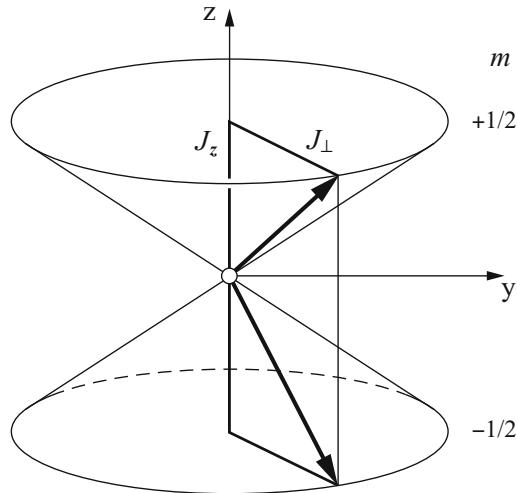
14 1.  $E_r(s, t) = E_0 \cos(ks - \omega t) \quad ; \quad E_z = E_\phi = 0$

$B_z(s, t) = -\frac{E_0}{c} \cos(ks - \omega t) \quad ; \quad B_r = B_\phi = 0$

2.  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad ; \quad k = k_m = \frac{m}{r_0} \quad ; \quad \omega = \omega_m = \frac{c}{r_0} m$

15 -

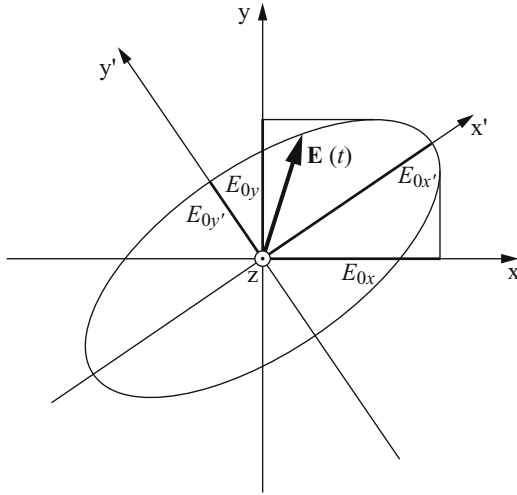
16 1.  $\mathbf{J}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad ; \quad J_\perp = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar$



2.  $E_{\pm 1/2} = \pm \mu_B B = \pm 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV}$

3.  $M_z = n \mu_B \frac{e^b - e^{-b}}{e^b + e^{-b}} = n \mu_B \tanh(b) \quad ; \quad M_x = M_y = 0$

4.  $kT \ll \mu_B B$  :  $M_z = n\mu_B$   
 $kT \gg \mu_B B$  :  $M_z = n\mu_B b = \frac{n\mu_B^2 B}{kT}$
- 17 1.  $N(E_\gamma, v) = N_0 \frac{(\Gamma/2)^2}{[E_\gamma - E_0(1 - \frac{v}{c})]^2 + (\Gamma/2)^2}$   
 2.  $R(v) = N_0 n d \sigma_0 \frac{\Gamma}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{[(x + \frac{2E_0 v}{\Gamma c})^2 + 1](x^2 + 1)}$  ;  $x = \frac{E_\gamma - E_0}{\Gamma/2}$
- 18 1.  $N_1(E_1) = \frac{2}{\pi \Gamma_1} \frac{1}{4(\frac{E_1 - E_0}{\Gamma_1})^2 + 1}$   
 2.  $N(E) = \frac{4}{\pi^2 \Gamma_1 \Gamma_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_1}{[4(\frac{E_1 - E_0}{\Gamma_1})^2 + 1][4(\frac{E_1 - E}{\Gamma_2})^2 + 1]}$   
 3.  $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$
- 19 1.  $\tau = \frac{1}{\lambda_1 + \lambda_2}$  ;  $\Gamma = \hbar(\lambda_1 + \lambda_2)$   
 2.  $\tau = 1.40 \times 10^{-7} \text{ s}$  ;  $\Gamma = 4.70 \times 10^{-9} \text{ eV}$
- 20 1.  $\langle t \rangle = \tau$  ;  $\Delta t = \tau$   
 2.  $\langle E \rangle = E_0$  ;  $\Delta E \Rightarrow \infty$
- 21  $\Delta\tau \simeq 4.6 \times 10^{-20} \text{ s}$
- 22  $(\Delta x)_0 \simeq (\frac{\hbar}{m \omega_0})^{1/2}$  ;  $E_0 \simeq \hbar \omega_0$
- 23  $B = 33.2 \text{ T}$
- 24 1.  $z = \frac{d(D+d/2)}{v_y^2} \frac{F_z}{M}$   
 2.  $g = \frac{2\bar{z}kT}{d(D+d/2)\mu_B(\frac{\partial B_z}{\partial z})} = 1.89$  ( $g_e = 2.00$ )
- 25 1.  $P(f \leftarrow i) = \cos^2 \Theta$   
 2., 3.  $\frac{Z_f(30^\circ)}{Z_i} = 0.738 \pm 0.016$  ;  $P(f \leftarrow i) = 0.750$   
 $\frac{Z_f(45^\circ)}{Z_i} = 0.507 \pm 0.013$  ;  $P(f \leftarrow i) = 0.500$
- 26 1.  $\Delta F = \sqrt{Z_1 Z_2} \sqrt{Z_1 + Z_2}$   
 2.  $\Delta F = 2Z_1 \sqrt{Z_1} \neq Z_1 \sqrt{2Z_1}$  (!)
- 27 1.  $(\frac{E_y}{E_{0y}} - \frac{E_x}{E_{0x}} \cos \epsilon)^2 = (1 - (\frac{E_x}{E_{0x}})^2) \sin^2 \epsilon$  ; Ellipse: quadratische Gleichung in  $E_x, E_y$  ;  $|E_x| \leq E_{0x}$  ,  $|E_y| \leq E_{0y}$  (beschränkt)  
 Im Hauptachsensystem:  $(\frac{E_{x'}}{E_{0x'}})^2 + (\frac{E_{y'}}{E_{0y'}})^2 = 1$   
 2.  $\epsilon = 0, \pi$  (oder  $E_{0x} = 0$ , oder  $E_{0y} = 0$ )  
 3.  $E_{0x} = E_{0y}$  ;  $\epsilon = \frac{\pi}{2}$  : linkszirkular ;  $\epsilon = \frac{3\pi}{2}$  : rechtszirkular



Zu 27.1

4. Basis  $(x, y)$ :

$$x : E_x(z, t) = E_{0x} \cos(kz - \omega t) \quad , \quad E_y(z, t) \equiv 0$$

$$y : E_x(z, t) \equiv 0 \quad , \quad E_y(z, t) = E_{0y} \cos(kz - \omega t + \epsilon)$$

Basis  $(R, L)$ :

$$R : E_{x'}(z, t) = \frac{E_{0x'} + E_{0y'}}{2} \cos(kz - \omega t) \quad ,$$

$$E_{y'}(z, t) = \frac{E_{0x'} - E_{0y'}}{2} \sin(kz - \omega t)$$

$$L : E_{x'}(z, t) = \frac{E_{0x'} - E_{0y'}}{2} \cos(kz - \omega t) \quad ,$$

$$E_{y'}(z, t) = -\frac{E_{0x'} + E_{0y'}}{2} \sin(kz - \omega t)$$

$$5. P(x \leftarrow p) = \frac{E_{0x}^2}{E_{0x}^2 + E_{0y}^2} \quad ; \quad P(y \leftarrow p) = \frac{E_{0y}^2}{E_{0x}^2 + E_{0y}^2} \quad ; \quad P(x \leftarrow p) + P(y \leftarrow p) = 1$$

$$P(R \leftarrow p) = \frac{1}{2} \frac{(E_{0x'} + E_{0y'})^2}{E_{0x'}^2 + E_{0y'}^2} \quad ; \quad P(L \leftarrow p) = \frac{1}{2} \frac{(E_{0x'} - E_{0y'})^2}{E_{0x'}^2 + E_{0y'}^2}$$

$$P(R \leftarrow p) + P(L \leftarrow p) = 1$$

28 1.  $\sum_m P(m \leftarrow u) = 1 \quad ; \quad m = -1, 0, 1 \quad ; \quad u$ : beliebiger Zustand des Drehimpulses

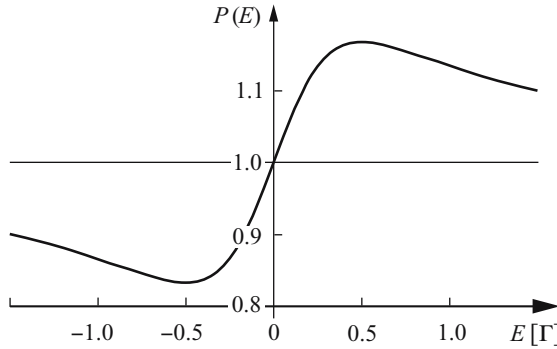
$$2. P(m \leftarrow m') = \delta_{mm'} \quad ; \quad m' = -1, 0, 1$$

3. Stern-Gerlach-Experiment der Abb. 3.8, mit drei Teilstrahlen.

29  $d \simeq 300 \text{ km}$  (!)

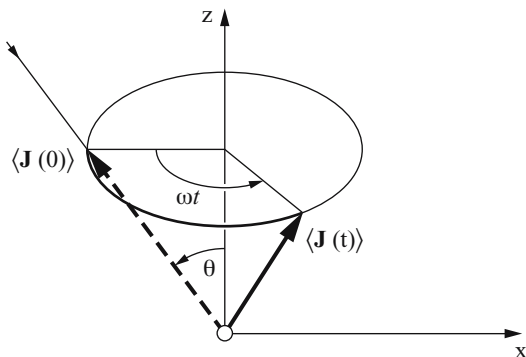
30 1.  $d = 0.856 \times 10^{-6} \text{ m}$  ; linkszirkular

2. Orientierung der optischen Achse in  $y$ -Richtung (Abb. 3.17).
  3.  $\langle R|i \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}}$  ;  $\langle L|i \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\pi}{4}}$
  4. Rechtszirkular polarisiert
  5. In  $i$ -Richtung linear polarisiert
  6.  $\langle R|i \rangle = \overline{\langle i|R \rangle}$
- 31**
1. Der untere Strahl muss ausgeblendet werden.
  2.  $\frac{I(m_z=1/2)}{I_0} = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}$  ;  $\frac{I(m_z=-1/2)}{I_0} = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}$
- 32**
1.  $\langle J_z(t) \rangle = 0$
  2.  $\omega = 5.11 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$
- 33** –
- 34**
1.  $Z(t) = Z_0 e^{-t/\tau_\mu} \left[ 1 + \frac{1}{3} \sin \left( \frac{g e B}{2 m_\mu} t \right) \right]$   
 $\tau_\mu = 2.20 \times 10^{-6} \text{ s}$  ;  $g = 2.00$  ;  $m_\mu = 105.7 \text{ MeV}/c^2$
  2.  $P(E) = 1 + \frac{1}{3} \frac{2E}{\Gamma} \frac{1}{(\frac{2E}{\Gamma})^2 + 1}$  ;  $\Gamma = \hbar/\tau_\mu$



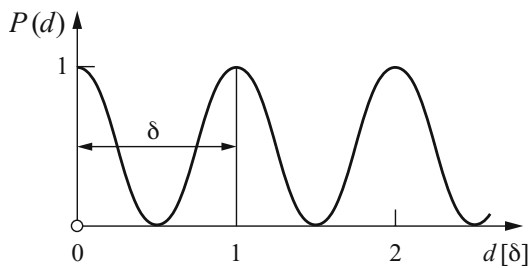
- 35**
1.  $N(E; 0, \tau) = Z_0 \frac{\hbar}{\Gamma} \left[ \left( 1 - \frac{1}{e} \right) - \frac{1}{3} \frac{1}{1 + (\frac{2E}{\Gamma})^2} \left( 1 - \frac{1}{e} F\left(\frac{2E}{\Gamma}\right) \right) \right]$   
 $F(x) \equiv \cos x - x \sin x$   
 $N(E; \tau, \infty) = Z_0 \frac{\hbar}{\Gamma} \frac{1}{e} \left[ 1 - \frac{1}{3} \frac{1}{1 + (\frac{2E}{\Gamma})^2} F\left(\frac{2E}{\Gamma}\right) \right]$
  2.  $P(E; 0, \tau) = 1 - \frac{1}{3(1-\frac{1}{e})} \frac{1}{1 + (\frac{2E}{\Gamma})^2} \left[ 1 - \frac{1}{e} F\left(\frac{2E}{\Gamma}\right) \right]$   
 $P(E; \tau, \infty) = 1 - \frac{1}{3} \frac{1}{1 + (\frac{2E}{\Gamma})^2} F\left(\frac{2E}{\Gamma}\right)$

**36** 1.  $\langle J_x(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \left( \frac{\Delta E_B}{\hbar} t \right)$  ;  $\langle J_y(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \left( \frac{\Delta E_B}{\hbar} t \right)$   
 $\langle J_z(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta$

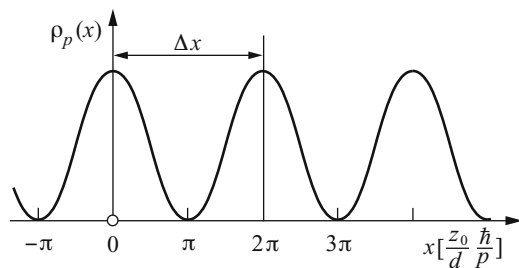


2.  $\omega = \frac{\Delta E_B}{\hbar}$  : unabhängig von  $\theta$

**37**  $P(d) = \cos^2 \left( \frac{|g|eB\lambda}{4\hbar 2\pi} d \right)$  ; Periode  $\delta = 5.65 \text{ cm}$

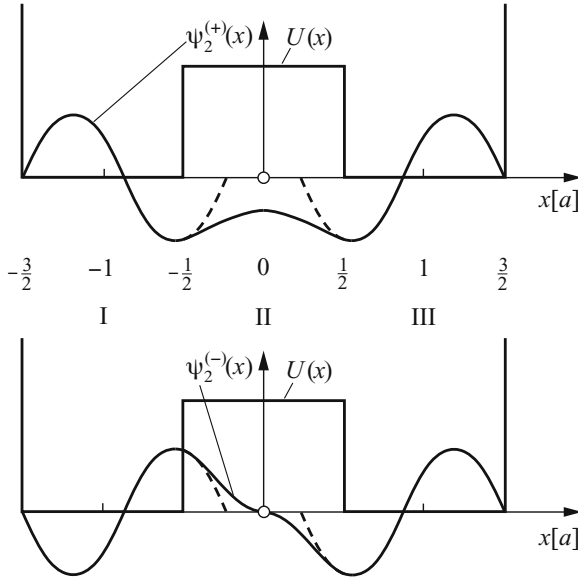


**38** 1.  $\rho_p(x) \propto \left[ 1 + \cos \left( \frac{p}{\hbar} \frac{d}{z_0} x \right) \right]$



2.  $\Delta x = 73.2 \mu\text{m}$
- 39** 1. (a)  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{-\frac{|x|}{\lambda}}$   
 (b)  $\psi(x) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{-\frac{x^2}{\lambda^2}}$
2. (a)  $\hat{\psi}(p) = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi\hbar}} \frac{1}{1 + \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 p^2}$   
 (b)  $\hat{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{\lambda}{\hbar}} e^{-\left(\frac{\lambda}{2\hbar}\right)^2 p^2}$
3.  $a = a' = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$
4.  $\Delta X = \frac{\lambda}{2}$  ;  $\Delta P = \frac{\hbar}{\lambda}$  ;  $\Delta X \Delta P = \frac{\hbar}{2}$  : Minimum (!)
- 40**  $\langle u_p | u_{p'} \rangle = 0$  für  $p \neq p'$
- 41**  $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$  ;  $\Delta J_x = \Delta J_y = \frac{\hbar}{2}$
- 42** 1.  $\iiint \overline{\psi_E(\mathbf{r})} \psi_{E'}(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{EE'}$   
 2. -
- 43** 1.  $C = \frac{1}{\sqrt{2}}$   
 2.  $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) e^{-i\omega t} [1 + 2 \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right) e^{-i3\omega t}]$   
 $\rho(x, t) = \frac{1}{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} x\right) [1 + 4 \cos^2\left(\frac{\pi}{a} x\right) + 4 \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right) \cos(3\omega t)]$   
 3.  $\int_0^a \rho(x, t) dx = 1$   
 4.  $\langle X(t) \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos(3\omega t)$   
 5.  $T = 0.92 \times 10^{-15} \text{ s}$
- 44**  $t_0 = \sqrt{3} \frac{m\lambda^2}{2\hbar} = 4.54 \text{ s}$
- 45** -
- 46** -
- 47**  $x_0 = \frac{\hbar}{2} [2m(U_0 - E)]^{-1/2} = 0.59 \times 10^{-15} \text{ m} = 0.59 \text{ fm}$
- 48**  $U_C = 24 \text{ MeV}$
- 49**  $U_C = 0.72 \text{ MeV}$  ( $> 0.19 \text{ MeV}$ )
- 50**  $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$  ;  $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a\sqrt{\pi}}} \left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$  ;  $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$
- 51** 1.  $\Delta X = \frac{a}{\sqrt{2}}$  ;  $\Delta P = \frac{\hbar}{a} \frac{1}{\sqrt{2}}$  ;  $\Delta X \Delta P = \frac{\hbar}{2}$  (Minimum)  
 2.  $\Delta X = \sqrt{\frac{3}{2}} a$  ;  $\Delta P = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hbar}{a}$  ;  $\Delta X \Delta P = \frac{3}{2} \hbar$  ( $> \frac{\hbar}{2}$ )

- 52  $\psi_2^{(+)}(x)$ : Bereich I, III:  $\frac{\lambda_2^{(+)}}{a} = 1.245$  ; Bereich II:  $\kappa_2^{(+)} a = 2.186$   
 $\psi_2^{(-)}(x)$ : Bereich I, III:  $\frac{\lambda_2^{(-)}}{a} = 1.215$  ; Bereich II:  $\kappa_2^{(-)} a = 1.873$



