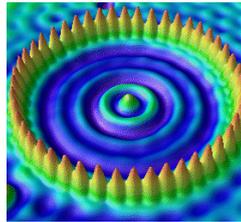
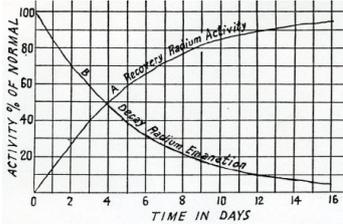
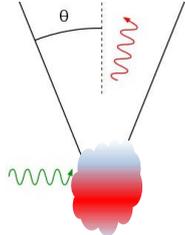
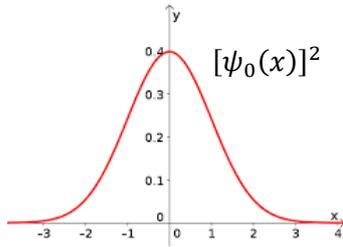
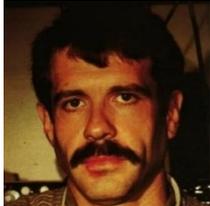


3. WIE IST DIE QUANTENWELT – ERGÄNZUNGEN FÜR INTERESSIERTE

«THERE ARE MORE THINGS IN HEAVEN AND EARTH, HORATIO, THAN ARE DREAMT OF IN YOUR PHILOSOPHY.»

Menschen		Ideen	Veranschaulichung
 ALBERT EINSTEIN	 HEISENBERG & BOHR = «KOPENHAGEN»	Welle-Teilchen-Dualität und Komplementarität. Die Mathematik ist klar. Wie können Quantenobjekte begrifflich erfasst werden?	
 FRIEDR. HUND	 GEORGE GAMOW	Tunneleffekt Hund leitet den Tunneleffekt ab. Gamow wendet ihn beim Alpha-Zerfall an. Der Tunneleffekt ist in der Technik wichtig, z. B. RTM.	
 E. RUTHERFORD	 LISE MEITNER	4 Schwankungen zeigen den Zufall an. Klassischer Zufall entsteht durch Komplexität. Quantenphysikal. Zufall ist fundamental.	
 W. HEISENBERG	 WOLFG. PAULI	5 Heisenbergs Unbestimmtheitsrelationen sind quantitative Ergänzung von Bohrs Komplementarität. Die Realität ist unbestimmt.	
 E. SCHRÖDINGER	 MAX BORN	6 Schrödingers Wellengleichung erlaubt die Berechnung der Wellenfunktion, die Born als Wahrscheinlichkeitsdichte erkennt.	
 JOHN BELL	 ALAIN ASPECT	7 Verschränkung ist die Präzisierung des Wellenaspekts. Quantenobjekte, die einmal in Wechselwirkung standen, bleiben es in beliebiger Distanz.	

3.1 Die schwankende Quantenwelt zeigt Welle-Teilchen-Dualität.

3.1.1 Quantenphysikalische Dualität und mathematische Schwankung



1905, noch am Patentamt, hatte er die Lichtquanten konzipiert. 1909, als ausserordentlicher Professor an der Uni Zürich, fand Einstein eine mathematische Begründung für seine Lichtquanten. Waren sie bisher bloss ein «heuristischer Gesichtspunkt» gewesen (→ 1.3), wurden sie nun Ergebnis einer Theorie.

Einstein untersuchte Plancks Wärmestrahlung bei geringer Dichte und fand, dass deren Energie ebenso schwankte wie die Dichte von Luft in der Atmosphäre. Die Luftdichte-Schwankungen verursachen das Himmelsblau über einen Effekt, der als Rayleigh-Streuung bezeichnet wird. Einstein fand für das Schwankungsquadrat $(\Delta E)^2$ der Energiedichte der Wärmestrahlung pro Volumen und pro Frequenzintervall zwischen f und $f + \Delta f$ zwei Summanden. Diese konnte er theoretische interpretieren:

$$(\Delta E)^2 = (\Delta[\text{Lichtquantendichte}] \cdot \text{Energie pro Quant})^2 + (\Delta[\text{Lichtwellendichte}] \cdot \text{Energie pro Welle})^2$$

Das ist die physikalische Basis des «Sowohl-als-auch von Teilchen- und Wellenaspekt» beim Licht!

Einstein interessierte sich auch für die Quantenphysik der Materie und fand 1924 Dichteschwankungen $(\Delta N)^2$ in einem verdünnten Gas aus Quantenobjekten mit Ruhemasse und fand wieder zwei Terme: den vertrauten **Teilchenterm** ohne h , und einen für Materie neuartigen **Wellenterm** mit h .

3.1.2 Präzisierung des Begriffs «Schwankung» = Standardabweichung

Was ist hier mit «Schwankung» genau gemeint? – Weil in der Quantenphysik der Zufall eine zentrale Rolle spielt, ist es nötig, einige Begriffe aus der beschreibenden Statistik in Erinnerung zu rufen. Wir betrachten als Trainingsmaterial je vier Noten von fünf unterschiedlichen Lernenden:

Anna erhielt 5, 5, 5 und 5; Beat 4, 6, 4, 6; Christine 6, 6, 3, 5; Daniel 6, 6, 2, 6; Eva 5, 4, 3 und 2.

Wir schreiben die entsprechenden Noten**verteilungen**:

$$W_{\text{Anna}} = (0,4,0,0,0,0); W_{\text{Beat}} = (2,0,2,0,0,0); W_{\text{Chr}} = (2,1,0,1,0,0); W_{\text{Dan}} = (3,0,0,0,1,0); W_{\text{Eva}} = (0,1,1,1,1,0)$$

Wir können normierte Notenverteilungen schreiben:

$$w_A = (0,1,0,0,0,0); w_B = (\frac{1}{2},0, \frac{1}{2},0,0,0); w_C = (\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{4},0,0); w_D = (\frac{3}{4},0,0,0, \frac{1}{4},0); w_E = (0, \frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4},0)$$

Wir können diese Notenstatistik auch mit der *Wahrscheinlichkeitsdichte* w aus → 2.4 in Beziehung bringen und etwa an den Potentialtopf denken. Es gibt einen wichtigen Unterschied: Während dort der Wert der Funktion $w(x)$ im Intervall von 0 bis b über den reellen Zahlen definiert ist, haben wir in unserem Notenbeispiel nur die natürlichen Zahlen 6 bis 1 zur Verfügung.

Die bekannteste Grösse der Statistik ist der **Mittelwert** $\langle a \rangle$, das arithmetische Mittel. Wir finden für die Mittelwerte der Noten n :

$$\langle n_{\text{Anna}} \rangle = 5; \langle n_{\text{Beat}} \rangle = 5; \langle n_{\text{Chr}} \rangle = 5; \langle n_{\text{Dan}} \rangle = 5; \langle n_{\text{Eva}} \rangle = 3.5.$$

Weil man mit der Zustandsfunktion den Mittelwert einer experimentellen Messung vorausrechnen kann, spricht man auch von **Erwartungswert** $\langle a \rangle$.

Obwohl die vier ersten Lernenden den gleichen Mittelwert erzielten, unterscheiden sie sich in ihrem Leistungsverhalten. Das kommt in der Schwankung zum Ausdruck:

Die **Schwankung** oder **Standardabweichung** Δa der Grösse a ist

$$\Delta a = \sqrt{\langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle},$$

die Wurzel aus der mittleren quadratischen Abweichung vom Mittelwert $\langle a \rangle$.

Dazu die Beispiele mit den Schwankungen der Noten unserer fünf Lernenden:

Anna ist maximal konstant; alle Abweichungen vom Mittelwert sind 0: $\Delta n_{\text{Anna}} = 0$

Bei Beat liegen die Noten um ± 1 um den Mittelwert 5: $\Delta n_{\text{Beat}} = 1$.

Bei Christine: $\Delta n_{\text{Chr}} = \sqrt{[(6-5)^2 + (6-5)^2 + (3-5)^2 + (5-5)^2]/4} = \sqrt{(1+1+4+0)/4} = 1.2247 \dots$

Bei Daniel: $\Delta n_{\text{Dan}} = \sqrt{[(6-5)^2 + (6-5)^2 + (2-5)^2 + (6-5)^2]/4} = \sqrt{(1+1+9+1)/4} = 1.7320 \dots$

Bei Eva: $\Delta n_{\text{Eva}} = \sqrt{[(5-3.5)^2 + (4-3.5)^2 + (3-3.5)^2 + (2-3.5)^2]/4} = \sqrt{5/4} = 1.1180 \dots$

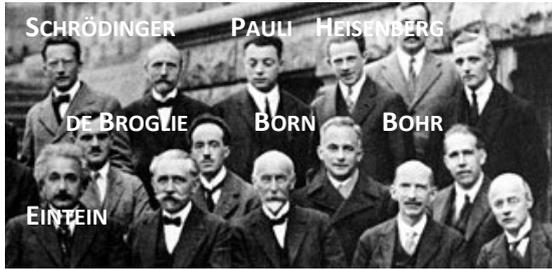
In der Physik übliche Angabe: *Wert einer Messgrösse* = *Mittelwert* \pm *Schwankung* = $\langle a \rangle \pm \Delta a$

Wir könnten die Zustände der Lernenden folgendermassen kennzeichnen: Anna: $5 \pm 0 \Rightarrow$ konstant;

Beat: 5 ± 1 und Christine: 5 ± 1.22 und Eva: $3.5 \pm 1.12 \Rightarrow$ schwankend; Daniel = $5 \pm 1.73 \Rightarrow$ sprunghaft.

3.1.3 Komplementarität: Teilchen- und Wellenaspekt ergänzen sich

Einstein war mit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation nicht glücklich. An der Solvay-Konferenz 1927 kam er jeweils morgens mit einem Gedankenexperiment, das zu einem Widerspruch innerhalb der



SOLVAY-KONFERENZ 1927 IN BRÜSSEL

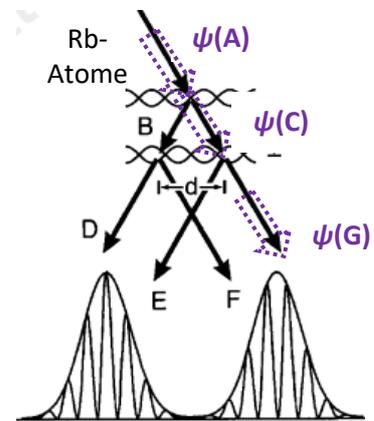
Theorie führen sollte. Könnte man nicht, fragte er zum Beispiel, beim Doppelspaltexperiment die fixe Halterung durch Federn ersetzen und so registrieren, dass das Teilchen z. B. unten durch gegangen ist, weil sein Rückstoss den Doppelspalt nach unten auslenkt?

Später brachte Feynman die gleiche Idee in der Form, dass man den fixen Doppelspalt ausleuchten müsste und aus dem vom Teilchen gestreuten Licht auf den Ort zurückschliessen könnte und so die Skifahrerin beim Weg um die Tanne beobachten würde!

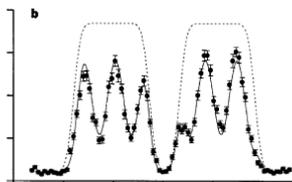
Einsteins «Welcher-Weg?»-Gedankenexperimente erschütterten die Grundfesten der Quantenmechanik, besonders auch die Unbestimmtheitsrelation, die in → 3.3 erläutert wird. Bis am Abend konnten Bohr, Heisenberg und Pauli immer Einsteins Ideen widerlegen.

Heute kann man «Welcher-Weg?»-Experimente real durchführen. Stephan Dürr et al. schickten an der Uni Konstanz 2 m/s «schnelle» Rubidium-Atome $\psi(A)$ durch einen «Doppelspalt» aus stehendem Licht gemäß Figur 3.1. Sie publizierten 1998 das Ergebnis in der Zeitschrift *Nature* unter dem Titel *Origin of quantum-mechanical complementarity probed by a 'which-way' experiment in an atom interferometer*. Ihr Experiment hatte eine gewisse Ähnlichkeit mit dem Mach-Zehnder-Interferometer von Modul 1. Einzelheiten lassen wir weg.

Die Überlagerung der Teilstrahlen $\psi(D)$ & $\psi(E)$ sowie $\psi(F)$ & $\psi(G)$ lieferten je vollständige Interferenzbilder (Wellenaspekt), wenn nicht versucht wurde, gleichzeitig auch den Weg zu registrieren, den die Rb-Atome gewählt hatten (Teilchenaspekt): Aus verschiedenen Gründen sah das Messergebnis nicht so vollkommen aus, wie in Figur 3.1, sondern real, wie in Figur 3.2.



FIGUR 3.1: «DOPPELSPALT»

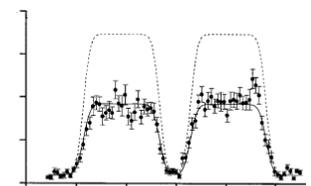


FIGUR 3.2:
OHNE REGISTRIERUNG

Weil Rb-Atome komplex aufgebaut sind, war es möglich, in ihrem Innern durch Mikrowellenbestrahlung kleine Veränderungen vorzunehmen, die je nach Weg unterschiedlich waren, so dass man die Möglichkeit schaffte, den Weg zu registrieren, den das Atom genommen hatten.

Wie in Figur 3.3b deutlich zu erkennen ist, verschwanden die Interferenzen vollständig! Der Wellenaspekt (Figur 3.2) zeigte sich nur, wenn man den Weg nicht beobachtete; er verschwand (Figur 3.3), wenn man den Weg, den Teilchenaspekt,

der Atome beobachtete. Beides gleichzeitig geht nicht – allenfalls ist eine bloss teilweise Beobachtung des Wegs denkbar. Einsteins Traum von einer besseren Quantenmechanik erfüllte sich nicht. Die Natur besitzt diese merkwürdigen Verhaltensweisen, die wir mit «Aspektcharakter», «Unanschaulichkeit», «Dualität» benennen, und die Schrödingers Gleichung und die sich daraus ergebende Zustandsfunktion ψ mathematisch erfassen.



FIGUR 3.3:
MIT REGISTRIERUNG

Wir erinnern an die Titelfrage von Modul 2 «Wo ist das Elektron?». Die Antwort lautet:

DAS ELEKTRON IST NICHT AUF EINER BAHN $x(t)$, SONDERN IN EINEM ZUSTAND ψ .

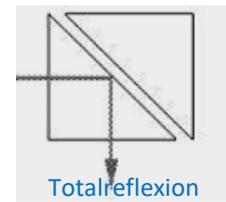
Bohr und Heisenberg vertraten die Auffassung, dass Ort und Impuls eines Quantenobjekts, also sein Teilchen- und Wellenaspekt, nicht in vollem Umfang gleichzeitig existierten, sondern nur so weit, dass sie sich ergänzten. Niels Bohr erfasste diesen Wesenszug der Quantenobjekte mit dem «**Komplementaritätsprinzip**»: Wellen- und Teilchenaspekt sind zwei sich **zum Ganzen ergänzende** Aspekte, ebenso wie die Komplementärfarben Rot und Grün aus zwei Scheinwerfern, die sich auf der Bühne zu Weiss ergänzen.

3.1.4 Bestätigung des Wellenaspekts durch den Tunneleffekt: Durch den Tunnel statt über den Berg

Was hat die Berg- und Talbahn mit dem Glasprisma gemeinsam? Bei beiden geht es unter Umständen



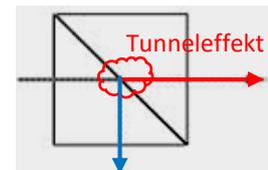
nicht weiter! Wenn der Wagen nicht genügend Energie hat, gelangt er nicht über den Berg, sondern rollt ins Tal zurück. Ebenso: Wenn das Licht vom Glas in die Luft soll, wird es an der Hypotenuse des Prismas total reflektiert. Es kann nicht vom optisch dichteren ins dünnere Medium. Daran ändert sich nichts, wenn ein zweites gleichartiges Prisma dahinter gestellt wird (Figur 2.7a).



TOTALREFLEXION

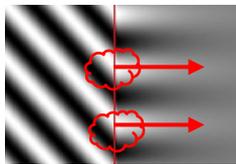
Beim Licht gibt es jedoch eine Möglichkeit hindurchzukommen: den **Tunneleffekt**. Setzt man das zweite Prisma eng genug ans erste, gelangt Licht geradeaus: Tunneleffekt.

Wenn der Abstand zu einem zweiten Prisma nur noch einige Wellenlängen beträgt (Figur 2.7b), tunnelt ein Teil des Lichts durch die «eigentlich undurchlässige» Luftschicht, die deshalb «verbotene Zone» heisst. Nur der Rest wird gespiegelt. Diese Erscheinung ist eine Folge des Wellenaspekts des Lichts.

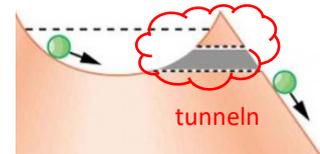


TUNNELEFFEKT UND TEILREFLEXION

Den Tunneleffekt kann man bei allen Wellen (Licht, Wasser, Schall, Radar ...) beobachten. Bei Wasserwellen kann man das Eindringen um etwa eine Wellenlänge in die verbotene Zone fotografieren (Figur 2.7c). Der Effekt tritt auch bei elektromagnetischer Strahlung auf: Auto-UKW-Radio kann man noch ca. 30 m im Tunnelinnern empfangen. Küchen-Mikrowellen sind noch ca. 1 cm ausserhalb der Lochgittertüre nachweisbar. Mit den Augen nicht zu nahe an die Türe!

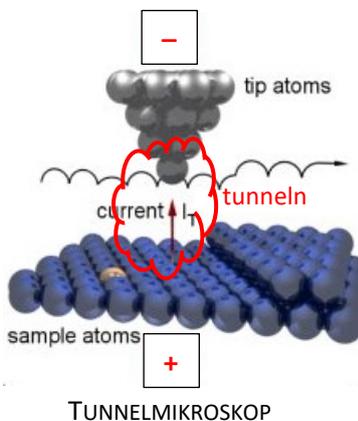
WASSERWELLEN:
EINDRINGEN IN DIE
VERBOTENE ZONE

Gibt es den Tunneleffekt auch bei Materiewellen? – Wenn ein Wagen der Berg- und Talbahn als Quantenobjekte betrachtet wird, müsste die zugehörige de Broglie-Welle durch den «verbotenen Berg» tunneln und der Wagen irgendwie auf die andere Seite gelangen können ... – Wegen der winzigen de Broglie-Wellenlänge alltäglicher Dinge ist so ein Tunneln unmöglich. Plausibel und mit Mikrowellen gut überprüfbar ist, dass das Tunneln von der Dicke der «verbotenen Zone» abhängt. Diese ist für alltägliche Dinge immer viel zu gross. Doch bei den **kleinen Massen** von Elektronen, Protonen usw. kann man den quantenmechanischen Tunneleffekt beobachten und sogar technisch nutzen.



3.1.5 Ein besseres Mikroskop dank Tunneleffekt

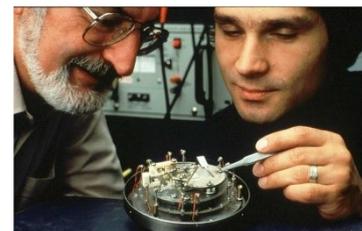
Eine Anwendung des quantenphysikalischen Tunneleffekts ist das Raster-Tunnel-Mikroskop (= RTM = scanning tunneling microscope = STM). Dank ihm können wir heute Atome an der Oberfläche von Kristallen oder von biologischen Geweben sehen und sogar manipulieren. Das Prinzip ist einfach (siehe Figur): Eine feine Spitze tastet aus konstanter Entfernung die Oberfläche zeilenweise ab. Die Distanz wird laufend registriert und im Computer zu einem Bild verarbeitet. Zentral ist die **Regulierung des Abtastens** via den konstanten **Tunnelstrom** I_T . Elektronen tunneln bei einer kleinen Spannung durch den verbotenen leeren Raum zwischen Spitze und Probe. In der Praxis ist das RTM komplexer, deshalb haben Heinrich Rohrer und Gerd Binnig von IBM-Forschungslabor in Rüschlikon bei Zürich 1986 den Nobelpreis erhalten. Damit man die Spitze des RTM kontrolliert um Bruchteile des Atomdurchmessers



TUNNELMIKROSKOP

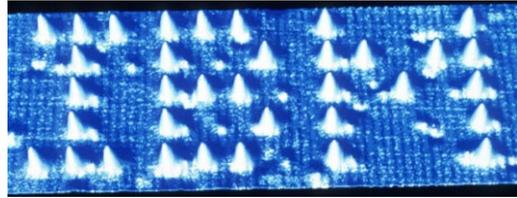
bewegen kann, benützt man Piezokristalle.

Mit winzigen Spannungsänderungen bewirken sie winzige Verformungen für winzige Bewegungen an der RTM-Spitze. –Randbemerkung: Im

HEINRICH ROHRER UND GERD
BINNING – IBM ZÜRICH

elektrischen Feuerzeug geschieht der entgegengesetzte Prozess: Mit mechanischem Druck am Piezokristall erzeugt dieser die Spannung für den Funken.

Durch passendes Umpolen kann man sogar Atome umher transportieren. IBM-Forscher haben das Firmenlogo mit grossen Atomen auf eine Trägersubstanz aus kleinen Atomen geschrieben. Das STM ist sogar eine Werkstatt! Es ist wichtig, sich immer bewusst zu sein, dass der Computer das STM-Bild generiert. Alles könnte auch rosa sein!

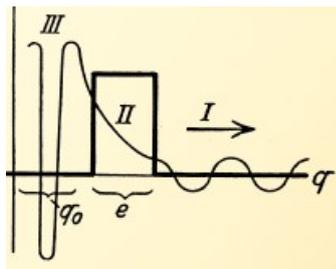


3.1.6 George Gamow erklärt den radioaktiven Alpha-Zerfall

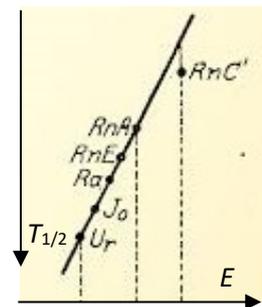
Marie Curie war überrascht, als Ernest Rutherford fand, dass die am leichtesten abschirmbare Strahlung aus ganzen Heliumkernen bestand. Diese flogen mit etwa 5 MeV Energie aus dem Kern, der von einem elektrostatischen «Berg» von etwa 10 MeV umgeben ist. Wären die Alphas klassische Teilchen, müssten sie eingeschlossen bleiben wie Hockey-Pucks durch die Bande des Eisfelds.

1928, als man weder das Neutron noch die Kernkräfte kannte, lernte der junge Russe George Gamow in Göttingen Quantenphysik. Er stellte sich den Atomkern als Tröpfchen vor, das durch die Oberflächenspannung zusammengehalten wird («Haut»). Im Innern von alpha-aktiven Kernen dachte er sich freie Alphas, die etwa mit $0.1c$ hin und her sausten und demnach etwa 10^{21} Mal pro Sekunde versuchten, «die Haut» zu durchbrechen: Teilchenaspekt. Die Alphas zeigen aber auch Wellenaspekt mit einer λ_{dB} von etwa 10^{-15} m, wie man mit 5 MeV nachrechnet. Im Vergleich dazu ist «die Haut», genauer: der zu überwindende Potentialberg, schmal. Also wird Tunneleffekt auftreten können.

Beide Figuren sind aus der Originalarbeit von Gamow kopiert (*Z. für Physik*, 1928). Ein kleiner Teil der de Broglie-Welle tunnelt durch den Potentialberg mit der Dicke e und ermöglicht dem Alpha die Flucht. Gamow berechnete auf dieser Basis die Halbwertszeit als Funktion der Energie und verglich sie mit einigen damals bekannten Nukliden. RnA heisst heute Po-218 und besitzt eine Halbwertszeit $T_{1/2}$ von etwa 3 Minuten; Jo heisst heute Th-230 und besitzt eine Halbwertszeit von 75'000 Jahren. Gamow konnte so die exponentielle Abhängigkeit von der Zerfallsenergie E erklären.



TUNNELEFFEKT IM KERN

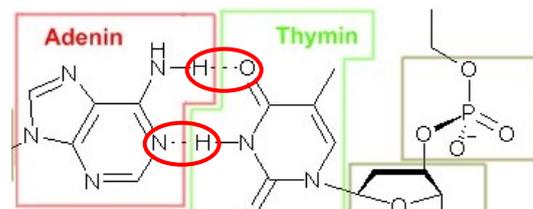


ALPHA-ZERFALL

3.1.7 Kein Leben ohne quantenphysikalischen Tunneleffekt!

Die Sonne erzeugt die Energie, dank der wir leben, durch Kernverschmelzung, **Kernfusion**. Protonen verschmelzen aber nur dann zu schwereren Kernen, wenn sie sich trotz Abstossung genügend nahekommen. Die Rechnung zeigt, dass die Fusionswahrscheinlichkeit bei den im Sonneninnern herrschenden Temperaturen durch den Tunneleffekt von 10^{-100} (praktisch unmöglich) auf 10^{-8} (durchaus möglich) ansteigt. Nur dank des Tunneleffekts setzt die Sonne so viel Energie frei, wie das Leben hier braucht.

Im Mesokosmos verursacht der Tunneleffekt **spontane Mutationen** in der Erbsubstanz DNA. Die Figur zeigt, wie Adenin und Thymin durch zwei Wasserstoff-Brücken-Bindungen zusammengehalten werden. Die Protonen der Bindungen können mit geringer Wahrscheinlichkeit wegtunneln und dadurch die Erbsubstanz verändern. Meistens wird eine solche Mutation durch Reparaturmechanismen wieder rückgängig gemacht. Das Ergebnis ist gleich wie bei Mutationen, die durch Strahlung oder chemische Reaktionen hervorgerufen werden. Die Mutation kann aber auch stabil werden und sich für das betroffene Individuum schädigend oder – in seltenen Fällen – positiv auswirken.



TUNNELNDE PROTONEN IN DER DNA

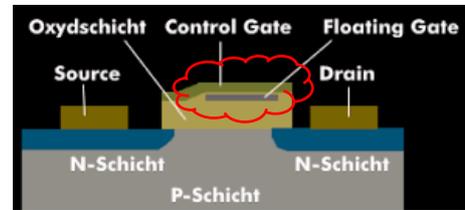
3.1.8 Quantenphysikalischer Tunneleffekt im digitalen Alltag



Den Satz «Ohne Strom läuft nichts.» sollte man variieren in «**Ohne Tunneleffekt läuft nichts**», denn es braucht überall Stecker. Und in den Steckern fließen die Elektronen nur dank des Tunneleffekts zwischen den Kristallen der Steckdose und denjenigen des Steckers.

Auch in vielen elektronischen Bauteilen aus halbleitenden Materialien wie Silizium, Germanium usw. ist der Tunneleffekt wichtig, beispielsweise in der Tunnel-Diode.

In den beliebten **Flash-Speichern** ist das 0 oder 1 als elektrische Ladung auf dem «floating gate» gespeichert. Dieses leitende Stück ist von einer isolierenden Oxydschicht = Quarz (SiO_2) umgeben. Beim Ein- und Auslesen der Daten müssen Elektronen durch diese isolierende Schicht tunneln. Ohne Tunneleffekt gäbe es solch bequeme Speicher mit riesigem Inhalt (Terabyte) nicht.



FLASH-SPEICHER-AUFBAU

3.1.9 Dualität: nützlich, aber nicht die ganze Quantenphysik umfassend.

In 3.1.1 wurde erläutert, wie Einstein die Dualität des Lichts nachwies: Schwankungen der Energiedichte des Lichts setzen sich aus einem klassischen Wellenterm ohne h und einem quantenphysikalischen Teilchenterm mit h zusammen.



De Broglie nutzte die Dualität, um dem Elektron einen Wellenaspekt zuzuordnen, wie in → 2.2 erläutert worden ist. Bohr entwickelte sie weiter zum qualitativen Komplementaritätsprinzip gemäß → 2.6.4. In → 3.3 werden wir sehen, wie Heisenberg aus der Komplementarität eine

quantitative Gesetzmässigkeit entwickelte.