- 53 1.  $\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon-1}} = \tan(\gamma\sqrt{\epsilon}) \tan(\frac{\gamma}{2}\sqrt{\epsilon-1})$   
 2.  $\epsilon_0 = 1.32$
- 54 1.  $-\frac{d}{2} + a \leq x \leq -\frac{d}{2}$ :  $\psi_n^{(+)}(x) = -\frac{1}{\sqrt{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x + \frac{d}{2})]$  ;  $\psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x + \frac{d}{2})]$   
 $-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}$ :  $\psi_n^{(+)}(x) = \psi_n^{(-)}(x) \equiv 0$   
 $\frac{d}{2} \leq x \leq (\frac{d}{2} + a)$ :  $\psi_n^{(+)}(x) = \psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x - \frac{d}{2})]$   
 $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  ;  $P_l = P_r = \frac{1}{2}$  (!)
2.  $\frac{d}{2} \leq x \leq (\frac{d}{2} + a)$ :  $\psi_n^{(r)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x - \frac{d}{2})]$  ;  $\psi_n^{(r)}(x) \equiv 0$  überall sonst.  
 $-\frac{d}{2} + a \leq x \leq -\frac{d}{2}$ :  $\psi_n^{(l)}(x) = -\sqrt{\frac{2}{a}} \sin[n\frac{\pi}{a}(x + \frac{d}{2})]$  ;  $\psi_n^{(l)}(x) \equiv 0$  überall sonst.  
 $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$



3.  $\psi_n(x) = \alpha \psi_n^{(+)}(x) + \beta \psi_n^{(-)}(x)$  , oder  $\psi_n(x) = \gamma \psi_n^{(r)}(x) + \delta \psi_n^{(l)}(x)$ ,  
 mit  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  ,  $|\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$  ; 2-fach entartet

55  $\psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \frac{1}{r} \sin(n \frac{\pi}{R} r)$  ;  $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mR^2}$  ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

56 1.  $\tan\left(\frac{R\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \sqrt{\epsilon}\right) = -\sqrt{\frac{\epsilon}{1-\epsilon}}$  ;  $\epsilon \equiv \frac{E}{U_0}$   
 2. -

57 1.  $E_n = -\frac{me^2}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$   
 2.  $E_\gamma = 0.0766 \text{ MeV} = 76.6 \text{ keV}$

58  $\langle R \rangle = \frac{3}{2} a_0$  ;  $\langle R^2 \rangle = 3 a_0^2$  ;  $\langle X \rangle = \langle Y \rangle = \langle Z \rangle = 0$   
 $\langle X^2 \rangle = \langle Y^2 \rangle = \langle Z^2 \rangle = a_0^2$  ;  $\Delta X = a_0$  ;  $\Delta R = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0$

59  $\langle \rho \rangle = \frac{45\pi}{32} a_0 = 4.42 a_0$  ;  $\langle Z \rangle = 0$  ;  $\Delta \rho = \sqrt{24 - \left(\frac{45\pi}{32}\right)^2} a_0 = 2.12 a_0$  ;  $\Delta Z = \sqrt{6} a_0 = 2.45 a_0$  ;  $\Delta \rho / \langle \rho \rangle = 0.48$

Bohrsches Atommodell:  $\rho = 4 a_0$  ;  $z = 0$

60  $\langle \rho \rangle = \frac{30\pi}{32} a_0 = 2.95 a_0$  ;  $\langle Z \rangle = 0$   
 $\Delta \rho = \sqrt{12 - \left(\frac{30\pi}{32}\right)^2} a_0 = 1.82 a_0$  ;  $\Delta Z = \sqrt{18} a_0 = 4.24 a_0$

61 1.  $\ddot{z}(t) + \omega_0^2 z(t) = 0$  ;  $\omega_0^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R^3 m_e}$   
 2.  $\bar{E} = e\hbar c \sqrt{\frac{\mu_0 Z}{R^3 m_e}}$  ;  $\bar{E} [\text{eV}] = 10.4 \sqrt{Z}$  : ultraviolett  
 3.  $\Gamma = \frac{2}{3} \hbar c \frac{Z^2 e^4 \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^2}{R^3 m_e^2}$  ;  $\Gamma [\text{eV}] = 1.04 \times 10^{-6} Z^2$  ( $\Gamma \ll \bar{E}$ )  
 4.  $\tau = 0.63 \times 10^{-9} \text{ s}$

62  $\tau = \tau_0 = \tau_{\pm 1} = \left(\frac{81}{16}\right)^2 \frac{c}{r_0} \left(\frac{\hbar}{m_e c^2}\right) \frac{1}{\alpha^4} = 1.59 \times 10^{-9} \text{ s}$

63  $P_0(\theta) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$  ;  $P_{\pm 1}(\theta) = \frac{3}{16\pi} (1 + \cos^2 \theta)$

64 Drehimpulserhaltung (Photon hat Spin Eins!)

65 1.  $\tau_{3s} = \frac{1}{\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{-1}}}$   
 2. -

66 1.  $\frac{Z_{2 \rightarrow 1}^{(\text{ind.})}}{Z_{2 \rightarrow 1}^{(\text{spont.})}} = \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$   
 2.  $\nu < \frac{kT}{h} \simeq 6.2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$

67 1.  $E_{11} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$  ;  $\psi_{11}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right)$

$$2. E_{12} = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \quad ; \quad \psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_2\right)$$

$$\psi_{21}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right)$$

3. identisch mit 1.

$$4. E_{12} = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \quad ; \quad \psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[ \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_2\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_1\right) \right]$$

Entartung aufgehoben

$$68 \quad 1. \sqrt{\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle} = \frac{a}{\sqrt{6}} \sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2}}$$

2. Nein

$$69 \quad 1. \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle^{(\text{versch.})} = \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B$$

$$2. \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle^{(\text{ident.})} = \langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B - 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2$$

$$70 \quad 1. \psi_{ABC}(x_1, x_2, x_3) = \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) \psi_C(x_3)$$

$$\psi_{ACB}(x_1, x_2, x_3) = \psi_A(x_1) \psi_C(x_2) \psi_B(x_3)$$

$$\psi_{BAC}(x_1, x_2, x_3) = \psi_B(x_1) \psi_A(x_2) \psi_C(x_3)$$

$$\psi_{BCA}(x_1, x_2, x_3) = \psi_B(x_1) \psi_C(x_2) \psi_A(x_3)$$

$$\psi_{CAB}(x_1, x_2, x_3) = \psi_C(x_1) \psi_A(x_2) \psi_B(x_3)$$

$$\psi_{CBA}(x_1, x_2, x_3) = \psi_C(x_1) \psi_B(x_2) \psi_A(x_3)$$

$$2. \psi^{(a)}(x_1, x_2, x_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) \psi_C(x_3) - \psi_A(x_1) \psi_B(x_3) \psi_C(x_2)$$

$$+ \psi_A(x_2) \psi_B(x_3) \psi_C(x_1) - \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) \psi_C(x_3)$$

$$+ \psi_A(x_3) \psi_B(x_1) \psi_C(x_2) - \psi_A(x_3) \psi_B(x_2) \psi_C(x_1) \}$$

$$3. \psi^{(s)}(x_1, x_2, x_3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) \psi_C(x_3) + \psi_A(x_1) \psi_B(x_3) \psi_C(x_2)$$

$$+ \psi_A(x_2) \psi_B(x_3) \psi_C(x_1) + \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) \psi_C(x_3)$$

$$+ \psi_A(x_3) \psi_B(x_1) \psi_C(x_2) + \psi_A(x_3) \psi_B(x_2) \psi_C(x_1) \}$$

$$4. \psi^{(s)}(x_1, x_2, x_3) = \psi_A(x_1) \psi_A(x_2) \psi_A(x_3)$$

A: Grundzustand des Einteilchenproblems

$$71 \quad 1. \langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0 \quad ; \quad \langle S_z \rangle = \pm \hbar \quad ; \quad \langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2}$$

$$\langle S_z^2 \rangle = \hbar^2 \quad ; \quad \langle S^2 \rangle = 2 \hbar^2 \quad ; \quad \langle S_{\perp}^2 \rangle = \hbar^2$$

$$\Delta S_x = \Delta S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \Delta S_z = 0$$

2.  $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \langle S_z \rangle = 0$  ;  $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \hbar^2$  ;  $\langle S_z^2 \rangle = 0$   
 $\langle S^2 \rangle = \langle S_{\perp}^2 \rangle = 2\hbar^2$  ;  $\Delta S_x = \Delta S_y = \hbar$  ;  $\Delta S_z = 0$

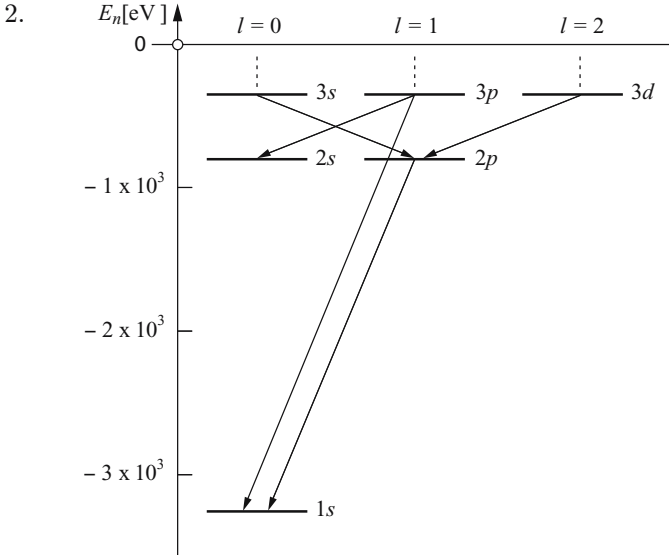
3.  $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \langle S_z \rangle = \langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle = \langle S^2 \rangle = \langle S_{\perp}^2 \rangle$   
 $= \Delta S_x = \Delta S_y = \Delta S_z = 0$

72 1.  $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{21} = \frac{1}{24 a_0^3}$

2.  $\Delta E^{(sl)} = \frac{1}{16} m_e c^2 \alpha^4$  ;  $\Delta E^{(fs)} = \frac{1}{32} m_e c^2 \alpha^4 = 4.53 \cdot 10^{-10} \text{ eV}$

73  $\Delta E^{(2s)} = \frac{1}{8} \Delta E^{(1s)} = 0.735 \times 10^{-6} \text{ eV}$

74 1.  $E_n = -\frac{\mu c^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} = -\frac{3235}{n^2} \text{ eV}$  ,  $n = 1, 2, 3, \dots$   
 $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$  ( $\equiv$  (5.227))



3. Null ( $\vec{s} = 0$ )

75  $N^{(j_1, j_2)} \equiv N^{(J)} = 4j_1 j_2 + 2(j_1 + j_2) + 1$

76  $E_{22} = -2R_{\infty} = -27.2 \text{ eV}$  ;  $E_{1\infty} = -4R_{\infty} = -54.4 \text{ eV}$   
 $E_{22} > E_{1\infty}$ : (2, 2)-Zustand nicht gebunden

77  $E_{11} = -6.125 R_{\infty} = -83.36 \text{ eV}$

78 1.  $E_{11} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m a^2}$  ;  $\psi_{11}^{(s)}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin(\frac{\pi}{a} x_1) \sin(\frac{\pi}{a} x_2)$  ;  $J = S = 0$   
 2.  $\psi^{(s)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\frac{\pi}{a} x_1) \sin(\frac{2\pi}{a} x_2) + \sin(\frac{\pi}{a} x_2) \sin(\frac{2\pi}{a} x_1)]$

$$J = S = 0$$

$$\psi^{(a)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} [\sin(\frac{\pi}{a} x_1) \sin(\frac{2\pi}{a} x_2) - \sin(\frac{\pi}{a} x_2) \sin(\frac{2\pi}{a} x_1)]$$

$$J = S = 1 \quad ; \quad E_{12} = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} : \text{ 4-fach entartet}$$

$$3. \Delta E \simeq \frac{\alpha \hbar c}{a} \quad ; \quad a \ll \frac{\pi^2 \hbar}{\alpha m c} \simeq 5 \times 10^{-10} \text{ m}$$

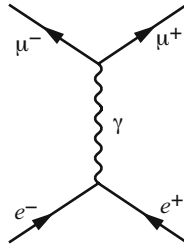
79 -

80 Fermionen:  $(p, \pi^-)$ ,  $({}^2_1\text{D}, e^-)$ ,  $({}^4_2\text{He}, e^-)$ ,  $({}^7_3\text{Li})$

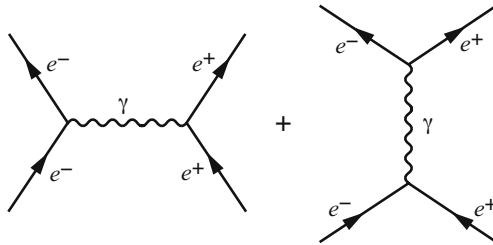
Bosonen:  $(e^+, e^-)$ ,  $(p, e^-)$ ,  $(\text{H}_2)$ ,  $(p, \mu^-)$ ,  $(\bar{p}, e^+)$ ,  $({}^2_1\text{D})$ ,  $({}^4_2\text{He})$ ,  $({}^4_2\text{He}, 2e^-)$ ,  $({}^7_3\text{Li}, 3e^-)$

81 *Metall*

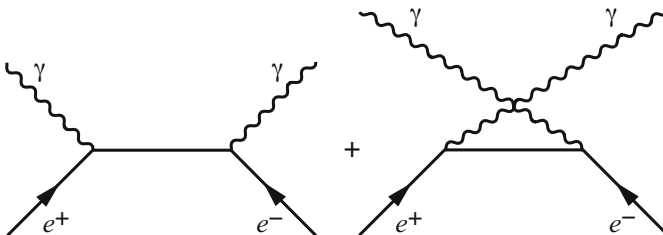
82 1.



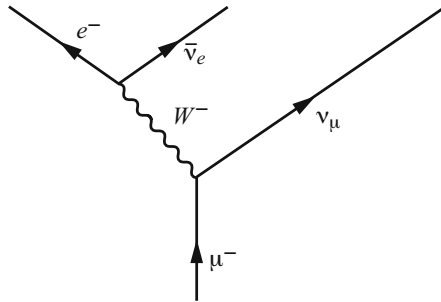
2.



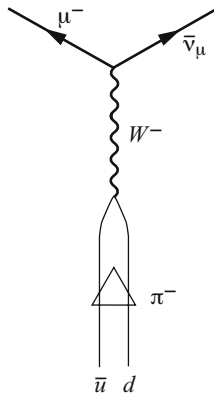
3.



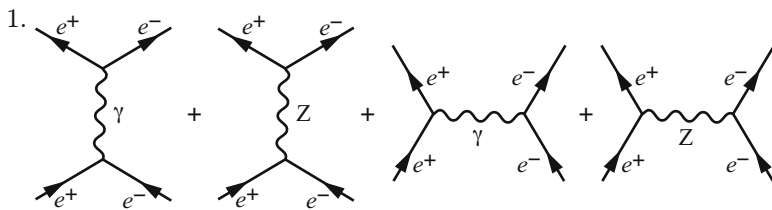
83 1.  $\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$



2.  $\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$

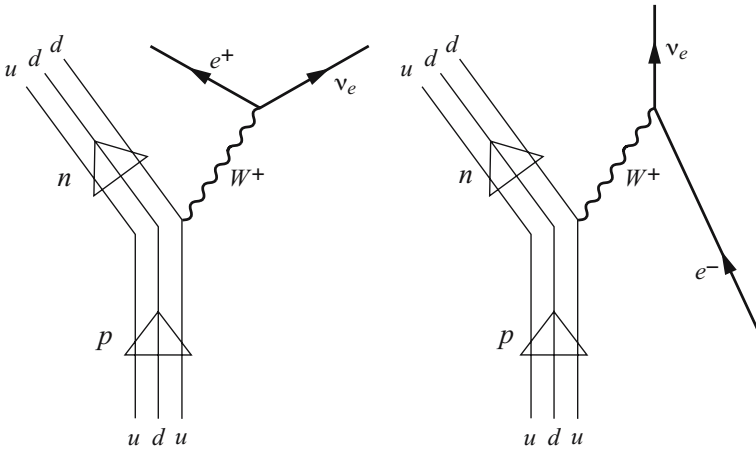


84



2. Alle!

85  $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$  ;  $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$



# A Statistische Fehler

Ein physikalisches Messresultat ohne Fehlerangabe ist bekanntlich kein Resultat, denn jede Messung hat eine Grenze der Genauigkeit, die man kennen muss. Dies gilt insbesondere für die große Klasse von Messungen der Quantenphysik, die auf der Zählung von Ereignissen beruhen, welche statistischen Schwankungen unterworfen sind. Die Unsicherheiten solcher Messungen nennen wir „*statistische Fehler*“.

Als konkrete Situation wählen wir das Demonstrationsexperiment *Projektionswahrscheinlichkeit* (Abschn. 3.2, Abb. 3.6).

Wir vereinfachen zunächst das Messproblem, indem wir den Winkel  $\theta$  zwischen den Polarisationsrichtungen  $x$  und  $i$  speziell wählen, nämlich  $\theta = 45^\circ$ . Damit ist nach (3.20)

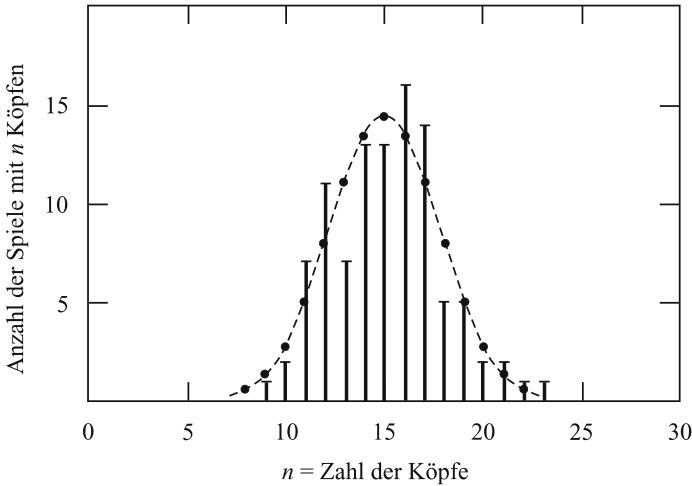
$$P_a = P_b = 1/2 \quad , \quad (\text{A.1})$$

d. h. die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Photon des einlaufenden Strahls im Ausgangsstrahl  $a$  bzw.  $b$  zu finden, ist je 50%. Zudem setzen wir ideale Detektoren voraus (100% Ansprechwahrscheinlichkeit für Photonen und Dunkelzählrate  $Z_{\text{dunkel}} = 0$ ). Wir zählen die Anzahl der Photonen des Strahls  $a$ , die im Detektor  $D_a$  während einer bestimmten Messzeit registriert werden. Das Resultat sei  $Z$ . Wir stellen die Frage: *Wie groß ist der statistische Fehler der Einzelmessung  $Z$ ?*

Die physikalische Grundvoraussetzung ist die, dass die Photonen *unabhängig* voneinander sind: Das Schicksal jedes Photons (Strahl  $a$  oder Strahl  $b$ ) ist unabhängig vom Schicksal jedes anderen.

Wir denken uns eine feste Photonenzahl  $N$  im einlaufenden Strahl, sagen wir  $N = 30$  Photonen. Diesen Photonen ordnen wir 30 identische Münzen zu. Wir schütteln diese kräftig durcheinander, werfen sie auf und schauen nach, wie oft der Kopf oben ist; Kopf oben bedeutet Strahl  $a$ , Zahl oben entspricht Strahl  $b$ . Dieses Spiel wiederholen wir 100 Mal; das Ergebnis ist als Histogramm in Abb. A.1 dargestellt.

Das Histogramm zeigt (erwartungsgemäß), dass die häufigsten Konfigurationen diejenigen in der Umgebung von  $n = N/2 = 15$  sind. Würden wir die Anzahl der Spiele erhöhen, dann würde die Ordinatenachse anwachsen und die Endpunkte der vertikalen Balken würden sich immer mehr einer glatten



**Abb. A.1.** Anzahl Spiele mit  $n$  Mal Kopf, als Funktion von  $n$ , für 100 Spiele mit 30 Münzen. Die Punkte auf der Kurve repräsentiert die wahrscheinlichsten Werte.

Kurve annähern. In der Abb. A.1 beobachten wir *statistische Fluktuationen* relativ zu einem glatten (regulären) Verlauf der Werte.

Die nächste Frage lautet: Können wir den glatten Verlauf bestimmen, d. h. den *wahrscheinlichsten Wert* für jede Konfiguration  $n$  berechnen? Die Idee ist einfach: Wir stellen uns alle möglichen Ergebnisse von Würfeln mit 30 Münzen vor, zählen diejenigen mit genau  $n$  Köpfen und dividieren diese Zahl durch die Gesamtzahl der möglichen Würfe von 30 Münzen.

Sei  $C_N(n)$  die Zahl der Würfe von  $N$  Münzen, welche zu genau  $n$  Köpfen führen. Dann ist die Wahrscheinlichkeit  $P_N(n)$  für die Konstellation  $n$  gegeben durch

$$P_N(n) = \frac{C_N(n)}{2^N} \quad . \tag{A.2}$$

Der Nenner  $2^N$  ist die Gesamtzahl der Würfe von  $N$  Münzen. Für  $C_N(n)$  findet man den allgemeinen Ausdruck

$$C_N(n) = \frac{N!}{n!(N - n)!} \quad . \tag{A.3}$$

Multiplizieren wir die Wahrscheinlichkeit (A.2) (für  $N = 30$ ) mit 100 (Zahl der Würfe), dann erhalten wir die in Abb. A.1 eingezeichneten wahrscheinlichsten Werte.

Zur Erläuterung der Resultate (A.2), (A.3) wählen wir das einfache **Beispiel** mit drei Münzen ( $N = 3$ ). Die (8) möglichen Würfe sind ( $K$ : Kopf,  $Z$ : Zahl):

$$KKK, KKZ, KZK, KZZ, ZKK, ZKZ, ZZK, ZZZ \quad . \tag{A.4}$$



Der Darstellung (A.4) entnehmen wir

$$C_3(3) = 1 \quad , \quad C_3(2) = 3 \quad , \quad C_3(1) = 3 \quad , \quad C_3(0) = 1 \quad , \quad (\text{A.5})$$

und daraus folgt

$$P_3(3) = \frac{1}{8} \quad , \quad P_3(2) = \frac{3}{8} \quad , \quad P_3(1) = \frac{3}{8} \quad , \quad P_3(0) = \frac{1}{8} \quad , \quad (\text{A.6})$$

in Übereinstimmung mit den allgemeinen Ausdrücken (A.3) und (A.2).

Im nächsten Schritt verallgemeinern wir das Resultat (A.2), indem wir die Annahme (A.1) aufgeben und *beliebige* Werte der Projektionswahrscheinlichkeiten  $P_a, P_b$  zulassen. Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Photon des einlaufenden Strahls im Strahl  $a$  zu zählen, sei  $p (\equiv P_a)$ . Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Photon im Strahl  $b$  zu finden,  $(1-p)$ . Wenn wir verlangen, dass von  $N$  Photonen genau  $n$  im Strahl  $a$  detektiert werden, heißt es, dass die übrigen  $(N-n)$  Photonen im Strahl  $b$  gezählt werden können. Die allgemeine Wahrscheinlichkeit  $P_N(n)$  für die Konstellation  $n$  im Strahl  $a$  ist dann gegeben durch das Produkt der Anzahl der Konstellationen  $n$  aller  $N$  Photonen ( $C_N(n)$ ) mit der Wahrscheinlichkeit,  $n$  Photonen im Strahl  $a$  und  $(N-n)$  Photonen im Strahl  $b$  zu finden. Dies bedeutet

$$P_N(n) = C_N(n) p^n (1-p)^{N-n} \quad , \quad (\text{A.7})$$

denn  $p^n \cdot (1-p)^{N-n}$  ist die Wahrscheinlichkeit dafür, *genau*  $n$  Photonen im Strahl  $a$  zu finden. (Im Spezialfall  $p = 1/2$  geht (A.7) in (A.2) über.) Wir setzen (A.3) in (A.7) ein und erhalten schließlich

$$P_N(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \quad . \quad (\text{A.8})$$

Dieses Resultat heißt **Binomialverteilung**.

Fast alle Fälle der Praxis haben mit Messungen *großer* Zählraten zu tun ( $Z \gg 1$ ) oder allgemein mit

$$N \gg 1 \quad . \quad (\text{A.9})$$

Aus diesem Grund werden wir uns – in der Berechnung der statistischen Fehler (und der Fehlerfortpflanzung) – auf den Grenzfall (A.9) beschränken. Die Binomialverteilung lässt sich in diesem Fall mathematisch umformen. Man findet die einfache analytische Verteilungsfunktion<sup>1</sup>, genannt **Gauss-Verteilung**:

$$P(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta n} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{n-\bar{n}}{\Delta n} \right)^2} \quad (\text{A.10})$$

<sup>1</sup> Siehe z. B. *F. Reif*, Statistical Physics, Berkeley Physics Course, Vol. 5, McGraw-Hill (1967), Appendix A.1.

Darin bedeutet

$$\bar{n} = Np \quad (\text{A.11})$$

die wahrscheinlichste Zählrate, und  $\Delta n$  ist die spektrale Breite der Verteilung (definiert als  $\Delta n = \sqrt{(n - \bar{n})^2}$ ). Es gilt

$$\Delta n = \sqrt{Np(1-p)} \quad . \quad (\text{A.12})$$

Im Gegensatz zur Binomialverteilung (A.8; gültig für beliebige  $N$ -Werte) können wir die Gauss-Verteilung (A.10) als *kontinuierliche* Funktion von  $n$  auffassen. Denn für  $N \gg 1$  sind im Allgemeinen auch  $\bar{n}$  und  $\Delta n$  große Zahlen, und für benachbarte Werte von  $n$  ändert sich die Funktion  $P(n)$  deshalb wenig.

Für *quantitative* Auswertungen ist es zweckmäßig, die (kontinuierliche) Variable

$$z = \frac{n - \bar{n}}{\Delta n} \quad (\text{A.13})$$

einzuführen, welche die Abweichungen vom wahrscheinlichsten Wert der Verteilung beschreibt. Aus (A.10) folgt damit

$$P(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}z^2} \quad , \quad (\text{A.14})$$

wobei  $P(z)$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung – in Einheiten  $(\Delta n)^{-1}$  – ausdrückt, mit der Normierung

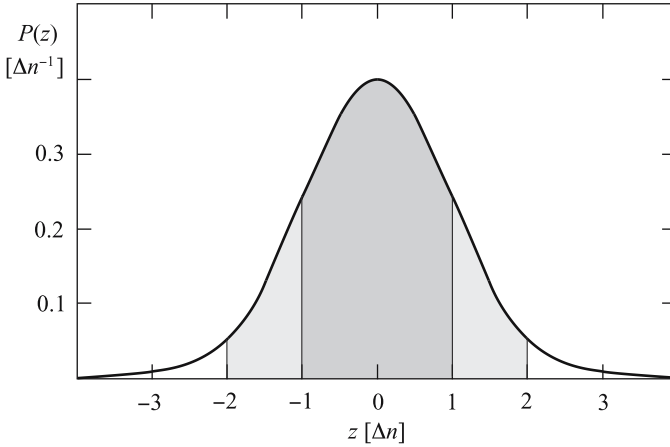
$$\int_{-\infty}^{\infty} P(z) dz = 1 \quad . \quad (\text{A.15})$$

Die Verteilung (A.14) ist in Abb. A.2 dargestellt.

Die Gauss-Verteilung in der Form (A.14) ist universell, d. h. gültig für beliebige Werte von  $N$  ( $\gg 1$ ) und  $p$ .

Mit diesem Ergebnis sind wir in der Lage, die eingangs gestellte Frage nach dem *statistischen Fehler der Einzelmessung*  $Z$  zu beantworten, und zwar für beliebige Wahrscheinlichkeiten  $p$  und Photonzahlen  $Z$ . Die Gauss-Verteilung (A.10) enthält die gesamte mögliche Information über die statistische Natur des Zählxperiments.

Das Ziel des Experiments ist es, die mittlere (wahrscheinlichste) Zählrate  $\bar{n}$  (A.11) zu bestimmen. Das Ergebnis  $Z$  einer Einzelmessung liegt in der Nähe von  $\bar{n}$ , wird aber im Allgemeinen von  $\bar{n}$  verschieden sein (statistische Schwankung). Da wir aber den Wert von  $\bar{n}$  nicht kennen (– würden wir ihn kennen, wäre das Experiment überflüssig!), können wir natürlich die Abweichung zwischen  $Z$  und  $\bar{n}$  nicht angeben. Das einzige, das wir tun können, ist eine *Schätzung* zu geben, welche ein *Maß* für die statistische Schwankung der Einzelmessung  $Z$  darstellt; dieses Maß heißt *statistischer Fehler*.



**Abb. A.2.** Gauss-Verteilung in Einheiten der reziproken spektralen Breite  $\Delta n$ , als Funktion der Abweichung  $z$  vom wahrscheinlichsten Wert.

Konventionell ist es üblich, die *spektrale Breite*  $\Delta n$  (A.12) – auch *Standardabweichung* genannt – als statistischen Fehler von  $Z$  einzuführen. Der statistische Fehler  $\Delta Z$  von  $Z$  ist also definiert als

$$\Delta Z \equiv \Delta n = \sqrt{\bar{Z}} \quad , \quad (\text{A.16})$$

wobei  $\bar{Z} = Np(1 - p)$  die wahrscheinlichste Zählrate im Strahl  $a$  ist (die wir nicht kennen). Da aber  $\sqrt{\bar{Z}} \ll \bar{Z}$  ist, muss der Messwert  $Z$  der Einzelmessung in der Nähe von  $\bar{Z}$  sein, und wir können mit (A.16) in guter Näherung schreiben

$$\boxed{\Delta Z \simeq \sqrt{\bar{Z}}} \quad Z \gg 1 \quad . \quad (\text{A.17})$$

Damit sind wir in der Lage, den statistischen Fehler der Einzelmessung in einfachster Weise aus der Einzelmessung selbst zu berechnen. Wir bezeichnen das Messresultat dann mit „ $Z \pm \Delta Z$ “.

Die genaue Bedeutung des statistischen Fehlers  $\Delta Z$  ist aus Abb. A.2 ersichtlich. Die Wahrscheinlichkeit  $W(\pm \Delta n)$  dafür, dass der Messwert  $Z$  im Intervall zwischen  $\bar{Z} - \Delta n$  und  $\bar{Z} + \Delta n$  liegt, ist gegeben durch

$$W(\pm \Delta n) = \int_{-1}^{+1} P(z) dz = 0.683 \quad . \quad (\text{A.18})$$

Wir erwarten also, dass der Messwert  $Z$  in 68 % der Fälle vom wahrscheinlichsten Wert (oder Mittelwert) um weniger als  $\Delta Z$  abweicht; in 32 % der Fälle wird die Abweichung größer sein als  $\Delta Z$ !

Anstelle der Relation (A.16) könnten wir den statistischen Fehler auch durch

$$\Delta Z \equiv 2 \Delta n = 2\sqrt{\bar{Z}} \simeq 2\sqrt{Z} \quad (\text{A.19})$$

definieren. Für diesen Fall wäre die Wahrscheinlichkeit

$$W(\pm 2\Delta n) = \int_{-2}^{+2} P(z) dz = 0.954 \quad , \quad (\text{A.20})$$

d. h. in 95 % der Fälle würde der Messwert  $Z$  vom Mittelwert um weniger als  $\Delta Z$  abweichen (siehe Abb. A.2).

Die große Bedeutung des einfachen Resultats (A.17) besteht darin, dass die physikalischen Voraussetzungen für seine Gültigkeit sehr allgemein sind. Es ist keineswegs auf das eingangs erwähnte Demonstrationsexperiment der Projektionswahrscheinlichkeit beschränkt.

Wir demonstrieren diesen Sachverhalt an einem scheinbar völlig anders gearteten **Beispiel**: Die Atomkerne einer radioaktiven Quelle emittieren einen bestimmten Typ von Quantonen, die in einem Detektor einzeln gemessen werden. Während einer gewissen Messzeit  $t$  zerfallen  $N$  Atomkerne, die je ein solches Quanton emittieren, und  $Z$  davon werden im Detektor gezählt, wobei  $Z \gg 1$ . Der statistische Fehler der Messung  $Z$  ist wiederum gegeben durch (A.17). Die Wahrscheinlichkeit  $p$  ist hier die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein von der Quelle emittiertes Quanton im Detektor gemessen wird. ( $(1-p)$  ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass es nicht gemessen wird.) Die Wahrscheinlichkeit  $p$  hängt ab von der Größe des Detektors, seinem Abstand zur Quelle (Raumwinkel) und seiner Ansprechwahrscheinlichkeit. In die Berechnung des statistischen Fehlers von  $Z$  geht aber nach (A.17) nur die Zahl  $Z$  selbst ein!

Die allgemeinen Voraussetzungen für die Gültigkeit von (A.17) sind:

- Es existiert *ein Messkanal* (Detektor), der  $Z$  Ereignisse registriert.
- Die einzelnen Ereignisse sind *unabhängig* voneinander.
- Die Zahl  $Z$  ist groß ( $Z \gg 1$ ).

In den Experimenten ist die physikalisch interessante Größe oft nicht direkt die Messzahl  $Z$ , sondern eine *Funktion* von einer oder mehrerer Messzahlen. Beispiele dafür sind etwa die Ausdrücke (3.19) im Abschn. 3.2, in welchen die Messzahlen  $Z'_a$ ,  $Z'$ ,  $Z_{\text{dunkel}}$  und  $Z'_b$  auftreten. Um die statistischen Fehler der physikalisch interessanten Größen  $Z_a/Z$ ,  $Z_b/Z$  zu bestimmen, müssen wir die **Gesetze der Fehlerfortpflanzung** kennen. Jeder Messzahl ist eine Gauss-Verteilung zugeordnet und damit ein statistischer Fehler (A.17). Aus den statistischen Fehlern der Messzahlen lassen sich die statistischen Fehler der Funktionswerte bestimmen.

Für die einfachsten Funktionen geben wir nachfolgend die Gesetze der Fehlerfortpflanzung explizit an. Diese gehören zu den unentbehrlichen Hilfsmitteln aller Atom-, Kern- und Teilchenphysiker.

- Summe oder Differenz zweier Messzahlen. Sei  $F = Z_1 \pm Z_2$ , dann gilt für die entsprechenden Fehler

$$(\Delta F)^2 = (\Delta Z_1)^2 + (\Delta Z_2)^2 = Z_1 + Z_2 \quad , \quad (\text{A.21})$$

oder

$$\Delta F = \sqrt{Z_1 + Z_2} \quad . \quad (\text{A.22})$$

In Worten: Das Quadrat des statistischen Fehlers der Summe (Differenz) ist gleich der Summe der Quadrate der statistischen Fehler der Summanden.

- *Produkt oder Quotient zweier Messzahlen.* Sei  $F = Z_1 Z_2$  bzw.  $F = \frac{Z_1}{Z_2}$ , dann gilt für die entsprechenden Fehler

$$\left(\frac{\Delta F}{F}\right)^2 = \left(\frac{\Delta Z_1}{Z_1}\right)^2 + \left(\frac{\Delta Z_2}{Z_2}\right)^2 = \frac{1}{Z_1} + \frac{1}{Z_2} \quad , \quad (\text{A.23})$$

oder

$$\frac{\Delta F}{F} = \sqrt{\frac{1}{Z_1} + \frac{1}{Z_2}} \quad . \quad (\text{A.24})$$

In Worten: Das Quadrat des relativen statistischen Fehlers eines Produkts (Quotients) ist gleich der Summe der Quadrate der relativen statistischen Fehler der Faktoren (bzw. von Dividend und Divisor).

Durch mehrfache Anwendung von (A.22) und (A.24) wurden beispielsweise die in Abb. 3.7 eingezeichneten statistischen Fehler berechnet.

Abschließend geben wir das *allgemeine Fehlerfortpflanzungsgesetz* an. Sei  $F(Z_1, Z_2, \dots, Z_k)$  eine beliebige Funktion der einzelnen, unabhängigen Messzahlen  $Z_i$  ( $i = 1, \dots, k$ ), die alle einer Gauss-Verteilung unterworfen sind. Der statistische Fehler des  $\Delta F$  des Funktionswertes ist dann gegeben durch

$$\Delta F = \sqrt{\sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial F}{\partial Z_i}\right)^2 (\Delta Z_i)^2} \quad , \quad (\text{A.25})$$

wobei  $\Delta Z_i$  die statistischen Fehler der Messzahlen sind und in den Funktionen der Summanden die Messwerte für  $Z_i$  einzusetzen sind.