Der Quantenphysik-Nobelpreisträger von 2012, Serge Haroche, schreibt in der Einführung zu einem Hochschulbuch: *This strange result [beim Doppelspalt-Experiment, HPD] (...) imparts to the particle, atom or photon, a wavy character. This is strange to the classical mind because, in mundane language, wave and particle aspects are mutually exclusive. Quantum laws however make them in a way 'coexist'. This is what Bohr has called 'complementarity. This concept is difficult to comprehend and explaining it to the layman does not go without danger. To combine waves and particles in an apparently hybrid entity seems to evoke the monsters, half-man half-beast, which appear in bas-reliefs of Romanesque churches.*

Claus Kiefer, der sich mit den Grundlagen der Quantentheorie beschäftigt, fasste 2015 zusammen: *Beide Bilder [Teilchen- und Wellenbild, HPD] werden für das korrekte Ergebnis benötigt. Das ist der Ursprung des Welle-Teilchen-Dualismus, eines heuristischen Prinzips, das für die Entwicklung der Quantentheorie eine wesentliche Rolle gespielt hat, mit Nachwirkungen (...) selbst heute.*

Die **Dualität ist ein heuristisches Prinzip**, eine hilfreiche Sichtweise, kein eigentliches Naturgesetz. Es wird Sie deshalb nicht erstaunen, dass die Dualität nicht mehr dabei helfen kann, den Spin, die Richtungsquantelung und die Ununterscheidbarkeit von Quantenobjekten zu lernen.



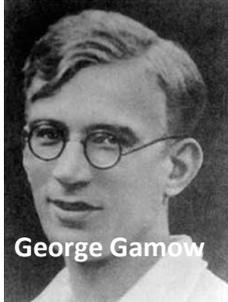
J. J. Thomson,
Nobelpreisträger,
mit Sohn G. P. Thomson,
zukünftigem Preisträger

Dualität im Familienkreis: Joseph John Thomson entdeckte 1897 das erste «subatomare Teilchen», das Elektron. Quantenphysikalisch gesprochen, entdeckte er den Teilchenaspekt des Elektrons. 1906 wurde er dafür mit dem Nobelpreis geehrt. Damals war sein Sohn George Paget 14 jährig. 1927 wies dieser unabhängig von Clinton Davisson (siehe 2.3) den Wellenaspekt des Elektrons durch Beugung eines Elektronenstahls an Kristallen nach. Davisson und G. P. Thomson erhielten 1937 dafür den Nobelpreis.

Reflexion:

Der in 2.4.3 erwähnte George Gamow kreierte 1939 ein Buch über moderne Physik. Er fragte unter anderem, wie wahrscheinlich es sei, dass ein Auto bei einem Unfall durch eine Hausmauer tunneln könne und fand natürlich eine unwahrscheinlich kleine Zahl.

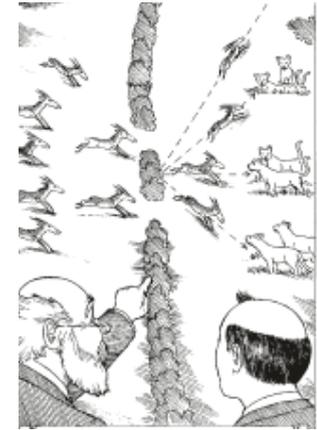
Quantenobjekte beim Durchgang durch einen Doppelspalt veranschaulichte Gamow durch Gazellen beim Durchqueren einer Hecke mit zwei Öffnungen. Löwen «messen» den Ort der Gazellen nach der Hecke.



George Gamow

Anton Zeilinger kommentierte 1999 eine «verbesserte» Neuauflage von Gamows Buch folgendermaßen: «It might have been better to retain Gamow's original figures and thus imply that the conceptual picture is outdated.»

Inwiefern ist das Konzept des Bilds veraltet?

**AKTIVITÄTEN ZU 3.1:****AUFGABEN:**

2.6) Der Tunneleffekt

Ergänzung: M2.11) Tunneldiode

3.2) Sind «Elementarteilchen» wirklich Teilchen?

3.7) Der kontinuierliche Übergang vom Welligen zum Körnigen

EXPERIMENTE:

Tunneleffekt mit Wasser, Licht und Mikrowellen

evtl. Tunneldiode, easy scan RTM,

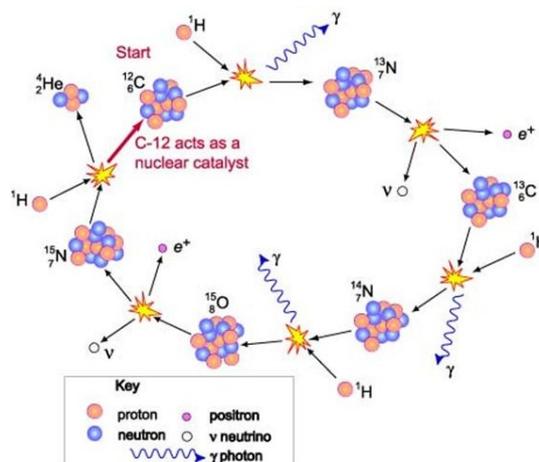
RTM an Universität

PANORAMA:

PANORAMA 1950: IM ATOMZEITALTER.

Was könnte in einem PANORAMA 2000 stehen?

BIOGRAPHIE: WIKIPEDIA > George Gamow



KERNFUSION IN DER SONNE

3.2 Klassische Mechanik und Quantenmechanik: ein direkter Vergleich

In 2.7 wurde dieser Vergleich detailliert dargestellt, so dass wir hier nur zusammenfassen

3.2.1 Klassische Objekte in einem Potentialtopf

Wäre das Elektron ein klassisches Objekt, wäre es jederzeit an einem bestimmten Ort mit einer Kamera nachweisbar. Alle Energien und Energieänderungen wären möglich, auch $E = 0$, also absolute Ruhe.

3.2.2 Quantenobjekte in einem unendlich tiefen Potentialtopf: konkret

In einem Quantumdot ist ein Elektron in einem engen Potentialtopf eingesperrt. Es wird durch einen quantenphysikalischen Zustand $\psi(x)$ beschrieben. Sind die Wände unendlich hoch, müssen die gesuchten $\psi(x)$ Sinus-Funktionen sein. Im Innern des Topfs gilt, was de Broglie über freie Quantenobjekte gefunden hat, und an den Rändern muss gelten: $\psi(x) = 0$. Nur gewisse Wellenlängen und damit nur gewisse Impulse und damit nur gewisse Energien sind quantenphysikalisch möglich.

In einem Potentialtopf der Breite b beträgt die Energie des Grundzustands: $E_1 = \frac{h^2}{8b^2m}$

Mit der Quantenzahl n beträgt die Energie des n -ten Zustands: $E_n = \frac{n^2h^2}{8b^2m}$

Demensprechend sind nur quantisierte Energieabsorptionen resp. -emissionen möglich:

$$hf_{21} = \Delta E_{21} = \frac{3h^2}{8b^2m} \quad \text{und ebenso} \quad hf_{32} = \Delta E_{32} = \frac{5h^2}{8b^2m} \quad \text{usw.}$$

(0) Das Elektron ist in einem Zustand $\psi_n(x)$. Es ist «immer überall und nirgends».

(1) Die **Energie E** des Elektrons ist **quantisiert**. Nur bestimmte Energieänderungen sind möglich.

(2) Die **Farben** des Quantenpunkts zeigen, dass **die Quanten-** und **nicht die klassische Mechanik** gilt.

Bei einem *freien Quantenobjekt* ist b sehr gross, so dass es *praktisch* jede beliebige Energie, jeden beliebigen Impuls und jede beliebige Geschwindigkeit ($v < c$) besitzen kann. Die QM erlaubt auch leichten Objekten das Verhalten, das wir von der klassischen Mechanik kennen.

3.2.3 Quantenobjekte in einem unendlich tiefen Potentialtopf: abstrakt

Wir betrachten nun den Potentialtopf abstrakt. In seinem Innern wirkt keine Kraft. Dort ist das Objekt frei. Die Wände sind unendlich hart, so dass das Objekt nie dort sein darf. Nun soll die Breite des Topfs statt konkret 4 nm allgemein b sein.

Wir achten auf die Symmetrie und legen den x -Nullpunkt in die Mitte des Topfs. Damit die Randbedingung erfüllt ist, muss nun eine \cos -Funktion benützt werden. Zuletzt muss der Faktor $0.7 \text{ nm}^{-1/2}$, der dafür sorgt, dass insgesamt genau ein Objekt da ist (Normierung), neu berechnet werden.

$$1 = \int_{-b/2}^{b/2} \psi_1 \cdot \psi_1 \cdot dx = \int_{-b/2}^{b/2} C^2 \cdot \left[\cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \right]^2 dx = C^2 \cdot \int_{-b/2}^{b/2} \left[\cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \right]^2 dx = C^2 \cdot \frac{b}{2} \Leftrightarrow C = \sqrt{\frac{2}{b}}$$

Das Resultat sind die Zustandsfunktionen, welche die Rand- und die Normierungsbedingung erfüllen:

$$\psi_{1\pm}(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \quad \psi_{2\pm}(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \sin\left(2\frac{\pi x}{b}\right) \quad \psi_{3\pm}(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos\left(3\frac{\pi x}{b}\right) \quad \text{usw.}$$

Aus den Wellenlängen ergeben sich mit de Broglies Beziehung die zugehörigen Impulse und daraus die Energien der erlaubten, stationären Zustände wie sie bereits in Figur 2.19 dargestellt worden sind:

$$E_1 = \frac{h^2}{8mb^2} \quad \text{oder} \quad E_2 = \frac{4h^2}{8mb^2} \quad \text{oder} \quad E_3 = \frac{9h^2}{8mb^2} \quad \text{usw.} \quad E_n = \frac{n^2h^2}{8mb^2}$$

Neben E interessieren uns aber auch die Werte anderer physikalischen Grössen, wie dem Ort x und des Impulses p . Wir wissen, dass wir quantenmechanisch nur die Erwartungswerte $\langle x \rangle$ und $\langle p \rangle$ und die entsprechenden Schwankungen Δx und Δp angeben können. Das machen wir der Reihe nach:

$\langle x \rangle$ ist das mit der entsprechenden Zustandsfunktion gewichtete Mittel von x .

$$\langle x_1 \rangle = \int_{-b/2}^{b/2} \psi_1 \cdot x \cdot \psi_1 dx = \frac{2}{b} \cdot \int_{-b/2}^{b/2} x \cdot \left[\cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \right]^2 dx = 0$$

Wegen des Faktors x ist der Integrand punktsymmetrisch und der Wert des Integrals = 0. Das gilt, was niemanden erstaunt, auch für alle höheren Zustände: $\langle x_n \rangle = 0$.

Interessanter sind die Schwankungen, denn diese unterscheiden sich von Zustand zu Zustand, wie man aus den unterschiedlichen Orbitalen herauslesen kann. Die Schwankung nimmt mit n zu:

$$\text{Für alle } n \text{ gilt: } (\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle (x - 0)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle.$$

$(\Delta x)^2$ ist demnach das mit der entsprechenden Zustandsfunktion gewichtete Mittel von x^2 .

Die sehr anspruchsvolle Aufgabe führt auf ein Integral, das wir mit dem Integralrechner (z. B. auf www.integralrechner.de) lösen!

$$(\Delta x_1)^2 = \frac{2}{b} \cdot \int_{-b/2}^{b/2} x^2 \cdot \left[\cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \right]^2 dx = \frac{(\pi^2 - 6)b^2}{24\pi^2}$$

$$\text{Daraus erhalten wir die Ortsschwankung: } \Delta x_1 = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2}} \cdot b = 0.18076 \dots \cdot b \approx 20\% \cdot b$$

Dieser Wert ist plausibel. Wir hätten auch aus der Figur 3.5b auf ihn schließen können. Wenn Sie Lust verspüren, können Sie die entsprechenden Rechnungen auch für die angeregten Zustände ψ_2 usw. durchführen. Dank des Integralrechners sind sie nicht mehr schwierig.

Schwierig ist es ebenfalls, die entsprechenden Rechnungen für den Impuls durchzuführen. Wir dürfen nicht einfach p an die Stelle von x setzen, denn die beiden Variablen sind durch Schrödingers Gleichung verknüpft, die erst in 3.5 besprochen wird. Wir umgehen das Problem vorerst mit einem Trick. Einfacher als p ist überraschenderweise p^2 , wenn man von der Vermutung $\langle p \rangle = 0$ ausgeht:

$$\text{Allgemein gilt wieder: } (\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle (p - 0)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle.$$

In jedem stationären Zustand gilt nun:

$$\langle E \rangle = \langle p^2 / 2m \rangle \quad \text{und damit} \quad \langle p^2 \rangle = 2mE$$

Betrachten wir den Grundzustand $\psi_1(x)$ mit $E_1 = \frac{h^2}{8mb^2}$, erhalten wir

$$\langle p_1^2 \rangle = 2mE_1 = 2m \frac{h^2}{8mb^2} = \frac{h^2}{4b^2} = (\Delta p_1)^2 \quad \Leftrightarrow \quad \text{Impulsschwankung: } \Delta p_1 = \frac{h}{2b} \quad (*)$$

Am Beispiel $\psi_1(x)$ des Potentialtopfs haben wir damit erstmals Heisenbergs Unbestimmtheitsrelation (UBR), die in 3.4 eingeführt wird, quantitativ getestet:

$$\Delta x_1 \cdot \Delta p_1 = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2}} \frac{h}{2} = 0.09038 \dots \cdot h > \frac{h}{4\pi} = 0.07957 \dots \cdot h$$

Mit etwas Aufwand können Sie nachprüfen, dass dies auch für alle angeregten Zustände mit den Quantenzahlen $n = 2, 3$ usw. gilt.

3.2.4 Quantenmechanische Operatoren

Oben haben wir geschrieben: « $\langle x \rangle$ ist das mit der entsprechenden Zustandsfunktion gewichtete Mittel von x .» Genauer hätten wir schreiben müssen: « $\langle x \rangle$ ist das mit der entsprechenden Zustandsfunktion gewichtete Mittel des Operators \hat{x} . Doch es gilt einfach $\hat{x} = x$. Beim Impuls ist es anders.

Wir dürfen davon ausgehen, dass auch $\langle p^2 \rangle$ sich als gewichtetes Mittel berechnen lässt. Das ist dank Schrödingers «ächter Genialität» – so Einstein – möglich. Schrödinger fand folgen «Übersetzung» vom klassischen Impuls zum quantenmechanischen Impulsoperator:

$$\langle E \rangle = \langle \frac{p^2}{2m} \rangle \Rightarrow \hat{p}^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2} \frac{d^2}{dx^2} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{p} = i \frac{h}{2\pi} \frac{d}{dx}$$

Beachten Sie das Minus-Zeichen, Plancks Konstante und die doppelte Ableitung nach dem Ort x !

\hat{p}^2 und \hat{p} sind keine Faktoren, sondern **Operatoren**.