# B Die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms

Wir präsentieren die vollständige Bestimmung der Wellenfunktionen der stationären Zustände von Wasserstoff. Der erste Teil der Herleitung bezieht sich auf ein beliebiges rotationssymmetrisches Potential  $U(\mathbf{r}) = U(r)$ ; die Spezialisierung auf das Coulomb-Potential erfolgt erst im zweiten Teil.

Die örtliche, zeitabhängige Wellenfunktion eines beliebigen stationären Zustandes der Energie  $E$  hat die Form

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(\mathbf{r}) \quad . \quad (\text{B.1})$$

Da das Potential rotationssymmetrisch ist, sind die natürlichen Koordinaten der Wellenfunktion die Kugelkoordinaten  $(r, \theta, \phi)$  (Abb. B.1).

Durch Einsetzen von (B.1) in die Schrödinger-Gleichung (5.72) finden wir die Differentialgleichung der ortsabhängigen Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$

$$E \psi(r, \theta, \phi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(r, \theta, \phi) + U(r) \psi(r, \theta, \phi) \quad . \quad (\text{B.2})$$

Wir versuchen, die Gleichung (B.2) durch den Produktansatz

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \quad (\text{B.3})$$

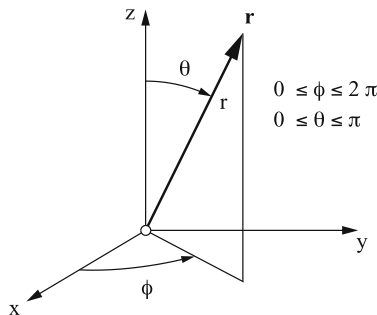


Abb. B.1. Kugelkoordinaten  $(r, \theta, \phi)$  des Ortsvektors  $\mathbf{r}$ .

zu lösen. Dazu setzen wir (B.3) in (B.2) ein und erhalten

$$\begin{aligned}
 E R(r) Y(\theta, \phi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 R'(r)) Y(\theta, \phi) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \\
 &\times \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right] R(r) \\
 &+ U(r) R(r) Y(\theta, \phi) \quad . \quad (B.4)
 \end{aligned}$$

Die Gleichung (B.4) kann in den Variablen  $r$  bzw.  $\theta, \phi$  „separiert“ werden. Dies erreichen wir, indem wir (B.4) durch  $R(r) Y(\theta, \phi)$  dividieren und gleichzeitig mit dem Faktor  $2mr^2/\hbar^2$  multiplizieren:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} (r^2 R'(r)) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E - U(r)) &= \\
 -\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \right] \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \quad . \quad (B.5)
 \end{aligned}$$

Da die linke Seite von (B.5) nur  $r$ -abhängig ist und die rechte Seite nur  $(\theta, \phi)$ -abhängig, müssen beide Seiten gleich einer Konstanten sein, die wir  $\lambda$  nennen. Damit erhalten wir die Differentialgleichung der Funktion  $R(r)$

$$\frac{d}{dr} (r^2 R'(r)) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - U(r)) - \lambda \right] R(r) = 0 \quad (B.6)$$

sowie die Differentialgleichung für  $Y(\theta, \phi)$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \lambda Y(\theta, \phi) = 0 \quad . \quad (B.7)$$

Wir versuchen, eine weitere Separation der Gleichung (B.7) zu erreichen durch den Produktansatz

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad . \quad (B.8)$$

Einsetzen von (B.8) in (B.7) liefert

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \Theta'(\theta)) \Phi(\phi) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \Phi''(\phi) \Theta(\theta) + \lambda \Theta(\theta) \Phi(\phi) = 0 \quad . \quad (B.9)$$

Nun dividieren wir (B.9) durch  $\Theta(\theta) \Phi(\phi)$  und multiplizieren mit  $\sin^2 \theta$ :

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \Theta'(\theta)) \frac{1}{\Theta(\theta)} + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{\Phi''(\phi)}{\Phi(\phi)} \quad . \quad (B.10)$$

Die linke Seite von (B.10) hängt nur von  $\theta$  ab, die rechte nur von  $\phi$ . Die gemeinsame Konstante der Ausdrücke beider Seiten nennen wir diesmal  $\nu$ , und damit erhalten wir aus (B.10) einerseits die Differentialgleichung für  $\Theta(\theta)$

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} (\sin \theta \Theta'(\theta)) + (\lambda \sin^2 \theta - \nu) \Theta(\theta) = 0 \quad , \quad (\text{B.11})$$

und andererseits die Differentialgleichung für  $\Phi(\phi)$

$$\Phi''(\phi) + \nu \Phi(\phi) = 0 \quad . \quad (\text{B.12})$$

Die Gleichung (B.12) hat die allgemeine Lösung

$$\begin{aligned} \Phi(\phi) &= A e^{i\sqrt{\nu}\phi} + B e^{-i\sqrt{\nu}\phi} \quad ; \quad \nu \neq 0 \\ \Phi(\phi) &= A + B \phi \quad ; \quad \nu = 0 \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

wobei  $A, B$  Konstanten sind.

Wir müssen immer unterscheiden zwischen den allgemeinen mathematischen Lösungen einer Differentialgleichung und den „*physikalisch akzeptablen*“ Lösungen, d. h. der Lösung, die eine bestimmte physikalische Situation beschreibt. Die physikalisch akzeptable Lösung ist durch Randbedingungen, Anfangsbedingungen usw. festgelegt. Im Fall der Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r})$  eines beliebigen (endlichen) Potentials  $U(\mathbf{r})$  ist es sinnvoll zu fordern, dass die *Wellenfunktion und ihr Gradient* in jedem Raumpunkt *stetig und eindeutig* sind. Dies garantiert, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(\mathbf{r})$  und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  überall stetig sind.

Die Stetigkeit und Eindeutigkeit der Funktion  $\Phi(\phi)$  im Intervall  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  bedeutet

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad . \quad (\text{B.14})$$

Mit (B.13) folgt aus (B.14) (verifiziere!)

$$e^{i\sqrt{\nu}2\pi} = 1 \quad ,$$

d. h.

$$\sqrt{\nu} \equiv m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{B.15})$$

ganzzahlig. Die physikalisch akzeptablen Lösungen sind also (bis auf eine multiplikative Konstante)

$$\underline{\Phi_m(\phi)} = e^{im\phi} \quad ; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{B.16})$$

Nun wenden wir uns der Winkelfunktion  $\Theta(\theta)$  zu, die im Intervall  $0 \leq \theta \leq \pi$  definiert ist (Abb. B.1). Es ist zweckmäßig, die Variable

$$\omega = \cos \theta \quad ; \quad -1 \leq \omega \leq 1 \quad (\text{B.17})$$

und entsprechend die Funktion

$$P(\omega) \equiv \Theta(\theta) \quad (\text{B.18})$$



einzuführen. Damit geht die Differentialgleichung (B.11) über in (verifiziere!)

$$\frac{d}{d\omega} [(1 - \omega^2) P'(\omega)] + \left( \lambda - \frac{m^2}{1 - \omega^2} \right) P(\omega) = 0 \quad , \quad (\text{B.19})$$

wobei wir (B.15) verwendet haben<sup>1</sup>. Da (B.19) eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, hat sie zwei linear unabhängige Lösungen. Ausgenommen für spezielle Werte des Parameters  $\lambda$ , sind beide Lösungen für  $\omega = \pm 1$  unendlich und deshalb physikalisch nicht akzeptabel. Speziell für

$$\lambda = l(l + 1) \quad ; \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.20})$$

ist eine der beiden Lösungen für  $\omega = \pm 1$  endlich (die andere nicht). Die endliche Lösung ist von der Form  $(1 - \omega^2)^{\frac{1}{2}|m|} \times$  Polynom in  $\omega$  der Ordnung  $l - |m|$ .

Speziell für  $\underline{m = 0}$  ist die physikalisch akzeptable Lösung also ein Polynom der Ordnung  $l$ , genannt **Legendre-Polynom**  $P_l(\omega)$ . Die Legendre-Polynome sind mit Hilfe der *Rodrigues-Formel*

$$P_l(\omega) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\omega^l} (\omega^2 - 1)^l \quad (\text{B.21})$$

berechenbar; beispielsweise ist

$$P_0(\omega) = 1 \quad ; \quad P_1(\omega) = \omega \quad ; \quad P_2(\omega) = \frac{1}{2} (3\omega^2 - 1) \quad \text{etc.} \quad (\text{B.22})$$

Im allgemeinen Fall  $\underline{m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots}$  hat die Gleichung (B.19) physikalisch akzeptable Lösungen für

$$\lambda = l(l + 1) \quad \text{und} \quad |m| \leq l \quad . \quad (\text{B.23})$$

Diese Lösungen heißen **assoziierte Legendre-Funktionen**  $P_{lm}(\omega)$  und sind darstellbar durch die Legendre-Polynome:

$$P_{l|m|}(\omega) = (1 - \omega^2)^{\frac{1}{2}|m|} \frac{d^{|m|}}{d\omega^{|m|}} P_l(\omega) \quad . \quad (\text{B.24})$$

(Speziell ist  $P_{l0}(\omega) \equiv P_l(\omega)$ .) Wir erhalten aus (B.24) mit (B.17) und (B.22) beispielsweise

$$\begin{aligned} P_{00}(\cos \theta) &= 1 \quad ; \quad P_{10}(\cos \theta) = \cos \theta \quad ; \quad P_{11}(\cos \theta) = \sin \theta \\ P_{20}(\cos \theta) &= \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad ; \quad P_{21}(\cos \theta) = 3 \sin \theta \cos \theta \quad ; \\ P_{22}(\cos \theta) &= 3 \sin^2 \theta \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

---

<sup>1</sup> Die Eigenschaften der Differentialgleichung (B.19) und ihrer Lösungen sind in *E.T. Whittaker* and *G.N. Watson*, „A Course in Modern Analysis“, University Press Cambridge (1958) vollständig diskutiert.

Mit (B.16), (B.21) und (B.24) kennen wir die vollständige Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion für ein beliebiges rotationssymmetrisches Potential

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_{l|m|}(\cos \theta) \Phi_m(\phi) \quad , \quad (\text{B.26})$$

wobei  $N_{lm}$  die Normierungskonstante ist. Die Winkelfunktionen (B.26) heißen **Kugelfunktionen**. (In der Literatur treten unterschiedliche Konventionen auf.)

Die Kugelfunktionen haben die wichtige Eigenschaft der **Orthogonalität**. Zunächst folgt aus (B.16) die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{2\pi} \overline{\Phi_m(\phi)} \Phi_{m'}(\phi) d\phi = \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\phi} d\phi = 2\pi \delta_{mm'} \quad . \quad (\text{B.27})$$

Das Integral verschwindet also für  $m \neq m'$ . Für die (reellen) assoziierten Legendre-Funktionen gilt die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^1 P_{l|m|}(\omega) P_{l'|m|}(\omega) d\omega = \frac{2(l+|m|)!}{(2l+1)(l-|m|)!} \delta_{ll'} \quad . \quad (\text{B.28})$$

Dieses Integral verschwindet für  $l \neq l'$ . Aus (B.27) und (B.28) folgt die Orthogonalität der Kugelfunktionen (B.26)

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \overline{Y_{lm}(\theta, \phi)} Y_{l'm'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = |N_{lm}|^2 \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad . \quad (\text{B.29})$$

Mit den Faktoren der  $\delta$ -Funktionen in (B.27) und (B.28) gewinnen wir den Normierungsfaktor der Kugelfunktionen. Die *normierten Kugelfunktionen* sind also

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \epsilon_m \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad . \quad (\text{B.30})$$

Der Phasenfaktor  $\epsilon_m$  in (B.30) ist konventionell festgelegt<sup>2</sup> als  $\epsilon_m = (-1)^m$  für  $m \geq 0$  und  $\epsilon_m = 1$  für  $m \leq 0$ . Aus (B.30) und (B.25) erhalten wir

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad ; \quad Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{1,-1}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \quad ; \quad Y_{11}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi} \\ &\text{etc.} \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

<sup>2</sup> Die Kugelfunktionen haben die Eigenschaft  $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}$ .

Schließlich wenden wir uns der Lösung der radialen Differentialgleichung (B.6) zu für das *Coulomb-Potential des Wasserstoffatoms*

$$U(r) = -\frac{\alpha\hbar c}{r} \quad . \quad (\text{B.32})$$

Mit (B.32) und (B.23) lautet die durch  $2mr^2/\hbar^2$  dividierte Gleichung (B.6)

$$E R(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r R(r)) - \frac{\alpha\hbar c}{r} R(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} R(r) \quad . \quad (\text{B.33})$$

(Den Ableitungsterm haben wir als zweite Ableitung umgeschrieben.) Nun substituieren wir für  $R(r)$  die dimensionslose Funktion

$$u(r) \equiv r R(r) \quad (\text{B.34})$$

und erhalten

$$E u(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) - \frac{\alpha\hbar c}{r} u(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} u(r) \quad . \quad (\text{B.35})$$

(Für  $l = 0$  ist (B.35) identisch mit der entsprechenden Gleichung (5.212) im sphärisch symmetrischen Fall.)

Im Grenzübergang  $r \rightarrow \infty$  geht die Differentialgleichung (B.35) wieder über in Gl. (5.213)

$$E u(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) \quad (r \rightarrow \infty) \quad , \quad (\text{B.36})$$

und die mit einer Normierung der Wellenfunktion verträgliche radiale Funktion ist von der Form

$$u(r) = A e^{-\beta r} \quad , \quad (\text{B.37})$$

wobei

$$\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(-E)} \quad . \quad (\text{B.38})$$

Im Grenzübergang  $r \rightarrow 0$  dominieren die letzten beiden Terme in (B.35) gegenüber dem Term auf der linken Seite und wir haben die Gleichung

$$u''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) = 0 \quad (r \rightarrow 0) \quad . \quad (\text{B.39})$$

Die Differentialgleichung (B.39) hat die allgemeine Lösung (verifiziere!)

$$u(r) = B r^{l+1} + C r^{-l} \quad . \quad (\text{B.40})$$

Aus der Forderung, dass die Wellenfunktion  $\psi(r, \theta, \phi)$  überall (also auch für  $r = 0$ ) endlich sein muss, folgt mit (B.34)  $u(r \rightarrow 0) = 0$ , und damit ist  $C = 0$  in (B.40).

Nun versuchen wir, die Differentialgleichung (B.35) auf eine dimensionslose Form zu bringen. Wir dividieren die Gleichung durch  $E$  und drücken die Energieabhängigkeit durch die Größe  $\beta$  (B.38) aus. Man erhält (verifiziere!)

$$\frac{1}{\beta^2} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = \left[ 1 - \frac{2m\alpha c}{\beta^2 r \hbar} + \frac{l(l+1)}{\beta^2 r^2} \right] u(r) \quad . \quad (\text{B.41})$$

Die Struktur von (B.41) suggeriert die Substitutionen

$$\rho \equiv \beta r \quad \text{und} \quad \rho_0 = \frac{2m\alpha c}{\hbar\beta} \quad . \quad (\text{B.42})$$

Damit wird (B.41)

$$u''(\rho) - \left[ 1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u(\rho) = 0 \quad . \quad (\text{B.43})$$

Die neue Variable  $\rho$  sowie die Größe  $\rho_0$  sind (via  $\beta$ ) abhängig von der Energie.

Im Ansatz für die Lösung der Differentialgleichung (B.43) mit festem Wert  $l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) bauen wir das asymptotische Verhalten (B.37) für  $r \rightarrow \infty$  ( $u \sim e^{-\rho}$ ) und (B.40) für  $r \rightarrow 0$  ( $u \sim \rho^{l+1}$ ) ein. Der Ansatz

$$u(\rho) = \rho^{l+1} v(\rho) e^{-\rho} = \rho^{l+1} (\alpha_0 + \alpha_1 \rho + \alpha_2 \rho^2 + \dots) e^{-\rho} \quad (\text{B.44})$$

ist eine Potenzreihenentwicklung von  $u(\rho)$  in der Umgebung von  $\rho = 0$  mit dem korrekten Grenzwert für  $\rho \rightarrow 0$ , multipliziert mit dem Verhalten für  $\rho \rightarrow \infty$ . Wir setzen den allgemeinen Ausdruck (B.44) in (B.43) ein und erhalten die Differentialgleichung für die Funktion  $v(\rho)$  (verifiziere!)

$$\rho v''(\rho) + 2(l+1-\rho) v'(\rho) + [\rho_0 - 2(l+1)] v(\rho) = 0 \quad . \quad (\text{B.45})$$

Nun setzen wir die Taylor-Reihe

$$v(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_{\nu} \rho^{\nu} \quad (\text{B.46})$$

in (B.45) ein und erhalten

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_{\nu} [\nu(\nu-1) \rho^{\nu-1} + 2(l+1)\nu \rho^{\nu-1} - 2\nu \rho^{\nu} + (\rho_0 - 2(l+1)) \rho^{\nu}] = 0 \quad . \quad (\text{B.47})$$

Die Summe der Koeffizienten jeder Potenz von  $\rho$  muss null sein. Für die Potenz  $\rho^{\nu}$  erhalten wir aus (B.47)

$$\alpha_{\nu+1} [(\nu+1)\nu + 2(l+1)(\nu+1)] + \alpha_{\nu} [-2\nu + (\rho_0 - 2(l+1))] = 0 \quad . \quad (\text{B.48})$$

Die Relation (B.48) beinhaltet die Rekursionsformel

$$\alpha_{\nu+1} = \frac{2(\nu + l + 1) - \rho_0}{(\nu + 1)(\nu + 2l + 2)} \alpha_{\nu} \quad , \quad (\text{B.49})$$

die es erlaubt, aus  $\alpha_{\nu}$  den nachfolgenden Koeffizienten in der Reihe (B.46),  $\alpha_{\nu+1}$ , zu berechnen.