Wir überprüfen die «ächt» geniale Setzung durch Vergleich mit dem (*) von oben. Die «Übersetzung» kommt folgendermassen ins Spiel:

$$\begin{aligned} \langle p_1^2 \rangle &= -\frac{2}{b} \int_{-b/2}^{b/2} \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \cdot \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \left[\cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \right] \cdot dx = -\frac{2h^2}{4\pi^2 b} \int_{-b/2}^{b/2} \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \cdot \frac{-\pi}{b} \cdot \frac{d}{dx} \left[\sin\left(\frac{\pi x}{b}\right) \right] \cdot dx = \\ &= \frac{h^2}{2\pi b^2} \int_{-b/2}^{b/2} \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) \cdot \frac{\pi}{b} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) dx = \frac{h^2}{2b^3} \cdot \frac{b}{2} = \frac{h^2}{4b^2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p_1 = \frac{h}{2b} \quad \text{wie in } (*) \end{aligned}$$

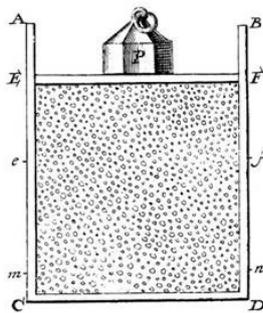
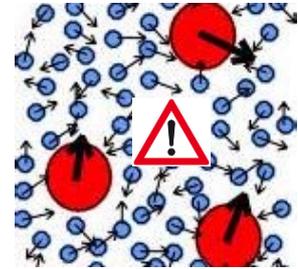
3.3 Die Quantenwelt ist schwankend.

Etappe 4: Den quantenmechanischen Zufall sichtbar machen.

3.3.1 Der Zufall in der klassischen Physik

Dass Schwankungen von irgendwelchen Messgrößen auf den Zufall weisen, der dahinter steckt, hatte der Österreicher Egon Schweidler schon 1905 gefunden. Es ist wohl kein Zufall, dass Schweidler einer der Lehrer von Schrödinger war.

Den klassischen Zufall sichtbar machen, kann man mit der Brownschen Bewegung, die Einstein im Wunderjahr 1905 analysiert hat: Die Wassermoleküle stossen ungeordnet auf das grosse Pollenkorn, das meistens in Ruhe bleibt. Der Erwartungswert für die Verschiebung ist Null. Doch mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ist die Bewegung der Wassermoleküle so einseitig, dass ein beobachtbarer Stoss resultiert, eine Schwankung um den Gleichgewichtsort. Diese Schwankung macht die unsichtbare Zufallsbewegung der Wassermoleküle «sichtbar».



Das Modell mit Atomen und Molekülen als kleine, harte Kügelchen hatte Daniel Bernoulli schon 1738 benutzt um das Verhalten von Gasen und Flüssigkeiten zu erklären (Originalfigur rechts). Das Gasvolumen ist variabel, weil der Abstand zwischen den Atomen ändern kann. Die «flauschigen» Atome lassen sich hingegen in einer Flüssigkeit oder einem Kristall nur mit sehr grossem Aufwand zusammendrücken, weil der Aufwand rasch ansteigt, wenn man ein Elektron in einem kleineren Volumen einsperren will (Mehr in → 3.3.3). Es ist offensichtlich, dass die mittlere Teilchendichte wegen der Wärmebewegung schwankt. Boltzmann, Planck, Einstein und andere beschäftigten sich mit dieser statistischen Mechanik, die letztlich auf Daniel Bernoulli zurückgeht, der mit einer Studie zum Kartenspiel erstmals bekannt geworden war!

Dass die Meteorologie das Wetter nur mit einer begrenzten Sicherheit vorhersagen kann, hat zwei Gründe: (1) Die Ungenauigkeit der Messwerte und (2) die Komplexität des Systems «Atmosphäre».

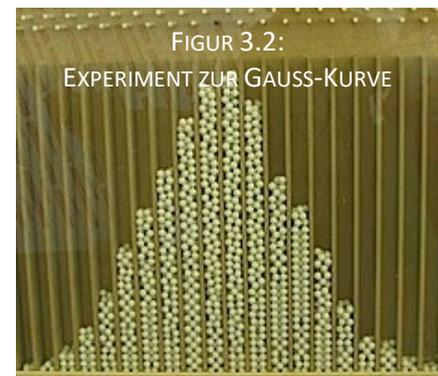
Die gleiche Situation liegt auch beim **Gasdruck** vor. Jedes der ungefähr 10^{23} Gasmoleküle stösst zufällig, früher oder später, schneller oder langsamer, gerade oder schräg auf die Wand. Die Mathematik erlaubt hier nur, **Erwartungswert** und **Schwankung** vorherzusagen. Unser **Nicht-Wissen**



über die Anfangsorte und -geschwindigkeiten der vielen einzelnen Gasmoleküle erlaubt nicht mehr. Das Nicht-Wissen der Anfangsbedingungen und die Unmöglichkeit für so viele Objekte Einzel-Vorhersagen zu berechnen trotz genauer Kenntnis der Gesetze ist Ursache für den **klassischen Zufall**.

Galtons Nagelbrett illustriert mit dem Zufall der klassischen Physik den quantenphysikalischen Zufall, den wir beim radioaktiven Zerfall genauer studieren. Sehr viele Kugeln entsprechen sehr vielen Atomkernen. Die Entscheidung «links oder rechts?» die eine Kugel beim Aufprall auf einen Nagel zufällig nach der klassischen Physik macht, entspricht der Entscheidung, «zerfallen oder nicht?» die das Atom innerhalb der Halbwertszeit gemäss dem quantenphysikalischen Zufall trifft.

Das Experiment führt zu einer Binomialverteilung und im Grenzfalle zu einer Gauss-Kurve. Wenn die Nägel nicht in der Mitte, die beiden Möglichkeiten also nicht gleich wahrscheinlich sind, wird die Verteilungskurve unsymmetrisch. Nimmt man nicht die Halbwertszeit als Basis, kann die Wahrscheinlichkeit, in der nächsten Minute zu zerfallen nur $p = 1\%$ und die zum Überleben $= (1-p) = 99\%$ sein. Dann resultiert eine unsymmetrische sogenannte Poisson-Kurve.



3.3.2 Der Zufall in der Quantenphysik

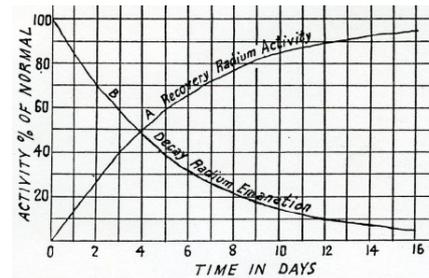
Der Quantenphysiker Haroche sagt, dass ein Nebelschleier über der Realität liege. Man muss sie mit Schrödingers ψ beschreiben, das mit Borns Regel (2.4) bloss Wahrscheinlichkeitsaussagen ermöglicht. Das machte Schrödinger wütend (\rightarrow 2.6.3). Als er 1926 in Kopenhagen mit Bohr die Rolle seines ψ diskutierte und die Auseinandersetzungen so heftig wurden, dass er erkrankte, fand er: *Wenn die verdammte Quantenspringerei doch wieder anfangen soll, dann tut es mir leid, die ganze Theorie gemacht zu haben.*

Auch später konnte sich Schrödinger nicht mit dem quantenphysikalischen Zufall anfreunden. 1935 erfand er die berühmte Katze, welche die Sinnhaftigkeit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation infrage stellte (\rightarrow 2.8.1). Gleichzeitig vermuteten Einstein und seine Mitarbeiter in Princeton, dass es eine verborgene Variable geben könnte, die das scheinbar Zufällige durch ein kausales Geschehen im Hintergrund ebenso erklären könnte wie bei der Brownschen Bewegung (\rightarrow 3.6).

Erstmals aufgetaucht ist der quantenphysikalische Zufall 1917, als Einstein erneut das Strahlungsgleichgewicht analysierte und die spontane und induzierte Emission unterschied. *Es spricht zu Gunsten der Theorie, dass das statistische Gesetz (...) nichts anderes als das Rutherfordsche Gesetz des radioaktiven Zerfalls ist.* Ernest Rutherford hatte zusammen mit Frederick Soddy schon 1900 den Zerfall einer Muttersubstanz und das Entstehen einer Tochtersubstanz als Funktion der Zeit beobachtet.

Einstein suchte nach einer tieferen Erklärung für die Erscheinung, die Rutherford nur beschrieben hatte: *Aber ich fühle, dass der eigentliche Witz, den uns der ewige Rätselaufgeber da vorgelegt hat, absolut nicht begriffen ist.* Die Erklärung sollte eine Ursache für die beobachtete Wirkung liefern. Er klagte Born 1920: *Das mit der Kausalität plagt auch mich viel. Ist die quantenhafte Licht-Absorption und -emission wohl jemals im Sinne der vollständigen Kausalitätsforderung erfassbar, oder bleibt ein statistischer Rest?*

Heute wissen wir: Nein! Es bleibt ein statistischer Rest. Die Kausalität muss fallen gelassen werden. Das gilt in der Grössenordnung der Atome, mit denen wir im Gymnasium nicht experimentieren können, und das gilt in der Grössenordnung der Atomkerne, wo die Natur uns in Form radioaktiver Substanzen Anschauungsmaterial für die Erfassung «des statistischen Rests», für die Nicht-Erfüllbarkeit der «vollständigen Kausalitätsforderung» liefert.



RUTHERFORDS ZERFALLSKURVE
UND AUFBAU DER TOCHTERSUBSTANZ

3.3.3 Der Zufall beim radioaktiven Zerfall

Mit «Quantenspringerei» war die spontane Emission eines Lichtquants gemeint. Sie ist ebenso schwer zu messen wie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Atom. Sie ist jedoch verwandt mit dem Gammazerfall. Ein Atomkern hat nach einem Alpha- oder Beta-Zerfall einen Energieüberschuss. Unter Abgabe eines Gammaquants mit der Energie $\Delta E = hf$ kehrt er in einen stabilen Zustand zurück wie ein Elektron in der Hülle (\rightarrow 2.5.3): $\psi_{\text{Anfang}} \rightarrow \psi_{\text{Ende}}$. Der Zeitpunkt t , zu dem dieser Prozess geschieht, ist unbekannt. Er unterliegt dem **quantenphysikalischen Zufall**. Wir könnten sagen:

Ein instabiler Zustand eines Quantenobjekts (Atom, Atomkern, Neutron usw.) zerfällt **jederzeit** (mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit) **und nie** (mit Sicherheit zu einem fixen Zeitpunkt).



L. Meitner

«Quantenspringerei» geschieht auch in unserem Körper: Mit der Nahrung nehmen wir unter anderem Kalium auf. Dieses enthält von Natur aus einen winzigen Anteil (2 ppm) des sehr langlebigen radioaktiven Isotops K-40 mit 1 Mia. Jahre Halbwertszeit. Der K-40-Atomkern kann seinen Energieüberschuss auf zwei Arten abgeben: einerseits durch Aufspaltung eines Neutrons in ein Proton und ein Elektron und Aussenden desselben (Beta-Strahler), andererseits durch Einfangen eines 1s-Elektrons im Kern, wobei sich ein Proton in ein Neutron verwandelt (K-Einfang). Lise Meitner hat nicht nur gezeigt, dass 1s-Elektronen einen Einfluss auf das Geschehen im Atomkern haben, sondern auch die Beziehung zwischen Beta- und Gammazerfall geklärt (\rightarrow PANORAMA 1950).

Unsere etwa 10^{24} Kohlenstoffatome enthalten von Natur aus einen Anteil von 10^{-12} radioaktivem C-14. Also stecken 10^{+12} C-14-Kerne in unserem Körper. Sie wollen ihren Energieüberschuss durch Beta-Zerfall mit einer Halbwertszeit von 5730 Jahren loswerden. Dabei senden sie ein Elektron weg, das man messen kann. C-14-Zerfälle machen es zum Beispiel möglich, den «Özi» auf rund 3200 v. Chr. zu datieren, weil bekannt ist, dass die Wahrscheinlichkeit eines C-14-Atoms innerhalb von 5730 Jahren zu zerfallen, 50% beträgt. **Der Zerfall ist spontan**, ohne äussere Ursache. Zerfallszeitpunkt und -richtung des Beta-Teilchens sind total dem quantenphysikalischen Zufall unterworfen. Bereits 1900 hat Rutherford das exponentielle Gesetz für den radioaktiven Zerfall gefunden und mit dem Zufall erklärt. Sind zur Zeit $t = 0$ total N_0 instabile Atomkerne vorhanden, so sind es nach einer **Halbwertszeit T** nur noch $N_1 = N_0/2$. Nach n Halbwertszeiten noch $N_n = N_0 \cdot (\frac{1}{2})^n = N_0 \cdot (2)^{-n}$, und nach einer beliebigen Zeit t erhält man mit $n = t/T$ aus der geometrischen Folge N_k eine Exponentialfunktion $N(t)$. Man kann als Basis statt 2 auch die Eulersche Zahl e benutzen: $2^{-t/T} = e^{-\lambda t}$ mit $\lambda = \ln 2/T$. Die **Wahrscheinlichkeit**, dass ein Atom in der gewählten Zeiteinheit zerfällt, steckt im λ .



Zerfallsgesetz für Alpha-, Beta- und Gammazerfall:	$N(t) = N_0 \cdot 2^{-t/T} = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$	(3.1a)
--	--	--------

Wie viele unserer C-14-Atome zerfallen in einem Jahr? Wie gross ist also $[N_0 - N(1 \text{ Jahr})]$? Nach dem Einsetzen in (3.3a) erhalten wir für die Differenz rund 120 Millionen. Rechnen wir das Jahr um, erhalten wir rund **92 Zerfälle pro Sekunde**. Diese Elektronen bestrahlen uns von innen. Wir und andere Lebewesen können mit diesem nur durch die Quantenphysik «geregelten» Bombardement nur deshalb lange leben, weil wir molekulare Reparaturmechanismen besitzen.

In einem Experiment kann man mit einem Nachweisgerät nicht die Anzahl radioaktiver Atome $N(t)$, sondern nur das Bombardement, die Anzahl Zerfälle pro Zeit, die **Intensität $I(t)$** beobachten:

Was man direkt beobachtet, ist die Zahl der pro Zeit wegfliegenden Quantenobjekte (Alpha, Beta- oder Gamma), die **Intensität $I(t) \equiv -\Delta N/\Delta t = -[N(t) - N(t+\Delta t)]/\Delta t$** . Im Beispiel waren Δt ein Jahr und ΔN eine **Abnahme** von 120 Millionen, deshalb das Minus-Zeichen. In der Infinitesimalrechnung wären ΔN und Δt beide unendlich klein. Die Infinitesimalrechnung liefert die zweite Form des Zerfallsgesetzes.