Wir betrachten zunächst die Funktion  $v(\rho)$  für *große Werte von  $\rho$* . In diesem Fall dominieren die hohen Potenzen  $\nu$  in der Reihe (B.46) und aus (B.49) folgt für das Verhältnis aufeinanderfolgender Koeffizienten

$$\frac{\alpha_{\nu+1}}{\alpha_{\nu}} \rightarrow \frac{2}{\nu} \quad \text{für } \nu \rightarrow \infty \quad . \quad (\text{B.50})$$

Wir vergleichen die Eigenschaft (B.50) mit der Potenzreihe der Funktion

$$e^{2\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (2\rho)^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{2^{\nu}}{\nu!} \rho^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu} \quad . \quad (\text{B.51})$$

Aus (B.51) folgt

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_{\nu}} = \frac{2^{\nu+1}\nu!}{(\nu + 1)!2^{\nu}} \rightarrow \frac{2}{\nu} \quad \text{für } \nu \rightarrow \infty \quad . \quad (\text{B.52})$$

Für große Werte von  $\rho$  verhält sich die Funktion  $v(\rho)$  also wie  $e^{2\rho}$  und entsprechend  $u(\rho)$  nach (B.44) wie  $\rho^{l+1} e^{\rho}$ . Die zugehörige radiale Wellenfunktion wäre aber nicht normierbar! Daraus schließen wir: *Die Potenzreihe für  $v(\rho)$  muss nach endlich vielen Gliedern abbrechen*; es existiert also eine maximale Potenz  $\nu_{\max}$ , sodass

$$\alpha_{\nu} = 0 \quad \text{für } \nu \geq \nu_{\max} + 1 \quad ; \quad \nu_{\max} = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.53})$$

Die Abbruchbedingung (B.53) zusammen mit der Rekursionsformel (B.49) bestimmen (via Energieabhängigkeit von  $\rho_0$ ) die Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms! Aus (B.49) und (B.53) folgt nämlich

$$\rho_0 = 2(\nu_{\max} + 1 + l) \quad (\text{B.54})$$

und – zusammen mit (B.42) und (B.38) –

$$E = - \frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{(\nu_{\max} + 1 + l)^2} \quad . \quad (\text{B.55})$$

Wir definieren die *Hauptquantenzahl*  $n$  als

$$n \equiv \nu_{\max} + 1 + l \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.56})$$

Damit lässt sich die Energie (B.55) schreiben als

$$\boxed{E_n = - \frac{mc^2}{2} \frac{\alpha^2}{n^2}} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{B.57})$$

Dies ist (wie schon im Spezialfall  $l = 0$ ) exakt die Formel des Bohrschen Atommodells (Abschn. 1.4).

Die radiale Wellenfunktion  $R(r)$  hängt also von zwei Quantenzahlen ab, nämlich  $l$  ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ) und  $n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) und ist nach (B.34) und (B.44) gegeben durch

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} v(\rho) e^{-\rho} \quad , \quad (\text{B.58})$$

wobei nach (B.42), (B.38) und (B.57)

$$\rho = \rho_n = \frac{\sqrt{2m(-E_n)}}{\hbar} r = \frac{m c \alpha}{n \hbar} r = \frac{r}{n a_0} \quad (\text{B.59})$$

von der Hauptquantenzahl  $n$  abhängt ( $a_0$  ist der Bohrsche Radius). Zu jeder Energie  $E_n$  gibt es

$$(\nu_{\max} + 1) = n - l \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (\text{B.60})$$

verschiedene radiale Wellenfunktionen. Dies folgt aus (B.46) und (B.56).

Zur Bestimmung der Koeffizienten der Potenzen der radialen Wellenfunktionen schreiben wir die Rekursionsformel (B.49) mit  $\rho_0 = 2n$  (verifiziere!) als

$$\alpha_{\nu+1} = \frac{2(\nu + l + 1 - n)}{(\nu + 1)(\nu + 2l + 2)} \alpha_{\nu} \quad . \quad (\text{B.61})$$

Aus (B.58) folgt mit (B.59)<sup>3</sup>

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \left( \frac{r}{n a_0} \right)^{l+1} v \left( \frac{r}{n a_0} \right) e^{-\frac{r}{n a_0}} \quad . \quad (\text{B.62})$$

Für  $l = 0$  sind die radialen Wellenfunktionen (B.62) mit (B.44) und (B.61)

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= \frac{\alpha_0}{a_0} e^{-\frac{r}{a_0}} \\ R_{20}(r) &= \frac{\alpha_0}{2a_0} \left[ 1 - \frac{r}{2a_0} \right] e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ R_{30}(r) &= \frac{\alpha_0}{3a_0} \left[ 1 - 2\frac{r}{3a_0} + \frac{2}{3} \left( \frac{r}{2a_0} \right)^2 \right] e^{-\frac{r}{3a_0}} \quad , \quad \text{etc.} \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

wobei die Konstanten  $\alpha_0$  durch die Normierung der radialen Wellenfunktionen

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (\text{B.64})$$

---

<sup>3</sup> Die Funktionen  $v(\rho)$  lassen sich auch durch die *Laguerre-Polynome* darstellen (siehe Fußnote 1).

festzulegen sind. Die normierten radialen Wellenfunktionen der energetisch tiefst liegenden Zustände sind (verifiziere!)

$$\begin{aligned}
 R_{10}(r) &= \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\
 R_{20}(r) &= \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \\
 R_{21}(r) &= \frac{2}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{2a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \\
 R_{30}(r) &= \frac{2}{(3a_0)^{3/2}} \left(1 - 2\frac{r}{3a_0} + \frac{2}{3} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \\
 R_{31}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{3(3a_0)^{3/2}} \frac{r}{3a_0} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{3a_0}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \\
 R_{32}(r) &= \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}(3a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} .
 \end{aligned} \tag{B.65}$$

Zusammenfassend halten wir fest, dass die normierten Wellenfunktionen der stationären Zustände von Wasserstoff nach (B.3), mit (B.30) (bzw. (B.31)) und (B.65) gegeben sind durch

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \\
 &= \epsilon_m \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} R_{nl}(r) P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}
 \end{aligned}
 } \tag{B.66}$$

wobei die Quantenzahlen  $n, l, m$  die Werte annehmen

$$\begin{aligned}
 n &= 1, 2, 3, \dots \\
 l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\
 m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \quad .
 \end{aligned} \tag{B.67}$$

Die Energieeigenwerte (B.57) sind (mit Ausnahme des Grundzustandes  $n = 1$ ) *entartet*. Die Entartung betrifft im Allgemeinen die Quantenzahlen  $l$  und  $m$ . Für jeden Wert  $l$  gibt es nach (B.67)  $(2l+1)$  mögliche  $m$ -Werte. Der Entartungsgrad der Energie  $E_n$  ist also

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad . \tag{B.68}$$

Wir sagen: Die Energie  $E_n$  ist für  $n \neq 1$   $n^2$ -fach *entartet*. (Man spricht auch von der „ $(2l+1)$ -fachen Entartung der  $l$ -Zustände“.)

# C Der Zustandsvektor

Das Konzept des Zustandsvektors ist die abstrakt-mathematische Darstellung des reinen Zustandes (Abschn. 3.3.3) eines quantenphysikalischen Systems.

Um dieses Konzept zu finden, fassen wir die im *Kap. 3* entwickelten fundamentalen Eigenschaften der Quantenamplituden nochmals zusammen.

Das Superpositionsprinzip der Quantenamplituden (3.64) lautet

$$\langle v|w\rangle = \sum_n \langle v|u_n\rangle \langle u_n|w\rangle \quad . \quad (\text{C.1})$$

Darin bedeutet  $w$  ein beliebiger (reiner) Zustand des Systems (Abschn. 3.3.3);  $u_n$  sind die Zustände einer vollständigen Basis, die immer Eigenzustände einer bestimmten physikalischen Größe sind, und  $v$  ist der Messzustand d. h. Eigenzustand einer zu messenden physikalischen Größe. Die Orthogonalitätsrelation für Quantenamplituden (3.100) ist

$$\langle u_n|u_{n'}\rangle = \delta_{nn'} \quad . \quad (\text{C.2})$$

Wir suchen eine allgemeine Charakterisierung des beliebigen Zustandes  $w$  – unabhängig vom Messzustand  $v$ . Deshalb schreiben wir (C.1) in der Form

$$\langle \quad |w\rangle = \sum_n \langle \quad |u_n\rangle \langle u_n|w\rangle \quad , \quad (\text{C.3})$$

wobei  $v$  weggelassen ist, oder symbolisch

$$\boxed{|w\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n|w\rangle} \quad (\text{C.4})$$

Die Struktur von (C.4) erinnert an die Darstellung eines beliebigen *Einheitsvektors*  $\mathbf{a}$  durch Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_n$  einer orthogonalen Basis in der Linearen Algebra,

$$\mathbf{a} = \sum_n \mathbf{e}_n a_n \quad , \quad (\text{C.5})$$

wobei  $a_n = \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_n$  die Komponenten des Vektors  $\mathbf{a}$  sind und

$$\mathbf{e}_n \cdot \mathbf{e}_{n'} = \delta_{nn'} \quad . \quad (\text{C.6})$$

Der Vergleich von (C.4) mit (C.5) und (C.2) mit (C.6) liefert folgende Interpretation des allgemeinen Zustandes und der Quantenamplitude:



Der allgemeine (reine) Zustand  $w$  eines quantenphysikalischen Systems wird durch den **Zustandsvektor**  $|w\rangle$  (Einheitsvektor) dargestellt. Die Quantenamplitude  $\langle u_n | w \rangle$  entspricht dem **Skalarprodukt** („Richtungskosinus“) des Zustandsvektors mit dem Einheitsvektor des Basiszustandes  $u_n$ .

Zur Erinnerung: Die Quantenamplituden sind im Allgemeinen *komplexe Zahlen*.

Die Gleichung (C.4) gilt für diskrete (im Allgemeinen unendlich viele) Basiszustände, beispielsweise für die Eigenzustände der Energie. Das Konzept des Zustandsvektors gilt sehr allgemein und kann auch für Basiszustände mit *kontinuierlichen* Eigenwerten formuliert werden<sup>1</sup>, etwa für die Basiszustände des Ortes und des Impulses, deren Wellenfunktionen formal nicht normierbar sind.

Das zeitabhängige Verhalten eines Quantons im beliebigen (zeitunabhängigen) Potential (Abschn. 4.1) wird durch den **zeitabhängigen Zustandsvektor**  $|w(t)\rangle$  beschrieben. Aus (4.65) folgt

$$\boxed{|w(t)\rangle = \sum_E |u_E\rangle \langle u_E | w(0)\rangle e^{-i\frac{E}{\hbar}t}} \quad (\text{C.7})$$

Die Quantenamplituden  $\langle u_E | w(0)\rangle$  sind das Skalarprodukt zwischen dem Zustandsvektor des Systems z. Zt.  $t = 0$  und den Vektoren  $|u_E\rangle$  der Eigenzustände der Energie. Die Projektionswahrscheinlichkeit zwischen dem allgemeinen Zustand  $w(t)$  des Quantons und dem Messzustand  $v$  ist gleich dem Betragsquadrat des Skalarprodukts zwischen dem Zustandsvektor  $|w(t)\rangle$  und dem Vektor  $|v\rangle$  des Messzustandes:

$$\boxed{P(v \leftarrow w(t)) = |\langle v | w(t)\rangle|^2} \quad (\text{C.8})$$

<sup>1</sup> Siehe z. B. *A. Messiah*, Quantenmechanik Bd. 1, Walter de Gruyter (1991).

# D Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems

Das Ziel ist es, eine partielle Differentialgleichung für die (örtliche) zeitabhängige Wellenfunktion<sup>1</sup>  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$  eines Zwei-Quanton-Systems, bestehend aus nicht-relativistischen Quantonen mit **Spin Null**, zu finden (analog zur Schrödinger-Wellengleichung für Ein-Quanton-Systeme (*Kap. 5*)). Dabei beschränken wir uns auf Systeme, die aus zwei **verschiedenen** Quantonen bestehen.

Zunächst vereinfachen wir das Problem, indem wir die Wechselwirkung zwischen den beiden Quantonen vernachlässigen. Jedes der beiden Quantonen **1** und **2** soll sich unter dem Einfluss eines (im Allgemeinen verschiedenen) äußeren, zeitunabhängigen Potentials  $U^{(1)}(\mathbf{r}_1)$  bzw.  $U^{(2)}(\mathbf{r}_2)$  befinden. Bei abwesender Wechselwirkung genügt jedes Quanton – unabhängig vom anderen – einer Schrödinger-Wellengleichung (5.72). Für Quanton **1** lautet die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta^{(1)} \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) + U^{(1)}(\mathbf{r}_1) \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) \quad , \quad (\text{D.1})$$

wobei  $\Psi^{(1)}(\mathbf{r}, t)$  die (zeitabhängige) Einteilchen-Wellenfunktion ist und  $m_1$  die Masse von Quanton **1**. Entsprechend genügt die Wellenfunktion  $\Psi^{(2)}(\mathbf{r}, t)$  von Quanton **2** der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta^{(2)} \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) + U^{(2)}(\mathbf{r}_2) \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) \quad . \quad (\text{D.2})$$

Wir multiplizieren (D.1) mit  $\Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)$ , (D.2) mit  $\Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)$ , addieren die beiden Gleichungen und erhalten

$$\begin{aligned} & i\hbar \left[ \frac{\partial \Psi^{(1)}}{\partial t} \Psi^{(2)} + \frac{\partial \Psi^{(2)}}{\partial t} \Psi^{(1)} \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{m_1} \left( \Delta^{(1)} \Psi^{(1)} \right) \Psi^{(2)} + \frac{1}{m_2} \left( \Delta^{(2)} \Psi^{(2)} \right) \Psi^{(1)} \right] + \left( U^{(1)} + U^{(2)} \right) \Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Diese Gleichung können wir schreiben als Differentialgleichung für das Produkt der Wellenfunktionen:

<sup>1</sup> Darin ist  $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$  die Position von Quanton **1** und  $\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$  die Position von Quanton **2**.

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( \Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2} \right) \left( \Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \right) + \left( U^{(1)} + U^{(2)} \right) \Psi^{(1)} \Psi^{(2)} \quad (\text{D.4})
\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
& \underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)} \\
&= \underline{-\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + \left( U^{(1)} + U^{(2)} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)} \quad (\text{D.5})
\end{aligned}$$

wobei

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \equiv \Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) \Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) \quad . \quad (\text{D.6})$$

Die Funktion (D.6) interpretieren wir als die *Wellenfunktion des Gesamtsystems*, denn die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)|^2 = |\Psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t)|^2 \cdot |\Psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t)|^2 \quad (\text{D.7})$$

ist gleich dem Produkt der Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Ein-Quanton-Systeme. Die Teilsysteme sind also unabhängig voneinander – genau was wir erwarten für ein System ohne Wechselwirkung zwischen den Quantonen. Somit ist (D.5) – für den Fall des vereinfachten Problems – die gesuchte Differentialgleichung.

Sind die Quantonen **1** und **2** je in einem stationären Zustand, dann haben die Wellenfunktionen der Teilsysteme die Form

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E^{(1)} t} \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \quad ; \quad \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E^{(2)} t} \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) \quad , \quad (\text{D.8})$$

wobei  $\psi^{(i)}$  die ortsabhängigen Wellenfunktionen sind und  $E^{(i)}$  die entsprechenden Energien. Aus (D.8) folgt mit (D.6) für die Wellenfunktion des Gesamtsystems

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} (E^{(1)} + E^{(2)}) t} \psi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \psi^{(2)}(\mathbf{r}_2) \quad . \quad (\text{D.9})$$

Das Gesamtsystem ist (wie erwartet) auch stationär und

$$E = E^{(1)} + E^{(2)} \quad (\text{D.10})$$

ist seine Energie.

Nun verallgemeinern wir das vereinfachte Problem, indem wir zulassen, dass das (zeitunabhängige) Potential in beliebiger Weise von den sechs Variablen  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  abhängig sein kann. Die potentielle Energie des Gesamtsystems ist dann

$$U = U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad . \quad (\text{D.11})$$

Im vereinfachten Problem zerfällt  $U$  in eine Summe:

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow U^{(1)}(\mathbf{r}_1) + U^{(2)}(\mathbf{r}_2) \quad . \quad (\text{D.12})$$

Es ist deshalb naheliegend, zu postulieren, dass die verallgemeinerte Differentialgleichung aus (D.5) hervorgeht durch die Ersetzung

$$U^{(1)}(\mathbf{r}_1) + U^{(2)}(\mathbf{r}_2) \rightarrow U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad . \quad (\text{D.13})$$

Damit ist die gesuchte partielle Differentialgleichung für die Wellenfunktion des Zwei-Quanton-Systems

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)} \quad (\text{D.14})$$

Dies ist die **Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems**. Die zahlreichen Anwendungen der Schrödinger-Gleichung auf konkrete Zwei-Quanton-Systeme (und der Vergleich der Resultate mit den Experimenten) zeigt, dass (D.14) die korrekte Grundgleichung ist. Eine tiefere theoretische Begründung der Schrödinger-Gleichung findet man im *Anhang E*.

Für eine wichtige Klasse von Zwei-Quanton-Problemen hängt die potentielle Energie  $U$  nur ab von der *Differenz* der Ortskoordinaten  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ , also

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad . \quad (\text{D.15})$$

(Beispiele dafür sind im Abschn. 7.1.4 behandelt.) In diesem Fall führt die Einführung geeigneter neuer Variablen zu einer wesentlichen Vereinfachung der Schrödinger-Gleichung (D.14). Wir führen die Relativkoordinaten

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (\mathbf{r} = (x, y, z)) \quad (\text{D.16})$$

und die Schwerpunktskoordinaten ein:

$$\mathbf{R} \equiv \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \quad (\mathbf{R} = (X, Y, Z)) \quad , \quad (\text{D.17})$$

wobei  $M = m_1 + m_2$  die Gesamtmasse des Systems ist. Wir denken uns  $\Psi$  in (D.14) als Funktion von  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{R}$  ausgedrückt und wollen die Differentialoperatoren  $\Delta^{(1)}, \Delta^{(2)}$  durch solche bezüglich  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{R}$  darstellen. Aus (D.16) und (D.17) folgt

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial X} \frac{m_1}{M} \quad ; \quad \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial X^2} \frac{m_1^2}{M^2} \quad , \quad (\text{D.18})$$

und daraus

$$\Delta^{(1)} = \Delta^{(r)} + \frac{m_1^2}{M^2} \Delta^{(R)} \quad . \quad (\text{D.19})$$

Analog ist

$$\Delta^{(2)} = \Delta^{(r)} + \frac{m_2^2}{M^2} \Delta^{(R)} \quad . \quad (\text{D.20})$$

Aus (D.19) und (D.20) erhalten wir

$$\frac{\Delta^{(1)}}{m_1} + \frac{\Delta^{(2)}}{m_2} = \frac{\Delta^{(r)}}{\mu} + \frac{\Delta^{(R)}}{M} \quad , \quad (\text{D.21})$$

wobei

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{D.22})$$

die reduzierte Masse des Systems ist. Mit (D.15) und (D.21) lässt sich (D.14) schreiben als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\Delta^{(r)}}{\mu} + \frac{\Delta^{(R)}}{M} \right) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) + U(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) \quad . \quad (\text{D.23})$$

Wir versuchen, die Gleichung (D.23) durch den Produktansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{R}) f(t) \quad , \quad (\text{D.24})$$

zu lösen. Einsetzen von (D.24) in (D.23) und dividieren der Gleichung durch das Produkt (D.24) ergibt

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\Delta^{(r)}\phi}{\mu\phi} + \frac{\Delta^{(R)}\Phi}{M\Phi} \right) + U \quad . \quad (\text{D.25})$$

Die linke Seite von (D.25) hängt nur von  $t$  ab, die rechte Seite nur von den Ortsvariablen. Beide Seiten sind deshalb gleich einer gemeinsamen Konstanten, die wir  $E$  nennen. Die Gleichung

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E \quad (\text{D.26})$$

hat die Lösung

$$f(t) = C e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad , \quad (\text{D.27})$$

wobei  $C$  eine beliebige Konstante ist. Die Gleichung

$$E = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\Delta^{(r)}\phi(\mathbf{r})}{\mu\phi(\mathbf{r})} + \frac{\Delta^{(R)}\Phi(\mathbf{R})}{M\Phi(\mathbf{R})} \right) + U(\mathbf{r}) \quad (\text{D.28})$$

lässt sich wiederum separieren in

$$E + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta^{(R)}\Phi(\mathbf{R})}{M\Phi(\mathbf{R})} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta^{(r)}\phi(\mathbf{r})}{\mu\phi(\mathbf{r})} + U(\mathbf{r}) \quad . \quad (\text{D.29})$$

Die Separationskonstante nennen wir hier  $\varepsilon$ , und damit erhält man aus (D.29) die Differentialgleichungen,

$$\varepsilon \phi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta^{(r)}\phi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \quad (\text{D.30})$$

für die Wellenfunktion  $\phi(\mathbf{r})$  der Relativkoordinaten und

$$\underline{(E - \varepsilon) \Phi(\mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta^{(R)} \Phi(\mathbf{R})} \quad (\text{D.31})$$

für die Wellenfunktion  $\Phi(\mathbf{R})$  der Schwerpunktskoordinaten.

Dieses Resultat hat folgende Interpretation: Die Gleichung (D.30) beschreibt die *Relativbewegung* der beiden Quantonen, die Gleichung (D.31) die *Schwerpunktsbewegung* des Systems. Beide Gleichungen haben die Struktur der (ortsabhängigen) Schrödinger-Gleichung *eines* Quantons. Die Relativbewegung ist die effektive Bewegung eines Quantons mit der reduzierten Masse  $\mu$  im Potential entsprechend dem relativen Abstand  $\mathbf{r}$  der beiden Quantonen. Die Schwerpunktsbewegung ist die effektive Bewegung eines freien Quantons der Gesamtmasse  $M$  des Systems. Die Summe der Energien beider Bewegungen entspricht der Gesamtenergie des Systems.

Im *Schwerpunktsystem* ( $\mathbf{R} = 0$ ) verschwindet der effektive Impuls  $\mathbf{P}$  der Schwerpunktsbewegung. Die Wellenfunktion des Impulseigenzustandes (5.3) ist Lösung der Gl. (D.31) mit

$$(E - \varepsilon) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} \quad . \quad (\text{D.32})$$

Da  $\mathbf{P}$  verschwindet, folgt aus (D.32)  $E = \varepsilon$ , d. h. die Gesamtenergie des Systems ist gleich der Energie der Relativbewegung (D.30). Das Zwei-Quanton-System verhält sich also im Schwerpunktsystem wie das Ein-Quanton-System der Masse  $\mu$  im Potential  $U(\mathbf{r})$ .

Da die Differentialgleichungen (D.30) und (D.31) linear sind, ist die *allgemeinste Bewegung* des Zwei-Quanton-Systems mit (D.15) die Überlagerung seiner stationären Lösungen

$$\Psi_E(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{R}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad . \quad (\text{D.33})$$

## E Die Operatoren der Quantenmechanik

In der mathematischen Formulierung der Quantenphysik ist jeder *physikalischen Größe* ein so genannter *Operator* zugeordnet. Wir wollen den Operatorbegriff am Beispiel der Quantenmechanik nicht-relativistischer Quantonen mit Spin Null, die durch die Schrödinger-Wellengleichung beschrieben werden (*Kap. 5*), einführen.

Die zeitabhängige (normierte) *Wellenfunktion*  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  als Lösung der Schrödinger-Wellengleichung bestimmt alle Eigenschaften des Quantons. Beispielsweise ist der **Erwartungswert des Ortes  $\mathbf{r}$**  (zeitabhängiger Mittelwert)

$$\langle \mathbf{R}(t) \rangle = \int d^3r \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad ; \quad (\text{E.1})$$

die Gleichung (E.1) ist äquivalent zu den drei Gleichungen

$$\langle X \rangle = \int d^3r \overline{\Psi} x \Psi \quad , \quad \langle Y \rangle = \int d^3r \overline{\Psi} y \Psi \quad , \quad \langle Z \rangle = \int d^3r \overline{\Psi} z \Psi \quad . \quad (\text{E.2})$$

Wir stellen die Frage: Wie groß ist der *Erwartungswert*  $\langle \mathbf{P}(t) \rangle$  des *Impulses* ( $\mathbf{p}$ ) des Quantons, ausgedrückt durch die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  im Ortsraum? Analog zu (E.1) gilt

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int d^3p \overline{\hat{\Psi}(\mathbf{p}, t)} \mathbf{p} \hat{\Psi}(\mathbf{p}, t) \quad , \quad (\text{E.3})$$

wobei  $\hat{\Psi}(\mathbf{p}, t)$  die (normierte) Wellenfunktion im Impulsraum ist, die der Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  entspricht. Wir drücken  $\hat{\Psi}(\mathbf{p}, t)$  durch die Fourier-Transformierte

$$\hat{\Psi}(\mathbf{p}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{E.4})$$

aus (die Zeit  $t$  ist ein fester Parameter), setzen (E.4) in (E.3) ein und erhalten

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r' e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'} \overline{\Psi(\mathbf{r}', t)} \int d^3r \mathbf{p} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{E.5})$$

Wir schreiben das dritte Integral in (E.5) mit partieller Integration als

$$\begin{aligned} \int d^3r \mathbf{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) &= - \int d^3r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

In (E.6) wurde angenommen, dass  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  genügend rasch abklingt, sodass das Oberflächenintegral am Rand des Gebietes verschwindet. Diese Bedingung ist beispielsweise für gebundene Zustände erfüllt. Wir setzen (E.6) in (E.5) ein und finden

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}} \int d^3r' \overline{\Psi(\mathbf{r}', t)} \int d^3r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{E.7})$$

Das Integral über  $p$  in (E.7) lässt sich durch die dreidimensionale Delta-Funktion ausdrücken<sup>1</sup>:

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}} = \delta^3(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad . \quad (\text{E.8})$$

Mit (E.8) folgt aus (E.7)

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \int d^3r \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{E.9})$$

Wir definieren einen Differentialoperator,

$$\vec{\mathbf{P}}_{\text{op}} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \quad , \quad (\text{E.10})$$

und schreiben das Resultat (E.9) als

$$\underline{\langle \mathbf{P}(t) \rangle} = \underline{\int d^3r \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \vec{\mathbf{P}}_{\text{op}} \Psi(\mathbf{r}, t)} \quad . \quad (\text{E.11})$$

Die Gleichung (E.11) hat die Struktur von (E.1) und ist äquivalent zu den drei Relationen

$$\begin{aligned} \langle P_x \rangle &= \int d^3r \overline{\Psi} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \quad , \quad \langle P_y \rangle = \int d^3r \overline{\Psi} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi \quad , \\ \langle P_z \rangle &= \int d^3r \overline{\Psi} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi \quad . \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Der Schlüssel zur Berechnung des Erwartungswerts  $\langle \mathbf{P}(t) \rangle$  aus  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  ist also der Operator (E.10), der auf die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  wirkt. Wir bezeichnen (E.10) als **Impulsoperator im Ortsraum**.

Entsprechend interpretieren wir  $\mathbf{r}$  in (E.1) als **Ortsoperator im Ortsraum** (Tabelle E.1).

<sup>1</sup> Siehe z.B. *G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists, Academic Press (1985), p. 800.*



**Tabelle E.1.** Die Operatoren der physikalischen Größen im Ortsraum.

Physikalische Größe	Operator
Ort	$\mathbf{r}$
Impuls	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$
Energie	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r})$
Drehimpuls	$-i\hbar \mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$

Der Operator einer physikalischen Größe hat eine besondere Bedeutung im Zusammenhang mit den Eigenzuständen der entsprechenden Größe. Die Wellenfunktion des Impulseigenzustandes mit Eigenwert  $\mathbf{p}$  beispielsweise ist von der Form (5.54)

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t)} \quad , \quad (\text{E.13})$$

wobei  $A$  eine Konstante und  $m$  die Masse des Quantons ist. Wir lassen den Operator (E.10) auf  $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$  wirken und erhalten

$$\overrightarrow{\mathbf{P}}_{\text{op}} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{E.14})$$

Dieses Resultat sagt aus, dass die *Wellenfunktion des Impulseigenzustandes die Lösung des Eigenwertproblems des Impulsoperators* mit Eigenwert  $\mathbf{p}$  ist.

Die Beziehung (E.14) gilt allgemein:

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\text{op}} \Psi_Q(\mathbf{r}, t) = Q \Psi_Q(\mathbf{r}, t)} \quad (\text{E.15})$$

In Worten:

*Die Wellenfunktion des Eigenzustandes einer physikalischen Größe ist die Lösung des Eigenwertproblems des entsprechenden Operators.*

Ein bekanntes Beispiel ist die Größe *totale Energie*  $\mathbf{E}$  des Quantons. Wir kennen die entsprechende Wellenfunktion als Lösung der Schrödinger-Wellengleichung (5.72), die wir als Operatorgleichung schreiben wollen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{E.16})$$

Die Wellenfunktion eines Eigenzustandes der Energie  $E$  hat nach (5.2), (4.7) und (4.41) die Form

$$\Psi_E(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi_E(\mathbf{r}) \quad . \quad (\text{E.17})$$

Wir setzen (E.17) in (E.16) ein und erhalten

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi_E(\mathbf{r}, t) = E \Psi_E(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{E.18})$$

Der Vergleich von (E.18) mit (E.15) zeigt, dass

$$\underline{\mathbf{E}}_{\text{op}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) \quad (\text{E.19})$$

der **Energieoperator** ist. Der Ausdruck (E.19) wird oft auch als *Hamilton-Operator* ( $\mathbf{H}_{\text{op}}$ ) bezeichnet, denn er hat die Struktur der Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik,

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad . \quad (\text{E.20})$$

Der erste Term des Energieoperators entspricht der „kinetischen Energie“ des Quantons, denn er geht aus dem ersten Term von (E.20) hervor, in welchem  $\mathbf{p}$  durch den Impulsoperator (E.10) ersetzt wird.

Der **Drehimpulsoperator** schließlich hat ebenfalls die Struktur des klassischen Ausdrucks für den Bahndrehimpuls,

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \quad . \quad (\text{E.21})$$

Wir ersetzen  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{p}$  in (E.21) durch den Orts- bzw. Impulsoperator und erhalten

$$\underline{\vec{\mathbf{L}}}_{\text{op}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \quad . \quad (\text{E.22})$$

Die drei Komponenten von (E.22) sind mit (E.21)

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{x\text{op}} &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad , \quad \mathbf{L}_{y\text{op}} = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad , \\ \mathbf{L}_{z\text{op}} &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad . \quad (\text{E.23}) \end{aligned}$$

Anhand der bekannten Drehimpulseigenschaften der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms (Abschn. 5.2.7, *Anhang B*) wollen wir die Richtigkeit des Ausdrucks (E.22) überprüfen. Zu dem Zweck müssen wir  $\mathbf{L}_{z\text{op}}$  (E.23) in Kugelkoordinaten,

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad , \quad \theta = \arccos \left( \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) \quad , \quad \phi = \arctg \left( \frac{y}{x} \right) \quad , \quad (\text{E.24})$$

ausdrücken. Die Ableitungen in  $\mathbf{L}_{z\text{op}}$  können wir schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad . \quad (\text{E.25})$$

Aus (E.25) folgt mit (E.23)

$$\mathbf{L}_{z\text{op}} = -i\hbar \left\{ \left( x \frac{\partial r}{\partial y} - y \frac{\partial r}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \left( x \frac{\partial \theta}{\partial y} - y \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} + \left( x \frac{\partial \phi}{\partial y} - y \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} . \quad (\text{E.26})$$

Aus (E.24) erhalten wir durch Differentiation (verifiziere!)

$$\left( x \frac{\partial r}{\partial y} - y \frac{\partial r}{\partial x} \right) = \left( x \frac{\partial \theta}{\partial y} - y \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = 0 \quad , \quad \left( x \frac{\partial \phi}{\partial y} - y \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = 1 \quad (\text{E.27})$$

und damit hat die  $z$ -Komponente des Drehimpulsoperators die einfache Struktur

$$\mathbf{L}_{z\text{op}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} . \quad (\text{E.28})$$

Wir lassen (E.28) auf die Wellenfunktionen  $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$  (B.66) der gebundenen Zustände des Wasserstoffatoms wirken und erhalten die Relation

$$\mathbf{L}_{z\text{op}} [R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)] = m\hbar [R_{nl}(r) Y_{ml}(\theta, \phi)] . \quad (\text{E.29})$$

Der Eigenwert des Operators  $\mathbf{L}_{z\text{op}}$  entspricht somit dem bekannten Resultat  $L_z = m\hbar$ . Der Operator (E.28) ist also im Einklang mit der allgemeinen Beziehung (E.15).

Eine entsprechende Relation gilt auch für das Betragsquadrat des Drehimpulses,

$$\overset{\rightarrow}{\mathbf{L}}_{\text{op}} = \mathbf{L}_{x\text{op}}^2 + \mathbf{L}_{y\text{op}}^2 + \mathbf{L}_{z\text{op}}^2 . \quad (\text{E.30})$$

Man findet

$$\overset{\rightarrow}{\mathbf{L}}_{\text{op}} [R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)] = l(l+1)\hbar^2 [R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)] . \quad (\text{E.31})$$

Der Eigenwert von  $\overset{\rightarrow}{\mathbf{L}}_{\text{op}}$  ist  $l(l+1)\hbar^2$ , wie wir aufgrund der Drehimpulseigenschaften der Zustände des Wasserstoffatoms erwarten.

Die Relationen (E.29) und (E.31) weisen darauf hin, dass der aus dem klassischen Ausdruck (E.21) gewonnene Operator (E.22) der physikalisch korrekte Drehimpulsoperator ist.

Eine wichtige allgemeine Frage der Quantenphysik lautet: Unter welchen Bedingungen existieren Zustände eines quantenphysikalischen Systems, die gleichzeitig Eigenzustände zweier oder mehrerer physikalischer Größen sind? Wir können diese Bedingungen als Eigenschaften der entsprechenden Operatoren formulieren – unabhängig vom System!

Wir betrachten einen Zustand, der gleichzeitig Eigenzustand irgendwelcher physikalischer Größen  $\mathbf{P}$  und  $\mathbf{Q}$  ist; die entsprechende Wellenfunktion sei  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Dann gilt mit (E.15) einerseits

$$\mathbf{P}_{\text{op}} \Psi(\mathbf{r}, t) = P \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{E.32})$$

und andererseits

$$\mathbf{Q}_{\text{op}}\Psi(\mathbf{r}, t) = Q\Psi(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (\text{E.33})$$

wobei  $P$  und  $Q$  die Eigenwerte der beiden physikalischen Größen für den betrachteten Zustand sind. Nun lassen wir  $\mathbf{Q}_{\text{op}}$  auf beide Seiten von (E.32) einwirken und  $\mathbf{P}_{\text{op}}$  auf beide Seiten von (E.33) und erhalten damit

$$\mathbf{Q}_{\text{op}}\mathbf{P}_{\text{op}}\Psi = \mathbf{Q}_{\text{op}}(P\Psi) = P\mathbf{Q}_{\text{op}}\Psi = PQ\Psi \quad (\text{E.34})$$

bzw.

$$\mathbf{P}_{\text{op}}\mathbf{Q}_{\text{op}}\Psi = \mathbf{P}_{\text{op}}(Q\Psi) = Q\mathbf{P}_{\text{op}}\Psi = QP\Psi \quad . \quad (\text{E.35})$$

Wir bilden die Differenz der Gleichungen (E.35) und (E.34) und finden

$$[\mathbf{P}_{\text{op}}\mathbf{Q}_{\text{op}} - \mathbf{Q}_{\text{op}}\mathbf{P}_{\text{op}}]\Psi = (QP - PQ)\Psi = 0 \quad , \quad (\text{E.36})$$

denn die Eigenwerte  $P$  und  $Q$  sind *reelle Zahlen* (mit den Dimensionen der entsprechenden physikalischen Größen).

Aus (E.36) folgt: Damit Zustände existieren, die gleichzeitig Eigenzustände physikalischer Größen  $\mathbf{P}$  und  $\mathbf{Q}$  sind, müssen die entsprechenden Operatoren *vertauschbar* sein, d. h. die Kombination (E.36) muss identisch verschwinden:

$$[\mathbf{P}_{\text{op}}\mathbf{Q}_{\text{op}} - \mathbf{Q}_{\text{op}}\mathbf{P}_{\text{op}}] \equiv 0 \quad (\text{E.37})$$

oder

$$\mathbf{P}_{\text{op}}\mathbf{Q}_{\text{op}} \equiv \mathbf{Q}_{\text{op}}\mathbf{P}_{\text{op}} \quad . \quad (\text{E.38})$$

Die Größe (E.37) wird als *Kommutator* der beiden Operatoren bezeichnet.