Erwartungswert für die Intensität:	$I(t) = I_0 \cdot 2^{-t/T} = I_0 \cdot e^{-\lambda t}$	mit $I_0 = N_0 \cdot \lambda$	(3.1b)
------------------------------------	--	-------------------------------	--------

In unserem Körper liefern etwa 10^{+12} C-14 Atome mit λ rund $10^{-10} \text{ sec}^{-1}$ die Intensität $I_0 \approx 100 \text{ sec}^{-1}$.

Wenn Sie sich jetzt fragen, wo denn in einem Gesetz vom Typus $128 \rightarrow 64 \rightarrow 32 \rightarrow 16 \rightarrow 8 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ der Zufall stecke, haben Sie ganz recht. Der quantenphysikalische Zufall äussert sich **nicht** im Zerfallsgesetz, sondern **in den Schwankungen** der Messwerte um den Erwartungswert herum. Weil die allgemeine Mathematik anspruchsvoll ist, machen wir konkrete Beispiele mit kleinen Anzahlen n radioaktiver Atome, die wir nach genau 1 Halbwertszeit betrachten:

- Bei 2 radioaktiven Atomen gibt es nach 1 T genau $2 \cdot 2 = 4$ Möglichkeiten: beide Atome zerfallen; genau eines zerfällt; beide zerfallen nicht. Dies entspricht 3 Ergebnissen oder **Ereignissen** mit den **Häufigkeiten** 1 resp. 2 resp. 1. Wir sprechen von einer Häufigkeitsverteilung mit $1 + 2 + 1 = 4 = (1 + 1)^2$ möglichen Ereignissen. Dazu gehört die folgende **Wahrscheinlichkeitsverteilung**

$$p_1 = \frac{1}{4} = 25\% \text{ und } p_2 = \frac{2}{4} = 50\% \text{ und } p_3 = \frac{1}{4} = 25\% \quad (\text{total} = 1000\% = 100\% = 1).$$

- Bei $n = 4$ Atomen gibt es 5 Ereignisse mit den Häufigkeiten $1 / 4 / 6 / 4 / 1$ $(1+1)^4$ Fälle
Die Wahrscheinlichkeiten p_1 bis p_5 betragen: $6.25\%; 25\%; 37.5\%; 25\%; 6.25\%$ (total = 100%)

- Bei $n = 6$ Atomen gibt es 7 Ereignisse mit den Häufigkeiten $1 / 6 / 15 / 20 / 15 / 6 / 1$ 2^6 Fälle
Die Wahrscheinlichkeiten p_1 bis p_7 betragen (in %): $1.56; 9.38; 23.4; 31.1; 23.4; 9.38; 1.56$ (total = 100%)

- Bei $n = 16$ Atomen gibt es 17 Ereignisse mit den Häufigkeiten:

$$1 / 16 / 120 / 560 / 1820 / 4368 / 8008 / 11440 / 12870 / 11440 \text{ usw.} \quad (\text{insgesamt } 2^{16} \text{ Fälle})$$

Die Wahrscheinlichkeiten p_1 bis p_{17} betragen: $0.02\%; 0.24\%; 1.8\%; 8.5\%; 28\%; 67\%; 12\%; 18\% 20\%; 18\%; 12\%; 67\%; 28\%; 8.5\%; 1.8\%; 0.24\%; 0.02\%$ (total 100%).

Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des genauen Erwartungswerts nimmt offenbar mit n ab:

$$n \quad 2 \rightarrow 4 \rightarrow 6 \rightarrow \dots \rightarrow 16 \rightarrow \dots \text{ usw.} \quad \text{auf} \quad \text{unendlich}$$

$$p_{\text{Hälfte}} \quad 50\% \rightarrow 37.5\% \rightarrow 31.1\% \rightarrow \dots \rightarrow 20\% \rightarrow \dots \text{ usw.} \quad \text{vermutlich auf } \rightarrow 0.$$

Man erkennt, dass es mit wachsendem n immer unwahrscheinlicher wird, dass genau die Hälfte zerfällt. Wir stellen aber beim letzten Beispiel fest, dass das Resultat mit grosser Wahrscheinlichkeit **nahe beim theoretischen Wert** liegt. Bei $n = 16$ gilt 8 ± 2 mit 80% Wahrscheinlichkeit:

$$12\% + 18\% + 20\% + 18\% + 12\% = 80\%$$

An dieser Stelle erinnern wir an die Definition der Standardabweichung Δ , die wir nun für ΔN , respektive für ΔI benützen. Wir berechnen sie für die Fälle $n = 2, 4$ und 6 :

$$\begin{aligned} - n = 2: & 1 \cdot (-1)^2 + 2 \cdot (0)^2 + 1 \cdot (+1)^2 = 2 & \Rightarrow \Delta^2 = 2/2^2 = 0.5 \\ - n = 4: & 1 \cdot (-2)^2 + 4 \cdot (-1)^2 + 6 \cdot (0)^2 + 4 \cdot (+1)^2 + 1 \cdot (+2)^2 = 16 & \Rightarrow \Delta^2 = 16/2^4 = 1 \\ - n = 6: & 1 \cdot (-3)^2 + 6 \cdot (-2)^2 + 15 \cdot (-1)^2 + 20 \cdot (0)^2 + 15 \cdot (1)^2 + 6 \cdot (2)^2 + 1 \cdot (3)^2 = 96 & \Rightarrow \Delta^2 = 96/2^6 = 1.5 \end{aligned}$$

Offenbar nimmt Δ^2 mit n zu. Wenn wir also eine grosse Zahl N_0 von Atomen zerfallen lassen, zeigt eine Rechnung, dass nach T nicht genau $N_0/2$ zerfallen sind, sondern $N_0/2 \pm \sqrt{N_0}/2$.

Und wenn wir die Überlegungen auf (3.3b) übertragen, erhalten wir $I(t) = (I_0 \pm \sqrt{I_0}) \cdot 2^{-t/T}$.

Die **Schwankung** der Intensität I durch den quantenphysikalischen **Zufall** ist definiert durch die Standardabweichung und beträgt: $\Delta I = \sqrt{I}$ (3.1c)

(3.3c) sagt, die C-14-Strahlung in unserem Körper samt Schwankung sei $92 \pm 10 \text{ sec}^{-1}$. In rund 2/3 aller Sekunden zerfallen zwischen 82 und 102 C-14-Atome. Mit etwa 95% Wahrscheinlichkeit gibt es pro Sekunde zwischen 72 und 112 Zerfälle, usw. Auch die genaue Poisson-Statistik liefert für die Standardabweichung den Wert: $\pm \Delta I = \pm \sqrt{I_0}$.

Nicht das Gesetz für die Intensität der Strahlung, sondern das Gesetz für ihre **Schwankung zeigt den quantenmechanischen Zufall.**

Bemerkung: Die Entwicklung der Kernphysik verlief längere Zeit ohne Quantenmechanik. Lise Meitner, die «deutsche Marie Curie», schrieb noch 1927: *Aber es lässt sich leicht einsehen, dass die Atomkerne selbst nebst den Wasserstoffkernen noch Elektronen enthalten müssen, abgesehen von den aussen kreisenden Elektronen.*

Doch schon 1928 erklärte Gamow den Alpha-Zerfall mit dem Tunneleffekt. Die Entdeckung des Neutrons 1932 ermöglichte die vielen Isotope zu ordnen und das kontinuierliche Energiespektrum beim Beta-Zerfall mit einem bisher unbekanntem, sehr leichten und ungeladenen Teilchen, dem Neutrino, zu begründen.



NACHDENKEN ÜBER PHYSIK 3: In welchem Verhältnis steht die Physik zu anderen, benachbarten Wissenschaften? - Auch die Mathematik beschäftigt sich mit Schwankungen und Zufall. Kommt zuerst die Mathematik oder die Physik? Wie ist das Verhältnis zu den anderen Naturwissenschaften, etwa der Biologie? Steht eine philosophische Position hinter einer quantenphysikalischen Interpretation?

AKTIVITÄTEN ZU 3.3

AUFGABEN:

3.9) Schwankung beim radioaktiven Zerfall

EXPERIMENTE:

Schwankung beim radioaktiven Zerfall

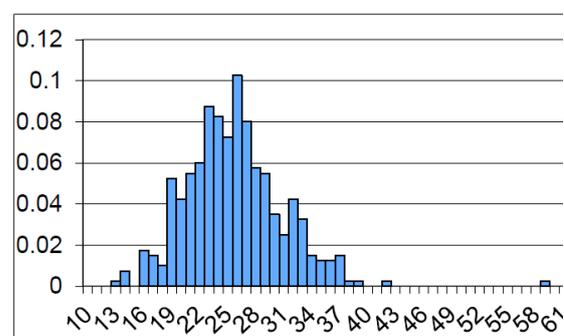
MEDIEN:

Alpha-Teilchen treffen auf Leuchtschirm

BIOGRAPHIEN:

Lise Meitner

Maria Goeppert-Mayer



3.4 Die Quantenwelt ist unbestimmt.

Etappe 5: Dualität erhält einen präzisen Rahmen.

3.4.1 Eine glänzende Idee des jungen Heisenberg



W. HEISENBERG
MIT 25 JAHREN

«Ihr, die Ihr in die Welt der Quantenobjekte eintretet, lasst alle Hoffnung fahren, sie genau messen und ihre Zukunft vorausberechnen zu können!» könnte Werner Heisenberg die *Commedia Divina* abgewandelt haben. Sein Chef in Göttingen, Max Born, schrieb über ihn an Albert Einstein: *Ich spekuliere auch ein wenig über de Broglie Wellen (...) Überhaupt sind meine jungen Leute (...) glänzend. (...) Heisenbergs neue Arbeit, die bald erscheint, sieht sehr mystisch aus, ist aber sicher richtig und tief.*

In Berlin blieb Einstein jedoch skeptisch und schrieb seinem Kollegen und Freund Paul Ehrenfest nach Leiden: *Heisenberg hat ein grosses Quantenei gelegt. In Göttingen glauben sie daran. Ich nicht.*

Aus dem Quanten-Ei schlüpfte eine erste Quantenmechanik, die sogenannte Matrizenmechanik. Sie ist eine mathematische Alternative zur Wellenmechanik. Werner Heisenberg (→ PANORAMA 1950) stand in ständigem Austausch mit seinem Studienfreund Wolfgang Pauli (→ PANORAMA 1950) und mit Niels Bohr in Kopenhagen.

Unbestimmtheitsprinzip und Komplementarität (→ 2.6.2) heisst das erste Kapitel in Wolfgang Paulis Standardwerk zur Quantenphysik. Beides gehört zusammen. In manchen Texten wird die *Unbestimmtheitsrelation* als «*Unschärferelation*» bezeichnet. Heisenberg spricht anfänglich von «*Ungenauigkeitsrelation*». Das tönt nach Messfehler und verdeckt den Kern der Sache. Wolfgang Pauli nennt es «*Unbestimmtheitsprinzip*». «Prinzip» ist allerdings übertrieben, denn man kann es aus Schrödingers Gleichung herleiten. In anderen Sprachen entstehen Synonyme mit Nuancen: *uncertainty relation, uncertainty principle, indeterminacy relation, principe d'incertitude ...*

Diese Unbestimmtheit wird durch verschiedene Ungleichungen beschrieben, von denen wir im Folgenden zwei studieren.

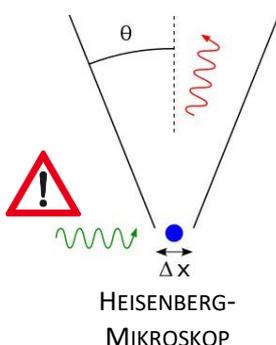


WOLFGANG PAULI
ALS GYMNASIAST

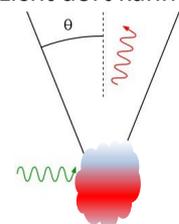
3.4.2 «Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik»

So hiess Heisenbergs Artikel, in dem er seine neue Idee erläuterte – «anschaulich», ohne irgend eine Zeichnung auf 26 Seiten! Als er 1929 an der Universität Chicago Vorlesungen hielt, meinte er: *Trotzdem findet man noch heute bei vielen Physikern mehr eine Art Glauben an die Richtigkeit der neuen Prinzipien, denn ein klares Verständnis.* Er beschloss den *mathematischen Apparat* in einen Anhang zu verbannen und die *Grundbegriffe der Quantentheorie* anhand von Experimenten zu erläutern. Im Kapitel *Kritik der physikalischen Begriffe des Partikelbildes* brachte er zwei Gedankenexperimente.

Eines heisst heute **Heisenberg-Mikroskop**. Heisenberg hat es sich ausgedacht, nachdem der Compton-Effekt bekannt war, aber bevor von Ardenne das erste Elektronenmikroskop realisierte.



Mit ihm will man den Ort eines Elektrons mit der Genauigkeit Δx bestimmen. Dazu beleuchtet man es mit einem Lichtquant von links. Durch die Wechselwirkung mit dem Elektron wird das Lichtquant abgelenkt und gelangt in die Objektivlinse, wenn es in den Winkelbereich θ fliegt. Mit dem Licht dort kann man das Elektron wahrnehmen. Bei der Beobachtung erhält das Elektron jedoch einen Rückstoss. Sein Impuls wird um Δp verändert. Wenn man die Rechnung für diesen Compton-Effekt, die für uns noch zu anspruchsvoll ist, durchführt, stösst man auf $\Delta x \cdot \Delta p \approx h$ (*).

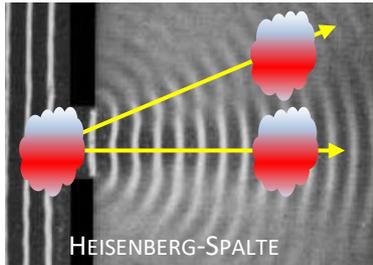


In Worte gefasst: «Je genauer man den Ort bestimmen will (kleines Δx), desto energiereicheres Licht (grosses p) muss man nehmen und umso mehr stört man den Impuls des Elektrons (grosses Δp).» Das ACHTUNG-Signal deutet an, dass im Partikelbild einseitig mit dem Teilchenaspekt des Elektrons gearbeitet wird. Wir wissen, dass das Elektron nicht an einem Ort, sondern in einem Zustand, angedeutet durch eine Wahrscheinlichkeitswolke, ist.

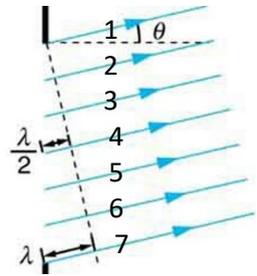
Heute erreicht man mit Röntgen-Mikroskopen ein Δx von 30 nm. Damit betrachtet man kein Elektron wie in Heisenbergs Gedankenexperiment, sondern die Position eines H-Atoms mit $m = 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg. Es erhält bei diesem Experiment nach der Beziehung (*) zwangsläufig einen Stoss von $\Delta p \approx 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js / 30 nm. Daraus ergibt sich für die Geschwindigkeit des H-Atoms eine Unbestimmtheit von $\Delta v \approx 10$ m/s, ziemlich viel, wenn man von einem eigentlich ruhenden H-Atom ausgeht.

Damit haben wir eine erste Veranschaulichung von Heisenbergs «**Kritik des Partikelbildes**»: Ort und Zeit eines durch ψ charakterisierten «Partikels», also eines Quantenobjekts, können nicht zugleich absolut genau bestimmt werden.

In Heisenbergs zweitem Gedankenexperiment geht es um eine **Ortsmessung mit Blenden**. Da die Quantenobjekte auch im Wellenbild untersucht werden können, geht man von ihrer de Broglie-Wellenlänge λ_{dB} aus. Beim Durchgang der de Broglie-Welle durch eine Blende geschieht mit ihnen das gleiche wie mit den Wasserwellen in der Wellenwanne: am Rand der Blende werden sie gebeugt, «laufen sie um die Ecke». Die Ablenkung geht etwa bis zur angedeuteten Stelle. Dort gibt es die 1. destruktive Interferenz bei der Beugung am Einfachspalt.



Der Winkel in Richtung zur 1. Auslöschung ist in der Figur etwas übertrieben gezeichnet. Für ihn gilt $\sin \vartheta_1 = \lambda_{dB}/d$, wobei im Gegensatz zum Doppelspalt d hier die Spalt- oder Blendenbreite ist. Die Begründung für das Gesetz ist, dass die Teilstrahlen 1 und 4 sowie 2 und 5 usw. je $\lambda_{dB}/2$ Wegunterschied aufweisen und sich deshalb auslöschen. Heisenberg nimmt $d \approx \Delta x$ an, die Unbestimmtheit des Orts. Vor der Blende war der Impuls quer zur Ausbreitungsrichtung = 0. Weil sich Schrödingers ψ -Welle nach der Blende seitlich ausbreitet, besitzt der Impuls nun eine Komponente Δp quer zur Ausbreitungsrichtung. Es ist $\Delta p/p = \sin \vartheta_1 = \lambda_{dB}/d \approx (h/p)/\Delta x$. Daraus ergibt sich wieder die Beziehung (*) $\Delta x \cdot \Delta p \approx h$.



Heisenbergs *mathematischer Apparat* liefert statt des Ungefähr-Zeichens \approx eine Ungleichung:

Heisenberg: **Unbestimmtheitsrelation UBR zwischen Ort und Impuls** $\Delta x \cdot \Delta p \geq h/4\pi$ (3.2a)
 Ort und Geschwindigkeit sind nicht **gleichzeitig** beliebig genau messbar.
 h begrenzt die mögliche Messgenauigkeit und damit unsere Naturerkenntnis.

Wolfgang Pauli fasste Heisenbergs UBR in Worte:

«Man kann die Welt mit dem p -Auge und man kann sie mit dem q -Auge [Ortsvariable q statt x] ansehen, aber wenn man beide Augen **zugleich** aufmachen will, wird man irre.»

(1) «Stopp», werden Sie jetzt vielleicht sagen und an eine Nebelkammeraufnahme denken. Hier misst man doch den Ort des Objekts genau und kann **gleichzeitig** aus der Krümmung und dem bekannten



Magnetfeld auch den Impuls genau berechnen. Das widerspricht der UBR (3.1a). Rechnet man aber ein Beispiel konkret durch, stellt man keine Verletzung der UBR fest. Bei solchen Fotos aus der Teilchenphysik ist man noch nicht in der Dimension von $\lambda_{de\ Broglie}$ der Elektronen oder allgemein der Elementarteilchen wo die UBR der Quantenphysik regiert.

(2) Betrachtet man bei Zeilinger et al. in 2.3.4 die Neutronen quer zur Flugrichtung, kommt man aber bereits in die Nähe der Grenze: $100 \mu\text{m} \cdot 1 \text{ cm/s} \cdot 1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,7 \cdot 10^{-33} \text{ Js} > 5,3 \cdot 10^{-35} \text{ Js} = h/4\pi$.

(3) Wir kennen ein Quantenobjekt genau: das Elektron im Potentialtopf gemäss 3.1.4.2. Wir haben dort bei der Betrachtung des Impulses herausgefunden, dass im Grundzustand $\Delta p = 1,6 \cdot 10^{-24}$ Ns beträgt. In den angeregten Zuständen ist die Energie und damit der Impuls noch grösser.

Die Unbestimmtheit des Orts haben wir nicht diskutiert. Sie ist kleiner als die Breite des Topfs, also kleiner als 200 nm. Mit den Überlegungen, die wir in der Figur 3.3b angestellt haben, können wir den Wert $\Delta x = 60$ nm begründen. Wir stellen fest, dass hier (selbstverständlich) die UBR 3.1a erfüllt ist:

$$\Delta x \cdot \Delta p = 1,6 \cdot 10^{-24} \text{ Ns} \cdot 60 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 100 \cdot 10^{-33} \text{ Js} = 10^{-31} \text{ Js} \geq h/4\pi$$

3.4.3 UBR beim Potentialtopf und Lokalisierungsenergie

Auch beim freien Quantenobjekt sind gemäss 3.2.5 nur Zustände möglich, die die UBR (3.1a) erfüllen. Wie ist es aber mit den Zuständen, die wir in 2.7.2 für den Potentialtopf der Breite b gefunden haben: Erfüllen sie Heisenbergs Ungleichung?

Wir betrachten den Grundzustand beim Potentialtopf: $\psi_{1+}(x) = C \sin\left(\frac{\pi x}{b}\right)$.

Für seine Ortsunbestimmtheit gilt offensichtlich $\Delta x < b$ (Figur 2.18b). Wir wählen $\Delta x = b/2$.

Für die Impulsunbestimmtheit gilt $\Delta p = p$, denn der Impuls schwankt zwischen den zwei Richtungen.

Im Grundzustand wird $\Delta p = p_1 = h/2b$; in höheren Zuständen wird p_n immer grösser.

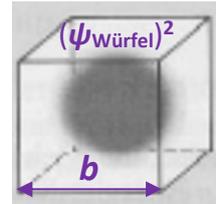
Wir überprüfen: $\Delta x \cdot \Delta p = (b/2) \cdot (h/2b) = h/4 > h/4\pi$

Wir finden, dass im Grundzustand die UBR (3.1a) erfüllt ist. In den höheren Zuständen mit gleichem Δx und grösseren Δp gilt das noch viel stärker.

Der Potentialtopf ermöglicht uns, die **Lokalisierungsenergie** zu berechnen. Das ist die Energie, die nötig ist, um ein Quantenobjekt der Masse m in einem Würfel mit den Kantenlänge b einzusperren:

Zuerst ist das QO in einem unendlich weiten Potentialtopf. Seine Wellenlänge ist unendlich; sein Impuls und die Energie seines Grundzustands sind = 0.

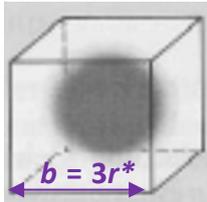
Wenn wir die Wände des Potentialtopfs ganz langsam einander nähern, müssen wir die Tendenz des Wellenaspekts nach viel Raum überwinden, die wir in 2.5.1 zur Erklärung der Stabilität des Atoms herangezogen haben. Wir müssen Arbeit aufwenden und diese Arbeit äussert sich dann als Energie des Grundzustands, die wir in 3.1.4.2 gefunden haben. Ihr Wert ist $E_1 = h^2/8mb^2$. Diese Kompression des Raums, der dem QO zur Verfügung steht, muss in allen drei Dimensionen erfolgen. Wir halten demnach fest:



Energie, die minimal aufgewendet werden muss, um ein Quantenobjekt mit m in einem Würfel der Kantenlänge b einzusperren = **Lokalisierungsenergie**: $E = 3h^2/8mb^2$ (3.3)

3.4.4 Die atomaren Grössenordnungen abschätzen.

Mit (3.2) können wir den stabilen Grundzustand des H-Atoms mit Bohrs Radius $a = r_{\text{Bohr}}$ und der Ionisationsenergie E_1 quantenmechanisch auf die Naturkonstanten h , ϵ , e und m zurückführen, denn der «Kompressionsvorgang» wird durch die elektrische Kraft bewirkt. Wir benötigen aus der Elektrizitätslehre die Grösse der elektrischen Energie zwischen Elektron und Proton im Abstand r . Sie beträgt $E_{\text{elektrisch}} = e^2/4\pi\epsilon r$.



Das ist die Energie, die frei wird, wenn sich das Elektron aus dem Unendlichen auf die Entfernung r ans Proton «abstürzt». Sie gilt auch in der Quantenmechanik, aber nur für eine *mittlere Entfernung* r^* , denn das Elektron ist nicht punktförmig.

Klassisch, ohne Lokalisierungsenergie, würde das Elektron in den Kern stürzen. Aber quantenmechanisch wird die beim Absturz freiwerdende elektrische Energie zur Lokalisierung des Elektrons verwendet:

$$E_{\text{elektrisch}} = e^2/4\pi\epsilon r^* = E_{\text{Lokalisierung}} = 3h^2/8mb^2.$$

Wieweit füllt das Elektron den Würfel? Wir treffen die Annahme $b = 3r^*$, denn Atome sind flauschig. Wir dürfen deshalb und weil Atome punkt- und nicht würfelsymmetrisch sind, kein genaues Ergebnis erwarten. Wir lösen nach r^* auf und erhalten eine sinnvolle Grössenordnung für das H-Atom:

$$r^* = 3\pi/18 \cdot \epsilon h^2/m e^2 = 90 \text{ pm} \approx 53 \text{ pm} = 1/\pi \cdot \epsilon h^2/m e^2 = r_{\text{Bohr}}.$$

Nun können auch wir ausrechnen, was Schrödinger interessiert hat, die Ionisationsenergie, die Energie, die benötigt wird, um das Elektron wieder ins Unendliche zu befreien. In unserem Grundzustand* können wir die elektrische Energie durch Einsetzen von r^* bestimmen: $E_{\text{elektrisch}}^* = e^2/4\pi\epsilon \cdot r^*$

$$E_1^* = 3/2\pi^2 \cdot m e^4/\epsilon^2 h^2 = 16 \text{ eV} \approx 13.6 \text{ eV} = 1/8 \cdot m e^4/\epsilon^2 h^2 = E_1$$

Unsere Näherung ist nur 20% grösser als der von Schrödinger gefundene und mit den Messungen bestens übereinstimmende Wert E_1 , den wir in MINT III ausrechnen. Wir erinnern uns an dieser Stelle, dass oft durch ein Minus-Zeichen ausgedrückt wird, wenn es sich um einen gebundenen Zustand handelt, wenn also bei der Bildung des Zustands aus freien Quantenobjekten Energie frei wird.

3.4.5 Charakterisierung des Zustands ψ eines freien Quantenobjekts, z. B. eines Neutrons

Die Zustände ψ_{frei} von freien Quantenobjekten sind mathematisch erst ein Thema in \rightarrow MINT III. Wir können sie aber graphisch erfassen mit den Wahrscheinlichkeitsdichten. Z. B. sollen zwei Neutronen die **gleichen Erwartungswerte** für Ort x und Impuls p , aber unterschiedliche Dichten $w_{\text{eng}}(x)$ und $w_{\text{breit}}(x)$ haben. Sie sind in den Zuständen ψ_{eng} und ψ_{breit} . Die Ortsschwankung Δx des engen Zustands ist kleiner als die des breiten. Die Impulsschwankungen Δp sind umgekehrt beim engen gross und beim breiten klein. Beide Zustände erfüllen die UBR.

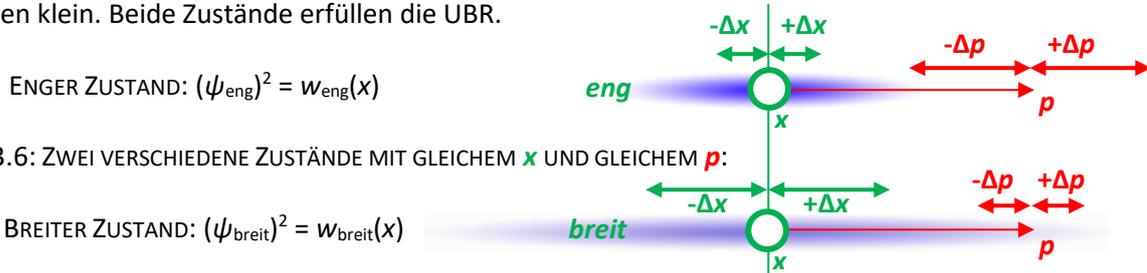


FIG. 3.6: ZWEI VERSCHIEDENE ZUSTÄNDE MIT GLEICHEM x UND GLEICHEM p :

Achtung: Das Produkt $\Delta x \cdot \Delta p$ kann für ein Objekt frei variieren, solange es grösser ist als $h/4\pi$. Beachten Sie die **Komplementarität!** Bei Quantenobjekten wie bei Elektronen, Neutronen, Atomen usw. macht sich aber die UBR nicht immer bemerkbar. Es wächst aber «automatisch» Δp , wenn man das Objekt genau lokalisiert, und es wächst Δx , wenn man ein enges Geschwindigkeitsfilter einbaut und Δp reduziert. Grosse Moleküle sind eindeutig noch Quantenobjekte, aber bei Stäubchen mit 10^{10} Molekülen ist der Nachweis schwierig. Die Grenze ist fließend. Mehr in \rightarrow 3.5.

Ein freies Quantenobjekt kann ganz unterschiedlich «aussehen» \Leftrightarrow unterschiedliche ψ besitzen!