Das allgemeine Resultat lautet somit folgendermaßen:

*Damit Zustände existieren, die gleichzeitig Eigenzustände mehrerer physikalischer Größen sind, müssen die Kommutatoren der Paare aller entsprechenden Operatoren (identisch) verschwinden.*

Als Beispiel erinnern wir uns an die gebundenen, stationären Zustände des Wasserstoffatoms. Man kann zeigen, dass die Kommutatoren von je zwei der folgenden drei Operatoren verschwinden: Energieoperator  $\mathbf{E}_{\text{op}}$ , Operator einer beliebigen Komponente des Drehimpulses ( $\mathbf{L}_{x_{\text{op}}}$ ) und Operator des Betragsquadrats  $\overset{\rightarrow}{\mathbf{L}}_{\text{op}}^2$  des Drehimpulses. Deshalb gibt es Zustände, die gleichzeitig Eigenzustände der drei physikalischen Größen sind (konventionell wählt man die  $z$ -Komponente  $\mathbf{L}_z$ ). Diese Aussage ist auch richtig für ein beliebiges, nur von  $r$  abhängiges Potential (siehe *Anhang B*).

Die Umkehrung der obigen Aussage lautet:

*Falls der Kommutator der Operatoren zweier physikalischer Größen nicht verschwindet, dann existieren im Allgemeinen keine Zustände, die gleichzeitig Eigenzustände beider Größen sind.*

Wir illustrieren diese Gesetzmäßigkeit am wichtigen Beispiel der Ortskoordinate  $\mathbf{X}$  und der Impulskoordinate  $\mathbf{P}_x$ . Dazu lassen wir die entsprechenden Operatoren (Tabelle E.1) nacheinander auf die Wellenfunktion  $\Psi$  eines beliebigen Zustandes wirken und erhalten

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\text{op}}\mathbf{P}_{x\text{op}}\Psi &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\Psi = -i\hbar x \frac{\partial\Psi}{\partial x} \\ \mathbf{P}_{x\text{op}}\mathbf{X}_{\text{op}}\Psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}x\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = -i\hbar \left( \Psi + x \frac{\partial\Psi}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (\text{E.39})$$

Aus der Differenz der beiden Ausdrücke (E.39) folgt

$$[\mathbf{X}_{\text{op}}\mathbf{P}_{x\text{op}} - \mathbf{P}_{x\text{op}}\mathbf{X}_{\text{op}}] = i\hbar \quad (\text{E.40})$$

Der Kommutator der beiden Operatoren verschwindet also *nicht*. Diese Eigenschaft liefert die Begründung für die *Heisenbergsche Ungleichung im Impuls und Ort* (Abschn. 2.3.3), in der Sprache der Operatoren!

Ein weiteres Beispiel sind die Operatoren von je zwei Komponenten des Drehimpulses, z. B.  $\mathbf{L}_{x\text{op}}$  und  $\mathbf{L}_{y\text{op}}$ . Wir erhalten mit (E.23) einerseits

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{x\text{op}}\mathbf{L}_{y\text{op}}\Psi &= -\hbar^2 \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\partial\Psi}{\partial x} - x \frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) \\ &= -\hbar^2 \left( y \frac{\partial\Psi}{\partial x} + yz \frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial z} - yx \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} + zx \frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial y} \right) \end{aligned} \quad (\text{E.41})$$

und andererseits

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{y\text{op}}\mathbf{L}_{x\text{op}}\Psi &= -\hbar^2 \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\partial\Psi}{\partial z} - z \frac{\partial\Psi}{\partial y} \right) \\ &= -\hbar^2 \left( zy \frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial x} - z^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial x} - xy \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + x \frac{\partial\Psi}{\partial y} + xz \frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial z} \right) \end{aligned} \quad (\text{E.42})$$

Aus der Differenz von (E.41) und (E.42) folgt für den Kommutator

$$[\mathbf{L}_{x\text{op}}\mathbf{L}_{y\text{op}} - \mathbf{L}_{y\text{op}}\mathbf{L}_{x\text{op}}] = \hbar^2 \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar \mathbf{L}_{z\text{op}} \quad (\text{E.43})$$

Die Operatoren  $\mathbf{L}_{x\text{op}}$ ,  $\mathbf{L}_{y\text{op}}$  (oder Operatoren irgend eines Paares von Komponenten des Drehimpulses) sind *nicht* vertauschbar. Somit existieren im Allgemeinen keine Zustände, die gleichzeitig Eigenzustände zweier Komponenten des Drehimpulses sind. Diese Aussage entspricht genau dem 2. Satz der Drehimpulseigenschaften (Abschn. 2.3.4).

Abschließend weisen wir darauf hin, dass die *Schrödinger-Wellengleichung* (E.16) ein Spezialfall einer **allgemeinen Schrödinger-Gleichung** darstellt. Die Bewegungsgleichung eines Systems von beliebig vielen Quantonen lässt sich allgemein schreiben als

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \mathbf{H}_{\text{op}} \Psi} \quad (\text{E.44})$$

Hier ist  $\mathbf{H}_{\text{op}}$  der *Hamilton-Operator*, der aus der Hamilton-Funktion der klassischen Physik hervorgeht: Die Variablen werden durch die entsprechenden Operatoren ersetzt. Die zeitabhängige Wellenfunktion  $\Psi$  des Gesamtsystems hängt im Allgemeinen von den Orts- und Spinvariablen der Quantonen ab. Das einfachste Beispiel einer Verallgemeinerung der Wellengleichung (E.16) ist die *Schrödinger-Gleichung des Zwei-Quanton-Systems* (D.14). Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung entspricht der kinetischen Energie der beiden Quantonen, und der zweite Term der potentiellen Energie.

# F Einheiten und physikalische Konstanten

## F.1 Das SI-System

Zur Kommunikation, Überprüfung and Anwendung physikalischen Wissens ist ein *universelles System von Einheiten* der physikalischen Größen unumgänglich. Das SI-System der Einheiten („Système International d’Unités“) hat sich weltweit etabliert.

Die zentrale Frage für das Einheitensystem (auch Maßsystem genannt) lautet: Wie viele *unabhängige konventionelle Festlegungen* sind erforderlich, um die Einheiten *aller* physikalischen Größen eindeutig zu bestimmen? Dabei sind die Relationen zwischen den physikalischen Größen durch die etablierten physikalischen Gesetze und Definitionen festgeschrieben. Wir schließen hier die gesamte Physik (klassische Physik, Relativitätstheorie und Quantenphysik) ein<sup>1</sup>. Anhand der Festlegungen des SI-Systems werden wir sehen, dass *fünf* Festlegungen erforderlich sind. Eine konventionelle Festlegung kann dadurch erfolgen, dass wir direkt eine Realisation einer physikalischen Größe verwenden, oder aber eine physikalische Realisation, zusammen mit einem etablierten Gesetz bzw. einer Definition heranziehen<sup>2</sup>.

Im Folgenden erinnern wir an die fünf unabhängigen konventionellen Festlegungen, auf denen das SI-System beruht. Sie beziehen sich auf die Einheiten der Größen **Masse**, **Zeit**, **Länge**, **elektrischer Strom** und **thermodynamische Temperatur**. Die entsprechenden Einheiten werden als *Basiseinheiten* des SI-Systems bezeichnet.

Die Masseneinheit *Kilogramm* (kg) ist definiert als die Masse des im „Bureau Internationale des Poids et Mesures“ in Sèvres bei Paris aufbewahrten Urkilogramms aus Platiniridium.

Zur Realisierung der Zeiteinheit dient der (monochromatische) Strahlungsübergang zwischen den beiden Hyperfeinstrukturniveaus im Grundzustand des Cäsiumatoms. Die Zeiteinheit *Sekunde* (s) ist die Zeit von 9 192 631 770 Schwingungen der Strahlung des Hfs-Übergangs im Cs-Atom.

---

<sup>1</sup> In diesem Zusammenhang müssen wir die Zeit als eine (messbare) physikalische Größe betrachten.

<sup>2</sup> U. Feller, A constructional approach to the International System of Units (SI) (May, 1997), Swiss Federal Office of Metrology and Accreditation (METAS), CH-3003 Bern-Wabern.

Zur Definition der Längeneinheit verwendet man die Realisierung der Lichtemission im Vakuum, zusammen mit der Definition der Geschwindigkeit

$$c = \frac{\Delta L}{\Delta t} \quad , \quad (\text{F.1})$$

wobei  $\Delta L$  die in der Zeit  $\Delta t$  zurückgelegte Wegstrecke des Lichtes ist. Die Längeneinheit *Meter* (m) ist definiert als der 299 792 458-te Teil der Wegstrecke, die das Licht in 1 Sekunde im Vakuum zurücklegt. Diese Definition der Längeneinheit bedeutet, dass die *Lichtgeschwindigkeit* auf

$$c = 2.997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m/s} \quad (\text{F.2})$$

durch Konvention festgelegt wird (F.6).

Mit den drei Definitionen der Einheiten für Masse, Zeit und Länge sind die Einheiten aller mechanischen Größen durch etablierte physikalische Gesetze und Definitionen festgelegt. Das Newtonsche Bewegungsgesetz beispielsweise legt die Krafteinheit fest: Die Krafteinheit *Newton* (N) ist die Kraft, die einer Masse von 1 kg die Beschleunigung  $1 \text{ m s}^{-2}$  erteilt. Damit sind u. a. die Einheiten der Größen im Gravitationsgesetz festgelegt; die Proportionalitätskonstante  $G$  (*Gravitationskonstante*) ist somit eine – experimentell zu bestimmende – physikalische Konstante (F.6).

Für die Elektrodynamik braucht es im SI-System eine zusätzliche, konventionell festgelegte Einheit. Die entsprechende Größe ist der elektrische Strom  $I$ . Die Einheit des Stroms ist definiert mit Hilfe des Kraftgesetzes zwischen zwei parallelen, geradlinigen, unendlich langen Leitern (kreisförmiger, vernachlässigbar kleiner Querschnitt) [KP-2-10.5]. Die Einheit *Ampère* (A) ist der Strom, der auf einer Leiterlänge von 1 m die Kraft  $2 \times 10^{-7} \text{ N}$  erzeugt, falls der Leiterabstand 1 m beträgt. Diese Definition bedeutet, dass wir die *magnetische Feldkonstante*  $\mu_0$  konventionell auf

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2} \quad (\text{F.3})$$

festsetzen. Wegen der Relation

$$c^2 = \frac{1}{\mu_0 \varepsilon_0} \quad (\text{F.4})$$

und (F.2) ist damit auch die *elektrische Feldkonstante*  $\varepsilon_0$  festgelegt (F.6). Das Coulombsche Gesetz definiert dann die Einheit *Coulomb* (C) der elektrischen Ladung, in Übereinstimmung mit

$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} \quad , \quad (\text{F.5})$$

wobei  $\Delta Q$  die in der Zeit  $\Delta t$  durch den Querschnitt geflossene Ladung ist.

Auch die Wärmelehre braucht eine zusätzliche konventionelle Festlegung. Man wählt als Größe die thermodynamische Temperatur  $T$ . Die Einheit ist



definiert mit Hilfe des Gasthermometers; die thermodynamische Temperatur ist proportional zum Volumen des idealen Gases bei konstantem Druck. Die Einheit *Kelvin* (K) ist der 273.16-te Teil der Temperatur des Tripelpunkts von Wasser [KP-2-13.5].

Zur Charakterisierung der **Vielteilchensysteme** der Materie sind grundsätzlich keine weiteren unabhängigen Festlegungen notwendig. Man kann die *Stoffmenge* eines Systems identischer Teilchen im Prinzip durch Abzählen ermitteln. Da die Teilchenzahl makroskopischer Systeme aber so enorm groß ist, muss man sich in der Praxis meistens mit einer approximativen Bestimmung der Teilchenzahl durch Wägen, d. h. mittels einer Massenbestimmung, begnügen. Die entsprechende Einheit der Stoffmenge ist folgendermaßen definiert. Die Einheit *Mol* (mol) ist die Stoffmenge, die aus gleich vielen Einzelteilchen (Atomen, Molekülen etc.) besteht, wie Atome in 12 g Kohlenstoff (Atomkern  $^{12}_6\text{C}$ ) enthalten sind. Die Anzahl der Atome in 12 g Kohlenstoff wird als *Avogadro-Zahl*  $N_A$  bezeichnet (F.6).

Die Masse eines atomaren Vielteilchensystems wird in *atomaren Masseneinheiten* (u) gemessen. Diese Einheit ist definiert als 1/12 der Masse des  $^{12}\text{C}$ -Atoms (F.6).

Die Einheitenfestlegung im SI-System beruht auf einem mechanistischen Naturverständnis, das über hundert Jahre zurückreicht. In den letzten Jahrzehnten sind große Anstrengungen unternommen worden, präzise physikalische Realisierungen von Einheiten auszuarbeiten, welche auf Naturkonstanten beruhen. Diese Anstrengungen werden in absehbarer Zeit auch für die letzte mechanistische Einheit, das Kilogramm, zu einer neuen Festlegung führen<sup>3</sup>.

## F.2 Physikalische Konstanten

Wir stellen in (F.6) die wichtigsten Konstanten der *klassisch-makroskopischen* Physik (in SI-Einheiten) zusammen. Alle numerischen Werte in diesem Anhang sind der statistischen Anpassung der experimentellen Resultate an die Konstanten des SI-Systems von *Peter J. Mohr und Barry N. Taylor*<sup>4</sup> entnommen. Die Unsicherheiten der Werte in (F.6) und (F.7) (Zahlen in Klammern) resultieren aus den Unsicherheiten der einzelnen Messungen. Die Unsicherheit von  $G$  beispielsweise ist  $\Delta G = \pm 0.010 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$ ; die Zahl bedeutet eine Standardabweichung (*Anhang A*).

Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c = 2.997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$  (exakt)

Gravitationskonstante  $G = 6.673(10) \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$

<sup>3</sup> *J.L. Flowers and B.W. Petley*, Rep. Prog. Phys. 64/10 (2001), 1191.

<sup>4</sup> *P.J. Mohr and B.N. Taylor*, Physics Today, BG6, August 2000.

Magnetische Feldkonstante	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$ (exakt)
Elektrische Feldkonstante (exakt)	$\varepsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2} = 8.854\,187\,817\dots \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Avogadro-Zahl	$N_A = 6.022\,141\,99(47) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Universelle Gaskonstante	$R = 8.314\,472(15) \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Boltzmann-Konstante	$k = \frac{R}{N_A} = 1.380\,6503(24) \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Atomare Masseneinheit	$u = \frac{1}{12} m(^{12}\text{C})$ $= 1.660\,538\,73(13) \times 10^{-27} \text{ kg}$ (F.6)

In (F.7) sind die wichtigsten Konstanten der *mikroskopischen* Physik in SI-Einheiten zusammengestellt.

Plancksche Konstante	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,571\,596(82) \times 10^{-34} \text{ J s}$
Elementarladung	$e = 1.602\,176\,462(63) \times 10^{-19} \text{ C}$
Feinstrukturkonstante	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} = [137.035\,999\,76(50)]^{-1}$
Masse des Elektrons	$m_e = 9.109\,381\,88(72) \times 10^{-31} \text{ kg}$
Rydberg-Energie <sup>5</sup>	$R_\infty = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 = 2.179\,871\,90(17) \times 10^{-18} \text{ J}$
Bohrscher Radius	$a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha} = 0.529\,177\,2083(19) \times 10^{-10} \text{ m}$
Masse des Protons	$m_p = 1.672\,621\,58(13) \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masse des Neutrons	$m_n = 1.674\,927\,16(13) \times 10^{-27} \text{ kg}$
Masse des Müons	$m_\mu = 1.883\,531\,09(16) \times 10^{-28} \text{ kg}$
Bohrsches Magneton	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274\,008\,99(37) \times 10^{-24} \text{ A m}^2$
Kernmagneton	$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.050\,783\,17(20) \times 10^{-27} \text{ A m}^2$ (F.7)

### F.3 Umrechnungsfaktoren

Wir erinnern in (F.8) an häufig auftretende Umrechnungsfaktoren, die (mit Ausnahme der letzten beiden Eintragungen) approximativ aufgeführt sind. Genauere Werte können leicht aus (F.6) und (F.7) gewonnen werden.