3.4.6 Eine Beziehung aus der Wellenlehre und die Unbestimmtheit der Energie

Bestimmung von Wellenlängen benötigt Zeit. Man muss mindestens eine ganze Welle vorbei streichen lassen. Das Gleiche gilt für die Frequenz. Man muss bei der Zeitmessung mindestens 1 ganze Periode vergehen lassen. Das führt zur Beziehung $\Delta f \cdot \Delta t \approx 1$. Kombiniert man dies mit Einsteins Gleichung (1.2) $E = hf$, respektive mit $\Delta E = h\Delta f$, erhält man eine weitere Unbestimmtheitsbeziehung:

Heisenberg: **Unbestimmtheitsrelation UBR zwischen Energie und Zeit** $\Delta E \cdot \Delta t \geq h/4\pi$ (3.2b)
Je genauer man eine Energie messen will, umso länger braucht man.

Es zeigt sich, dass diese Unbestimmtheitsrelation nicht auf der gleichen Stufe steht wie (3.1a). Der Grund dafür ist, dass die Zeit t in der Physik eine ganz besondere Rolle spielt. Trotzdem hat die UBR (3.1b) eine Reihe von interessanten Anwendungen.

- (1) In einem stationären Zustand ist die Energie des Atoms ganz genau definiert: $\Delta E = 0$, aber $\Delta t = \infty$.
- (2) In der Hochenergiephysik werden sog. Resonanzen erzeugt, die nur sehr kurz leben. Diese Zeit kann man indirekt über die UBR (3.1b) «messen»: $T \approx \Delta t \approx h/\Delta E$. ΔE ist typisch $500 \text{ MeV} = 8 \cdot 10^{-11} \text{ J}$. Also wird $T \approx h/\Delta E = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js} / 8 \cdot 10^{-11} \text{ J} \approx 1 \cdot 10^{-23} \text{ s}$.

AKTIVITÄTEN ZU 3.4

AUFGABEN:

- 3.3) Abstrakt wie Heisenberg oder konkret wie Schrödinger oder wie im Karlsruher Physikkurs?
- 3.4) Mit der Unbestimmtheitsrelation rechnerisch klären: Elektron im Kern
- 3.5) Mit der Unbestimmtheitsrelation rechnerisch klären: Doppelspalt

MEDIEN:

Youtube zur Unbestimmtheitsrelation

BIOGRAPHIEN:

Werner Heisenberg
 Wolfgang Pauli

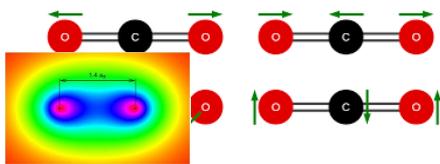
3.5 Einstieg in die Quantenmechanik mit dem CO₂-Molekül

3.5.1 Probleme bei grossen Atomen

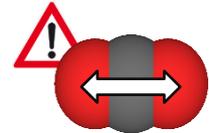
Im ersten Moment glaubt man, das He-Atom auch mit dem Würfelmodell → 3.4.4 erfassen zu können. Der Kern ist doppelt geladen und sorgt dafür, dass die Elektronen stärker lokalisiert sind: 28 pm anstatt 32 pm wie beim H-Atom. Es könnte sein, dass die Abstossung zwischen den beiden Elektronen eine noch stärkere Lokalisierung verhindert. Doch beim Li-Atom mit dem riesigen Atomradius von 152 pm stellt man fest, dass ein neuartiges Prinzip (Pauli-Prinzip) für das dritte Elektron einen ganz anderen Zustand verlangt. Für die Erfassung des C-Atoms und des O-Atoms als viel Quantenmechanik nötig. Das Energiestufenmodell (Schalenmodell) der Chemie erweist sich als praktikables Arbeitsinstrument.

3.5.2 Probleme bei komplizierten Molekülen

Im Vergleich zu einem Eiweissmolekül ist das CO₂ simpel. Aber im Vergleich zum H₂-Molekül ist es bereits sehr kompliziert. Aus dem Pauli-Prinzip ergibt sich, dass es zwar eine Elektronenpaar-Bindung, aber keine Elektronentripel-Bindung geben kann. Hingegen



zeigt die Chemie, dass Atome mit vielen Elektronen Doppel- und Dreifach-Bindungen eingehen können. Im Bild ist ein H₂-Molekül eingeblendet um daran zu erinnern, dass die Elektronen «überall und nirgends» sind, dass also das CO₂-Molekül so



voluminös ist. Moleküle besitzen keine glatte, wohldefinierte Oberfläche! Solche Moleküle können als Ganzes in der angedeuteten Weise schwingen, ohne auseinanderzubrechen.

3.5.3 CO₂- und andere Schwingungen gemäss der klassischen Mechanik

Eine Schaukel oder eine schwingende Saite können wir mit einer schnellen Kamera fotografieren und daraus das Weg-Zeit-Gesetz empirisch bestimmen:

$x(t) = U \cdot \sin(\omega t)$ oder $x(t) = U \cdot \cos(\omega t)$ je nach der Wahl des Zeitnullpunkts.

U ist die Entfernung des Umkehrpunkts von der Gleichgewichtslage.

ω ist die Kreisfrequenz. $\omega = 2\pi f = 2\pi/T$ mit Schwingungsdauer $T = 1/f$.

Die Momentangeschwindigkeit ist die erste Ableitung der Weg-Zeit-Funktion $v = x'$:

$v(t) = \omega U \cdot \cos(\omega t)$ oder $v(t) = -\omega U \cdot \sin(\omega t)$ (je nach Zeitnullpunkt).

Die Momentanbeschleunigung ergibt sich als erste Ableitung der Geschwindigkeit $a = v' = x''$:

$a(t) = -\omega^2 U \cdot \sin(\omega t)$ oder $a(t) = -\omega^2 U \cdot \cos(\omega t)$ (je nach Zeitnullpunkt).



Die theoretische Basis der klassischen Mechanik ist Newtons Kraftgesetz: $F = ma$.

Setzen wir dieses konkret an für einen harmonischen Oszillator, also einer Punktmasse m , die mit einer Feder der Härte f um eine Gleichgewichtslage $x = 0$ schwingt. Es gilt das Federgesetz $F(x) = -kx$.

Klassisches Bewegungsgesetz für den harmonischen Oszillator $-kx = F = ma = mx''$

Man erhält die **Differentialgleichung** $-k \cdot x(t) = m \cdot x(t)''$ für das unbekannte Weg-Zeit-Gesetz $x(t)$.

Vom Experiment kennen wir bereits die Lösung. Durch Einsetzen der Version mit dem Sinus, bei der das Objekt zur Zeit $t = 0$ in der Gleichgewichtslage ist, prüfen wir ihre theoretische Basis:

$$-k \cdot x(t) = a(t) \Leftrightarrow -k \cdot U \cdot \sin(\omega t) = m \cdot x(t)'' = m \cdot [-\omega^2 U \cdot \sin(\omega t)] \Leftrightarrow \text{Wir haben eine Lösung!}$$

Durch die Sinusfunktion kann beidseits dividiert werden. Die Frage, ob es noch ganz andere Lösungen gäbe, überlassen wir der Mathematik! Der Wert von U bleibt unbekannt, er ist beliebig.

Es gibt für $x(t) = U \cdot \sin(\omega t)$ nur eine Bedingung, die erfüllt sein muss: $k = m\omega^2 \Leftrightarrow \omega^2 = k/m$

EIGENSCHAFTEN DES HARMONISCHEN OSZILLATORS GEMÄSS DEN GESETZEN DER KLASSISCHEN MECHANIK:

- 1) Der harmonische Oszillator besitzt ein Weg-Zeit-Gesetz $x(t)$.
- 2) U , die Entfernung des Umkehrpunkts, ist beliebig wählbar. *Ruhe ist möglich.* $\Leftrightarrow x = 0$.
- 3) *Jede beliebige Gesamtenergie ist möglich.* Im Ruhezustand gilt $E_0 = 0$.
- 4) Jede beliebige Energieaufnahme und -abgabe ist möglich. Das *Energiespektrum* des klassischen harmonischen Oszillators ist *kontinuierlich*.

Der klassische Oszillator ist jederzeit an einem bestimmten Ort. Absolute Ruhe ist möglich. Das klassische Energiespektrum ist kontinuierlich. \Leftrightarrow **Beliebiger Energieaustausch ΔE ist möglich.**

3.5.4 Die Schrödinger-Gleichung**Etappe 6: Richtige Quantenmechanik.**

Wir knüpfen an $\rightarrow 2.5$ und $\rightarrow 2.6$ und $\rightarrow 3.2.4$ (Operator \hat{p}^2) an und fassen die Entwicklung zusammen: (1) Erwin Schrödinger erfindet über Neujahr 1925/1926 die Gleichung für einen «Feldskalar» ψ (heute = Wellenfunktion), indem er de Broglies Materiewellen erweitert und präzisiert.

(2) Max Born entdeckt im Sommer 1926 die Bedeutung der Wellenfunktion: Sie verbindet das Wellige und das Körnige der Quantenobjekte in der Wahrscheinlichkeit. Wahrscheinlichkeitsdichte $w = \psi^2$.

Die physikalische Grundidee der Schrödingergleichung geht auf den Energiesatz zurück:

$$E_{kin} + E_{pot} = \frac{p^2}{2m} + E_{pot} = E_{tot} \Rightarrow \frac{p^2}{2m} \cdot \psi(x) + E_{pot} \cdot \psi(x) = E_{tot} \cdot \psi(x)$$

Unbekannt in dieser Gleichung ist die Funktion $\psi(x)$. Sie kann erst bestimmt werden, wenn durch den «ächt genialen» [Einstein in einem Brief an Schrödinger] Gedanken aus dieser algebraischen Gleichung eine **Differentialgleichung** gemacht wird. Dabei tauchen Ableitungen auf. Auch Plancks Konstante h , die Grundlage der Quantenphysik, muss ins Spiel kommen.

$$E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \quad \text{«übersetzt» Schrödinger in} \quad -\frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \cdot 2. \text{Ableitung} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot 2. \text{Ableitung}$$

Diese «Übersetzungen» sind neu, «ächt genial». Es gibt keine Herleitung der Schrödinger-Gleichung aus Gesetzmässigkeiten der klassischen Mechanik.

Wir betrachten nur die mathematisch einfachste Version in 1 Dimension und ohne die Variable t .

Erwin Schrödinger 1926:	Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in 1 Dimension
$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \psi''(x) + E_{pot}(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$	(3.4)

3.5.5 CO₂- und andere Schwingungen gemäss der Quantenmechanik: Grundzustand

Schrödinger bezeichnete die Aufgabe, der wir uns stellen, als den «allereinfachsten Fall». Die Aufgabe ist nur mathematisch schwierig, weil man im Gymnasium kaum Erfahrungen mit dem Lösen von Differentialgleichungen sammelt. Oben ist die Differentialgleichung für die harmonische Schwingung der klassischen Mechanik gelöst worden. Hier gehen wir gleich vor. Ein Unterschied ist, dass wir den Ort in $\psi(x)$ und nicht mehr die Zeit in $x(t)$ als Variable haben.

Wir vermuten, dass das $\psi(x)$ mit der Standardabweichung b um den Mittelpunkt schwanken könnte und die Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(x) = \psi^2$ eine Gauss'sche Verteilungsfunktionen sei:

Die Verteilung $w(x) = \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2b^2}}$ (*) hat die Eigenschaft, dass sie integriert 1 = 100% liefert.

Zu dieser Verteilung gehört gemäss $w(x) = \psi^2$ die Zustandsfunktion: $\psi(x) = C \cdot e^{-\frac{x^2}{4b^2}} = T(x)$ (**)

Wir müssen nun überprüfen, ob unsere vermutete Funktion, die wir als Testfunktion $T(x)$ bezeichnen, die Schrödinger-Gleichung (K1.5) erfüllt.

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \psi''(x) + \frac{1}{2} kx^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (***)$$

Start der Überprüfung mit der Kettenregel: $T'(x) = \frac{-1}{4b^2} \cdot 2x \cdot C e^{-\frac{x^2}{4b^2}} = \frac{-1}{2b^2} \cdot x \cdot T(x)$

Fortsetzung mit der Produktregel: $T''(x) = \frac{-1}{2b^2} \cdot T(x) + \frac{1}{4b^4} \cdot x^2 \cdot T(x)$

Einsetzen in (***) gibt: $-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{-1}{2b^2} \cdot T(x) + \frac{1}{4b^4} \cdot x^2 \cdot T(x) \right] + \frac{1}{2} kx^2 \cdot T(x) = E \cdot T(x)$

Hurra: $T(x)$ ist eine korrekte Lösung, denn die ganze Gleichung kann durch $T(x)$ geteilt werden!

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{-1}{2b^2} + \frac{1}{4b^4} \cdot x^2 \right] + \frac{1}{2} kx^2 = E \quad \text{umgeformt} \quad -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{1}{4b^4} \right] \cdot x^2 + \frac{1}{2} k \cdot x^2 = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{-1}{2b^2} \right] + E$$

Damit diese Gleichung für alle x gültig ist, müssen die Werte links und rechts je Null sein. Also gilt:

$$(I) \quad \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{-1}{2b^2} \right] + E = 0 \quad \text{und} \quad (II) \quad -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{1}{4b^4} \right] + \frac{1}{2} k = 0$$

Ersetzt man k in (II) gemäss $k = m\omega^2$ und löst auf, erhält man: $b^2 = \frac{h}{4\pi m\omega} \Leftrightarrow \frac{1}{b^2} = \frac{4\pi m\omega}{h}$.

Dieser Wert in $T(x)$ eingesetzt, liefert die Funktion des Grundzustands, eine Lösung von (***):

$$\psi_0(x) = C_0 \cdot e^{-\frac{\pi m \omega}{h} x^2} = C_0 \cdot e^{-\frac{1 m \omega}{2 \hbar} x^2}$$

Hier wurde die gebräuchliche Abkürzung «**h-quer**» = $\hbar = h/2\pi$ benützt.

Setzt man diesen Wert aus (II) in (I) ein und löst auf, erhält man die **Energie** des Grundzustands:

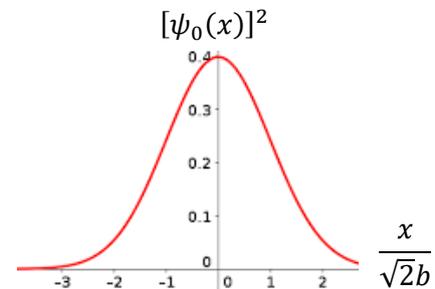
$$\text{Energie des Grundzustands} \quad E_0 = \frac{h\omega}{4\pi} = \frac{hf}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Wir setzen den Index 0 bei ψ_0 und bei E_0 um anzudeuten, dass es sich um den **Grundzustand** handelt.