<sup>5</sup> Die Größe  $2R_\infty$  wird als Hartree-Energie bezeichnet.

$$\begin{aligned} 1 \text{ eV} &= 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} & , & & u &= 931.5 \text{ MeV}/c^2 \\ m_e &= 0.5110 \text{ MeV}/c^2 & , & & R_\infty &= 13.61 \text{ eV} \\ m_p &= 938.27 \text{ MeV}/c^2 & , & & m_n &= 939.57 \text{ MeV}/c^2 \\ m_\mu &= 105.66 \text{ MeV}/c^2 & , & & 1 \text{ \AA (Angström)} &= 10^{-10} \text{ m} \\ 1 \text{ fm (Fermi)} &= 10^{-15} \text{ m} & . & & & \end{aligned} \tag{F.8}$$

# Sachverzeichnis

- $^3\text{He}$  347, 351
- $^4\text{He}$  347
  - He I 348
  - He II 348
  - $\lambda$ -Punkt 348
  - spezifische Wärme 348
  
- Absorption 17, 285, 368, 369
- Absorptionsspektrum 21
- allgemeinste Bewegung
  - freies Quanton 202
- $\alpha$ -Teilchen 23, 34
- $\alpha$ -Zerfall 220
- Ammoniakmaser 244
- Ammoniakmolekül  $\text{NH}_3$  233, 234
- Ampère 428
- Analysator 112
- Annihilation 361, 369
- Antimaterie 361
- Antiquanton (Antiteilchen) 361, 362
- antisymmetrische Gesamtwellenfunktion 332
- antisymmetrische Spinwellenfunktion 300, 301
- antisymmetrische Wellenfunktion 296, 297
- antisymmetrische Zweiteilchen-Gesamtwellenfunktion 304
- Antiwasserstoff 246
- atomare Masseneinheit 429, 430
- Atombau 334
  - abgeschlossene Schalen 336
  - Einelektronkonfigurationen 335
  - Einelektronproblem 334
  - Konfiguration des Grundzustandes 335
  - Periodenstruktur 336
- Atomkerne (Schalenmodell) 342
  - Einteilchenpotential 343
  - Spin-Bahn-Kopplung 343
- Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte
  - zeitabhängig 193
- Ausschließungsprinzip 336
- Austauschkraft 296
- Austauschsymmetrie 295, 300
- Austauschwechselwirkung 296
- Auswahlregeln 96, 271, 276
- Avogadro-Zahl 429, 430
- azimutale Wellenzahl 56
  
- Balmer-Formel 14, 18
- Baryonen 363
- BCS-Theorie 352, 354
- BEC (Bose-Einstein-Kondensat) 344
- $\beta$ -Zerfall 363
- Beugung von Licht am Spalt 28
- Binomialverteilung 395
- Bohrscher Radius 16, 430
- Bohrsches Atommodell 12, 23
  - Wasserstoff 15
- Bohrsches Magneton 93, 430
- Boltzmann-Konstante 430
- Bose-Einstein-Kondensat 344, 345
  - kritische Temperatur 344
- Bose-Einstein-Kondensat im Gas 343
- Bose-Einstein-Kondensation (BEC) 344
- Bosonen 332, 333
- Braggsches Gesetz 40, 41
  
- CCD 29
- charakteristische Wirkung 22
- charakteristische Zeit 102
- CNO-Zyklus (Kohlenstoffzyklus) 224
- Compton-Effekt 46, 50, 52, 371
- Compton-Streuung 47

- Cooper-Paar 353  
Coulomb 428  
Coulomb-Barriere 222
- d*-Zustand 253  
Dämpfungskonstante 265  
Dämpfungskraft 264, 265  
De-Broglie-Beziehung 39  
De-Broglie-Wellenlänge 39  
Delta-Resonanz 76  
differentieller Wirkungsquerschnitt 31  
Dirac-Gleichung 360  
Dispersionsrelation 106  
Doppelbrechung 113  
doppelter Potentialtopf 233  
– „rechts-“ und „links“-Zustände 241  
– Energiespektrum 239  
– stationäre Zustände 235  
– Tunneleffekt 243  
Drehimpuls des Photons 130  
Drehimpulseigenschaften 57  
Drehimpulsoperator 422  
Drehimpulsquantenzahl 57  
Drehimpulsungleichungen 88
- Edelgase 336  
Eigenwert 82, 101  
– der Energie 80  
– des Ortes 172  
Eigenwertproblem 421  
Eigenzustand 82, 101  
– der Energie 80  
– des Impulses 174  
– des Ortes 172  
Eigenzustand der Parität 202  
Einstein-Koeffizient  
– Absorption 286  
– induzierte Emission 286  
– spontane Emission 286  
elektrische Dipolstrahlung 271  
elektrische Feldkonstante 428, 430  
elektrische Leitung 340  
elektrische Quadrupolstrahlung 271  
elektrischer Strom 427  
elektrisches Dipolmoment 94, 271, 273  
elektrodynamische Prozesse 262  
elektromagnetische Kraft 366  
elektromagnetische Prozesse 370  
elektromagnetische Strahlung 38
- Elektron  
– relativistische Beschreibung 359  
Elektron im Metall 217  
Elektron-Müon-Streuung 370  
elektronischer Wasserstoff 246  
elektroschwache Prozesse 373  
elektroschwache Wechselwirkung 368  
elementare Prozesse 368  
Elementarladung 430  
elliptische Polarisation 153  
Emission 17, 368, 369  
Emissionsspektrum 21  
Energie 80  
Energie-Zeit-Relation 74, 75  
Energiebänder 337, 338  
Energieeigenzustand 156  
– Phasenfunktion 161  
Energieerzeugung in den Sternen 2, 223  
Energiespeicherung 70  
Energieoperator (Hamilton-Operator) 422  
Energiezustände 16, 18  
Entartung 243  
Entartungsgrad 258, 410  
Entstehung des Universums 376  
Erwartungswert 165  
Experiment 102
- f*-Zustand 253  
Farbladung 365, 366  
Fehlerfortpflanzung 398  
Fehlerfortpflanzungsgesetz  
– allgemein 399  
Feinstruktur 308  
Feinstrukturkonstante 16, 430  
Feldemissionsmikroskopie 219  
Fermionen 332, 333  
Ferromagnetismus 2  
Festkörper  
– Grundzustand 339  
– Quantentheorie 337  
– stationäre Zustände 337  
Festkörper  $N = 2$  338  
Fourier-Transformierte 181  
– dreidimensional 185  
Fraunhofersche Linien 21
- g*-Faktor

- baryonischer Systeme 93
- elektronischer Systeme 93
- $g$ -Zustand 253
- Gauss-Verteilung 395, 397
- gedämpfter Oszillator 266
  - Intensitätsverteilung 267
- Gemisch 148
- Gluonen 367
- Grand Unification 377
- Gravitationskonstante 428, 429
- Gravitationskraft 366
- Gruppengeschwindigkeit 62
- GSW-Theorie 368, 373
- gyromagnetisches Verhältnis 92
  
- $\hbar$ -Regel 21, 22
- Hadronen 362
- Halbleiter 337, 340, 341
- Hall-Effekt 2
- Hamilton-Operator 426
- Hamilton-Operator (Energieoperator) 422
- harmonischer Oszillator 3, 226
  - Energieeigenwerte 230
  - Wellenfunktionen 230
- Hartree-Energie 430
- Hauptquantenzahl 15, 408
- Heisenbergsche Ungleichung
  - im Drehimpuls und Winkel 85
  - im Impuls und Ort 183
  - in Energie und Zeit 64
- Heisenbergsche Ungleichungen 60, 103
  - im Impuls und Ort 80
- Heliumatom 319
  - Energiespektrum 323, 325, 326
  - Gesamtdrehimpuls 324
  - Gesamtwellenfunktion 324
  - Orthohelium 322
  - Parahelium 322
  - stationäre Zustände 320
    - Ein-Quanton-Problem 321
    - Gesamtsystem 321
  - Störungsrechnung 327
    - angeregte Zustände, Parahelium 329
    - Grundzustand 328
    - Orthohelium 330
- heuristisches Prinzip 11
- Hochtemperatur-Supraleitung 352
  
- Huygensches Prinzip 104
- Hyperfeinwechselwirkung 75
  
- ideales Bosonengas 349, 350
- Impulsamplitude 178
  - dreidimensional 184
- Impulsoperator 420
- induzierte Emission 285
- Innere Konversion 109
- Interferenz und Weginformation 170
- Interferenzexperimente
  - Phasenfunktion 177
- inverse Projektion 129, 135
- inverse Projektionen 145
- Inversion 246, 288
- Isolatoren 337, 340, 341
  
- $K$ -Meson 373
- Kastenpotential 193
  - Energieeigenwerte 196
  - $\hbar$ -Regel 198
  - Wellenfunktionen 196
- Kelvin 429
- Kernmagneton 94, 430
- Kernresonanzfluoreszenz 67
- Kernresonanzstreuung 68
- Kilogramm 427
- klassische spektrale Ungleichung 60
- klassischer Elektronenradius 270
- Kommutator 424
- Komplementaritätsprinzip 36, 103
- Kontinuitätsgleichung 207, 208
- Korrespondenzprinzip 24
- Kugelfunktionen 405
  - normierte 405
  - Orthogonalität 405
- Kugelkoordinaten 401
  
- $l$ -Auswahlregel 278, 279
- $\lambda$ -Regel 52, 54
- $\lambda/4$ -Plättchen 115
- Länge 427
- Laser 285
- Legendre-Funktionen 404
- Legendre-Polynome 404
- Leitfähigkeit von Metallen 1
- Leptonen 362
- leptonische Prozesse 374
- Lichtgeschwindigkeit 428

- Lichtquantenhypothese 10  
 linear polarisierte Welle 112  
 lineare Polarisation 111  
 linkszirkular polarisierte Welle 115  
 Lyman-Serie 18  
  
*m*-Auswahlregel 276, 278  
 Mössbauer-Absorption 69, 70  
 – Wirkungsquerschnitt 73  
 Mössbauer-Effekt 66, 68, 70, 72, 95  
 – Theorie 69  
 Mössbauer-Emission 69  
 Mössbauer-Streuung 71  
 magische Zahlen 342  
 magnetische Dipolstrahlung 271  
 magnetische Feldkonstante 428, 430  
 magnetische Quantenzahl 58  
 magnetisches Moment 91  
 Malussches Gesetz 112  
 Masse 427  
 Masse des Elektrons 430  
 Masse des Müons 430  
 Masse des Neutrons 430  
 Masse des Protons 430  
 Matrizenmechanik 3  
 Mesonen 363  
 Metalle 337, 340, 341  
 Meter 428  
 Mittelwert 81, 101  
 Mittelwerte 182  
 mittlere Lebensdauer 65, 274, 275  
 Mol 429  
 Multipolstrahlung 271  
 müonischer Wasserstoff 246  
 $\mu$ SR-Experiment 157  
  
 Nanotechnologie 220  
 natürliche Linienbreite 74  
 natürliche Phasenwahl 147  
 Natriumatom 18  
 Neutron 363  
 Newton 428  
 Nukleon 363  
 Nullpunktsenergie 199  
  
 Observable (physikalische Größe) 80  
 Omega-minus ( $\Omega^-$ )-Baryon 365  
 Operatoren der Quantenmechanik  
 419  
  
 optische Aktivität 115  
 Orthogonalität  
 – Wellenfunktionsformalismus 181  
 Orthogonalitätsrelationen 124, 135,  
 147  
 Orthohelium 322  
 – Austauschkraft 331  
 Orthopositronium 319  
 Ortsamplitude 171, 172  
 – dreidimensional 183  
 Ortsoperator 420  
  
*p*-Zustand 253  
 Paarbildung 361, 369  
 Parahelium 322  
 – Austauschkraft 330  
 Parallelitätsgesetz 91  
 Parapositronium 319  
 Parität 201  
 Paritätsoperator 201  
 Paschen-Serie 18  
 Pauli-Prinzip 100, 333  
 periodisches System der Elemente 336  
 Permutationssymmetrie 295, 297, 300,  
 331, 332  
 Phasenkonvention 143  
 Photoeffekt 8, 11  
 Photomultiplier 29  
 Photon 11  
 physikalische Größe  
 – unverträgliche 82, 102  
 physikalische Größe (Observable) 80,  
 81  
 physikalische Größen  
 – verträgliche 90  
 physikalische Konstanten 429  
 – klassisch-makroskopische 429  
 – mikroskopische 430  
 Pion 363, 364  
 Pion-Nukleon-Streuung 371  
 pionischer Wasserstoff 25, 246  
 Planck-Einstein-Beziehung 36  
 Plancksche Konstante 7, 11, 12, 21,  
 430  
 Plancksches Strahlungsgesetz 3  
 Polarisation zur Basis (R, L) 127, 129  
 Polarisation zur Basis (x, y) 117, 124  
 Polarisator 112  
 Positron 360, 361

- Positronium 316  
 – Annihilation 316, 319  
 – Energiespektrum 317, 318  
 – Spin und magnetisches Moment 317  
 – stationäre Zustände 316  
 – Strahlungsübergänge 319  
 Potentialstufe 210  
 Poynting-Vektor 263  
 Prinzip der sequentiellen Faktorisierung 141  
 Projektionswahrscheinlichkeit 117, 119, 124, 134  
 – zeitabhängige 156  
 Proton 363  
 Proton-Proton-Kette (P-P-Kette) 225  
 Protonenradius 12  
  
 QCD (Quantenchromodynamik) 247, 367  
 QED (Quantenelektrodynamik) 246, 366  
 Quantenamplitude 135, 140, 412  
 – zeitabhängige 156  
 Quantenamplitude inverser Projektionen 146  
 Quantenchromodynamik (QCD) 247, 367  
 Quantenelektrodynamik 3  
 Quantenelektrodynamik (QED) 246, 315, 366  
 Quantenfeldtheorie 365  
 Quantenflüssigkeit 347  
 Quanteninterferenz 138  
 Quanteninterferenzexperiment 135, 136  
 quantenphysikalisches Vakuum 360  
 Quantenpostulat 6  
 Quantenschwebung 160  
 Quantisierung des Drehimpulses 15, 55, 57  
 Quanton 36, 101  
 Quantonbegriff 35  
 Quantonfabrik 133  
 Quantonprinzip 36, 103  
 Quarks 362  
  
 Röntgenstrahlen 40  
 rechtszirkular polarisierte Welle 114  
  
 reiner Zustand 148  
 Resonanzfluoreszenz 20, 21  
 Resonanzfluoreszenzprozess 19  
 Resonanzfluoreszenzstreuung 268  
 – differentieller Wirkungsquerschnitt 269  
 – Wirkungsquerschnitt 270  
 Resonator 246  
 Richtungsentartung 253  
 Rydberg-Atom 24  
 Rydberg-Energie 16, 430  
  
 s-Zustand 253  
 Schalenmodell mit Spin-Bahn-Kopplung 343  
 Schrödinger-Gleichung  
 – allgemein 425  
 – freies Quanton 192  
 – mit Potential 204, 206  
 – Zwei-Quanton-System 413, 415  
 schwache Kraft 366  
 schwarzer Körper 25  
 Sekunde 427  
 SI-System der Einheiten 427  
 Sigma-minus ( $\Sigma^-$ )-Baryon 373  
 Singulettzustand 302  
 spektrale Breite 81, 101  
 spektrale Breiten 182  
 spektrale Ungleichung  
 – azimutale 63  
 – räumliche 62  
 – zeitliche 61  
 Spektrallinien 13, 18  
 Spektrum 80, 101  
 spezifische Wärme 2  
 Spiegel- oder Inversionssymmetrie 201  
 Spiegelbildkraft 218  
 Spin 60  
 Spin 1/2 149, 185  
 – Quantenamplituden 151  
 Spin Eins 132  
 Spinoren 57, 185, 187  
 Spinquantenzahl 60  
 spontane Emission 261, 262, 285  
 Sprungtemperatur (kritische Temperatur) 351  
 Stabilität der Materie 2, 16, 83  
 Stabilität der Atome 13



- Standardabweichung 397  
 Standardmodell 362, 376  
 starke Kraft 366  
 stationärer Zustand 16, 80  
 Stationarität 75  
 statistische Fehler 393  
 – der Einzelmessung 393  
 statistische Fluktuationen 394  
 statistischer Fehler 123, 396, 397  
 statistisches Postulat 6  
 Stefan-Boltzmann-Gesetz 25  
 Stern-Gerlach-Experiment 94, 97, 99  
 Stetigkeitsbedingungen 209  
 Störungstheorie 328  
 Stoßparameter 31  
 Strahlteiler 116  
 Strahlungsdämpfung 264  
 Strahlungsgesetz 2, 4  
 Streuexperimente 134  
 Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Atomkernen 31  
 Streuung von Röntgenstrahlen an Kristallen 40  
 String-Theorie 378  
 Superpositionsprinzip der Quantenamplituden 141  
 Suprafluidität 2, 347  
 Supraleitung 2, 347, 351  
 – Bose-Einstein-Kondensation 353  
 symmetrische Gesamtwellenfunktion 332  
 symmetrische Spinwellenfunktion 300, 301  
 symmetrische Wellenfunktion 295, 297  
 symmetrische Zweiteilchen-Gesamtwellenfunktion 304  
  
 Teilchen-Wellen-Symmetrierelationen 36, 37  
 Teilchenphysik 376  
 thermische De-Broglie-Wellenlänge 344  
 thermodynamische Temperatur 427  
 thermonukleare Fusion 225  
 Transistor 341  
 Tripplettzustand 302  
 Tunnel-Raster-Mikroskop 219  
 Tunneleffekt 216, 217  
  
 Überlappungsintegral 273, 296  
 Ultraviolett-Katastrophe 5  
 Umrechnungsfaktoren 430  
 universelle Gaskonstante 430  
  
 Vakuumlichtgeschwindigkeit 429  
 Vektorboson 366  
 Vektorbosonen 366  
 Vektormodell 89  
 Vektorungleichungen 86, 88  
 virtueller Photonaustausch 370  
 vollständige Basis 125, 127, 129, 134  
 Vollständigkeitsrelation 124, 135  
  
*W*-Boson 368  
 Wahrscheinlichkeitsdichte 171, 172  
 – dreidimensional 183  
 – im Impulsraum 178, 185  
 Wahrscheinlichkeitsstromdichte 208  
 – stationäre Zustände 208  
 Wasserstoffatom 246, 305  
 – Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten 254  
 – Elektron- und Protonspin 307  
 – endliche Protonenmasse 305  
 – Energie 16  
 – Energieeigenwerte 250, 408  
 – Energien 307  
 – Energieniveauschema 253  
 – Entartung 410  
 – Feinstruktur (fs) 308  
 – Feinstruktur-Energiespektrum 311  
 – Grundzustand 250  
 – Hauptquantenzahl 251  
 – Hyperfeinstruktur 314  
 – Hyperfeinstruktur (hfs) 312  
 – Kugelfunktionen 251  
 – Lamb-Shift 315  
 – magnetische Quantenzahl 252  
 – nicht kugelsymmetrische Lösungen 251  
 – Parität 255  
 – Planetenbahnmodell 12  
 – Quantenzahl des Bahndrehimpulses 252  
 – Quantenzahlen 410  
 – Quantisierungsachse 255  
 – radiale Wellenfunktionen 251, 410

- reduzierte Masse 306
- relativistische Effekte 311
- $s$ -Zustände 253
- Spektrallinien 13
- sphärisch symmetrische Lösungen 248
- Spin-Bahn-Kopplung 311, 314
- stationäre, gebundene Zustände 247
- Strahlungskorrekturen 315
- Streuzustände 247
- Wellenfunktionen kugelsymmetrischer Zustände 251
- Wellenfunktion 171
  - dreidimensional 183
  - im Impulsraum 178
  - - dreidimensional 185
  - im Ortsraum 172
  - Impulseigenzustand 177
  - zeitabhängig 191
- Wellenfunktion im Spinraum 297
- Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms 401, 410
  - radiale Differentialgleichung 406
- Wellenmechanik 3
- Wellenpaket 60
- Wirkung 22
- Wirkungsquerschnitt
  - differentiell 33
  - total 33
- $Z$ -Boson 368
- Zeeman-Effekt 94–96
  - normaler 280
  - Wasserstoffatom 280
- Zeit 427
- Zeitabhängigkeit 155
  - allgemein 171
- Zeitmessung 64
- Zerfälle in Leptonen 375
- Zerfallskonstante 66
- zerfließendes Wellenpaket 203
- zirkulare Polarisation 114, 142
- Zustand 101
- Zustandsbegriff 80
- Zustandsvektor 411, 412
  - zeitabhängig 412
- Zwei-Quanton-System
  - reduzierte Masse 416
  - Relativbewegung 417
  - Relativkoordinaten 415
  - Schwerpunktsbewegung 417
  - Schwerpunktskoordinaten 415
- Zweiweg-Quanten-Interferenzexperiment 168, 175, 177