Offenbar ist quantenmechanisch **keine Ruhe** möglich. Es gibt immer die minimale **Nullpunktenergie** $E_0 > 0$.

Wir müssen noch die Konstante C resp. C_0 bestimmen. Anstelle der Auslenkung U tritt die Standardabweichung. Wenn wir (*) und (**) vergleichen, erhalten wir:

$$C_0 = \sqrt{\frac{1}{b\sqrt{2\pi}}} = \sqrt[4]{\frac{2m\omega}{h}} = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \text{ und der Grundzustand wird}$$



FIGUR 3.7: GRUNDZUSTAND

$$\text{Grundzustand} \quad \psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{2m\omega}{h}} \cdot e^{-\frac{\pi m \omega}{h} x^2} = \sqrt[4]{\frac{1m\omega}{\pi\hbar}} \cdot e^{-\frac{1m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (3.5a)$$

In der Figur 3.7 ist in Abszissenrichtung nicht die ursprüngliche physikalische Grösse x aufgetragen, sondern eine mit der Schwankung passend reduzierte, dimensionslose Grösse.

In Ordinatenrichtung ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $w = \psi^2$ aufgetragen. Auch hier ist die Bezugsgrösse der Länge nicht die physikalische Entfernung x von der Gleichgewichtslage, sondern die genannte dimensionslose Grösse. Die Zustandsfunktion $\psi_0(x)$, die Wurzel von w , ist auch eine Gauss-Kurve.

Wir stellen fest, dass die Auslenkung U nicht nur keine quantenmechanisch sinnvolle Variable ist, sondern dass nur bestimmte «Auslenkungen» möglich sind. Die minimale «Auslenkung» ist durch f vorgegeben und mit der Nullpunktenergie $E_0 = \frac{h\omega}{4\pi} = \frac{hf}{2}$ verknüpft.

3.5.6 CO₂- und andere Schwingungen gemäss der Quantenmechanik: Angeregte Zustände

Wir verknüpfen die Normalverteilung mit einer Polynom-Funktion, wie beim 2s-Zustand des H-Atoms.

$$\psi_1(x) = C_1 \cdot x \cdot \psi_0(x). \text{ Der Faktor } x \text{ bringt die Punktsymmetrie und den Knotenpunkt.}$$

Ebenso mit einer quadratischen Polynom-Funktion und so weiter:

$$\psi_2(x) = C_2(x^2 - b^2)\psi_0(x).$$

Wir kontrollieren nun, ob unser vermutetes $\psi_1(x) = C_1 \cdot x \cdot e^{-\frac{x^2}{4b^2}}$ die Gleichung (***) erfüllt. Wenn ja, berechnen die zugehörige Energie E_1 . Wir benützen die Abkürzung: $\psi_1(x) = x \cdot U$.

$$\text{Wir finden mit Produkt- und Kettenregel: } \psi_1'(x) = 1 \cdot U + x \cdot U \cdot \left(2x \cdot \frac{-1}{4b^2}\right) = U - \frac{2}{4b^2} x^2 U$$

$$\text{Ebenso: } \psi_1''(x) = U \cdot \left(2x \cdot \frac{-1}{4b^2}\right) - \frac{2}{4b^2} 2x \cdot U - \frac{2}{4b^2} x^2 \cdot U \cdot \left(2x \cdot \frac{-1}{4b^2}\right)$$

$$\text{Umgeformt: } \psi_1''(x) = -\frac{3}{2b^2} x \cdot U + \frac{1}{4b^4} x^3 \cdot U$$

$$\text{Eingesetzt in (***)}: \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left[-\frac{3}{2b^2} \cdot x \cdot U + \frac{1}{4b^4} \cdot x^3 \cdot U \right] + \frac{1}{2} kx^2 \cdot x \cdot U = E \cdot x \cdot U$$

Wir können durch den Term $x \cdot U$ teilen, also haben wir weitere eine Lösungsfunktion von (***):

$$\text{Die vereinfachte Gleichung lautet: } \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left[-\frac{3}{2b^2} + \frac{1}{4b^4} \cdot x^2 \right] + \frac{1}{2} kx^2 = E$$

Wiederum müssen die Werte rechts und links je Null sein, damit diese Gleichung für alle x gültig ist.

$$\text{(III) } \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{-3}{2b^2} \right] + E = 0 \quad \text{und} \quad \text{(II) } \frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{1}{4b^4} \right] + \frac{1}{2} k = 0$$

Man ersetzt k in (II) wieder gemäss $k = m\omega^2$, löst auf und erhält wieder: $b^2 = \frac{h}{4\pi m \omega} \Leftrightarrow \frac{1}{b^2} = \frac{4\pi m \omega}{h}$.

Setzt man (II) in (III) ein und löst auf, erhält man die **Energie** des ersten **angeregten Zustands**:

$$\text{Energie des 1. angeregten Zustands} \quad E_1 = 3 \frac{h\omega}{4\pi} = 3 \frac{hf}{2} = 3 \frac{\hbar\omega}{2} \quad (3.5b)$$

Die Bestimmung der Konstanten C_1 ist aufwendiger; das ist ein Thema für die Hochschule.

Wellenfunktion des 1. angeregten Zustands	$\psi_1(x) = C_1 \cdot x \cdot e^{-\frac{\pi m \omega}{h} x^2} = C_1 \cdot x \cdot e^{-\frac{1 m \omega}{2 \hbar} x^2}$
---	---

Wir könnten nun ebenso kontrollieren, ob unser vermutetes $\psi_2(x) = C_2 \cdot (x^2 - b^2) \cdot e^{-\frac{x^2}{4b^2}}$ die Gleichung (***) erfüllt. Das tut ψ_2 ! Berechnen wir die zugehörige Energie E_2 , erhalten wir die

Energie des 2. angeregten Zustands	$E_2 = 5 \frac{h\omega}{4\pi} = 5 \frac{hf}{2} = 5 \frac{\hbar\omega}{2}$
------------------------------------	---

Und so weiter für alle höher angeregten Zustände mit komplizierteren Funktionen!

In der Figur 3.8 sind viele Informationen zum harmonischen Oszillator zusammengestellt: In der Ordinate sind sowohl die Zustände als auch ihre Energien sowie die klassische Parabel $\frac{1}{2} kx^2$ dargestellt.

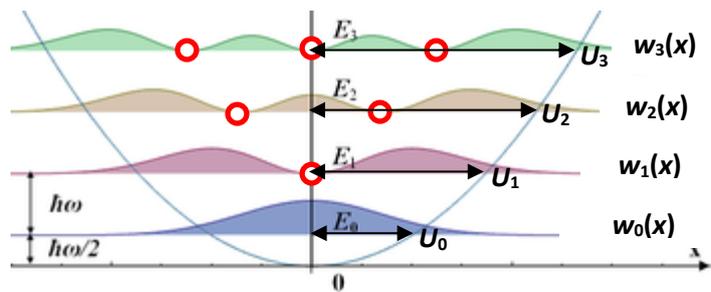
(1) Alle Zustände klingen exponentiell nach aussen ab und besitzen n Knoten. Sie sind achsen- resp. punktsymmetrisch.
 (2) Die Energieniveaus besitzen die Werte



$$E_n = (2n + 1) \frac{hf}{2}$$

(3) Die Energiedifferenzen zwischen benachbarten Niveaus betragen $\Delta E = hf = \hbar\omega$
 (4) Die Zustände erstrecken sich merklich über den klassischen Umkehrpunkt hinaus (Parabel). Dies kann man mit dem quantenmechanischen «Tunneln» in Beziehung bringen.

(5) In der Figur 3.8 sind nur die 4 untersten «Orbitale», genauer: die Wahrscheinlichkeitsverteilungsdichten angegeben. Zudem sind die Knotenpunkte mit $w = 0$ eingezeichnet.



FIGUR 3.8: DIE 4 ERSTEN ZUSTÄNDE DES QM-OSZILLATORS

EIGENSCHAFTEN DES HARMONISCHEN OSZILLATORS GEMÄSS DEN GESETZEN DER QUANTENMECHANIK:

- 1) Der harmonische Oszillator kann nur durch seine Zustandsfunktion beschrieben werden.
- 2) Ruhe ist nicht möglich.
- 3) Nur Zustände mit bestimmten Energien sind stabil. \Leftrightarrow Es gibt ein diskretes Spektrum.
- 4) Aufnahme und Abgabe von Energie ist nur quantisiert mit Portionen $\Delta E = hf = \hbar\omega$ möglich.

Nur die Quantenmechanik vermag zu erklären, weshalb die schwingenden CO₂-Moleküle nur bei bestimmten Wellenlängen (um 4 μ m und um 14 μ m) absorbieren und emittieren.

3.5.7 Rotationen gemäss der Quantenmechanik

Wir können die in 2.1.5 angestellten Überlegungen für die Rotation des CO₂ nicht so vollständig in die Quantenmechanik übersetzen, wie wir das für die Schwingung gemacht haben. Bei Drehungen muss der Vektoraspekt berücksichtigt werden, was die Schrödinger-Gleichung noch schwieriger macht.



Lucy Mensing-Schütz

Genau solche Bewegungen untersuchte eine der wenigen Quantenphysikerinnen, **Lucy Mensing**. 1926 arbeitete sie in Göttingen zusammen mit Wolfgang Pauli und nutzte die im Vorjahr von Heisenberg erfundene, abstrakte Matrizenmechanik. Sie publizierte ihre Ergebnisse im Artikel *Die Rotations-Schwingungsbanden nach der Quantenmechanik*. In dieser Arbeit fand sie als erste Näherung, den Ausdruck für die Energie eines zweiatomigen Moleküls mit der Masse m und dem Gleichgewichtsabstand a und mit der Schwingungsquantenzahl n und der Rotationsquantenzahl l .

Beachten Sie den Term $l(l + 1)$, der typisch quantenmechanisch ist.

Molekül-Energie:	😊 $E_{nl} = hf \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2} l(l + 1) + \text{const.}$	😊
------------------	--	---

3.5.8 Der 1s-Zustand des H-Atoms quantitativ

Das H-Atom ist punktsymmetrisch und man muss mit Polarkoordinaten arbeiten wie in der Geographie. Die Lösung hat dann die Form $\psi(r, \theta, \varphi)$. Sie lässt sich als Produktfunktion schreiben:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot B(\theta) \cdot L(\varphi)$$

In punktsymmetrischen Lösungen der s-Zustände spielen die geographische Breite θ und die Länge φ keine Rolle. Es gilt dann:

$$B(\theta) = 1 \quad \text{und} \quad L(\varphi) = 1$$

Wir müssen uns «nur» mit der radialen Zustandsfunktion $R(r)$ beschäftigen. Die Umrechnung von kartesischen Koordinaten in Kugelkoordinaten ist eine Aufgabe für die Hochschule. Wir schreiben $\psi(r)$. Die zugehörige Schrödinger-Gleichung sieht ziemlich anders aus als die Gleichung (4.1). Sie ergibt:

$$\left(\text{☹} \right) \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \psi''(r) - \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m r} \cdot \psi'(r) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \cdot \psi(r) + \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m r^2} l(l+1) \cdot \psi(r) = E \cdot \psi(r) \quad \left(\text{☹} \right)$$

Wir deuten an, dass die Gleichung den Wellenaspekt des Elektrons berücksichtigt. Aber auch die Masse m und die Ladung e des Elektrons tauchen auf, die beide auf den Teilchenaspekt weisen. Die Entfernung des Elektrons vom Kern, die Grösse r , ist die einzige Variable. Im Vergleich zu (4.1) und auch zu (***) ist die neue Gleichung mehrfach komplizierter:

(1) Die Variable r taucht im Nenner auf.

(2) Zusätzlich zur zweiten Ableitung taucht ein Summand mit der ersten Ableitung auf.

(3) Zusätzlich zum Potential, das hier durch die elektrische Kraft erzeugt wird, taucht ein merkwürdiges «Potential» mit einer neuen Variablen in der Form $l(l+1)$ auf.

Der Punkt (1) weist darauf hin, dass kompliziertere Lösungsfunktionen zu erwarten sind. Das Problem (2) ist bei der Umrechnung von kartesischen auf Kugelkoordinaten entstanden. Das zusätzliche «Potential» taucht im Zusammenhang mit dem Drehimpuls auf, wenn $l > 0$ ist. Während der Summand von der anziehenden elektrischen Kraft negativ zählt, erhält der von der Rotationsenergie herkommende Summand ein positives Vorzeichen. Da wir nur s-Zustände suchen, wo der Drehimpuls $l = 0$ ist, fällt der «störende» Term weg.

Nun schreiben wir x statt r und y anstatt $\psi(r)$, teilen die Gleichung durch x^2 und fassen die vielen Konstanten zu den folgenden Konstanten c_1 und c_2 zusammen:

$$c_1 = \frac{8\pi^2 m e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon} \quad \text{und} \quad c_2 = \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} E$$

Dann sieht alles wesentlich weniger fremdartig, vielleicht sogar mathematisch vertraut aus:

Schrödinger-Gleichung für das H-Atom ohne Drehimpuls: $y'' + \frac{2}{x}y' + \frac{c_1}{x}y + c_2y = 0$

Die Mathematiker haben alle Lösungen dieser Gleichung schon längst gefunden. Im Modul 2 wurde die einfachste dieser Lösungen, die Funktion $y_1(x) = C \cdot e^{-x/a}$, die den 1s-Zustand beschreibt, vorgestellt. Nun müssen wir nur rückwärts rechnen und überprüfen, ob unsere Lösung diese Gleichung auch erfüllt. Man braucht dazu die Produkt- und die Kettenregel und etwas Durchhaltevermögen. Im Verlaufe der Arbeit stellt man fest, dass $y_1(x)$ die Gleichung erfüllt und dass die Konstante C herausfällt.

Man erhält aber nicht sofort Werte für a und E , sondern folgende «gewöhnliche» Gleichung:

$$\left(\frac{1}{a^2} + c_2 \right) + \left(c_1 - \frac{2}{a} \right) \frac{1}{x} = 0$$

Da steht eine Gleichung für drei Unbekannte a und c_2 (inklusive der Grösse E) und x ! Das ist aber kein Problem, denn **diese Gleichung muss für alle x gültig sein.** 😊 Das kann sie nur,

$$\text{wenn die zweite Klammer} = 0 \text{ ist} \Leftrightarrow c_1 - 2/a = 0$$

$$\text{und auch die erste Klammer} = 0 \text{ ist.} \Leftrightarrow 1/a^2 + c_2 = 0$$

Damit haben wir zwei Gleichungen für nur noch zwei Unbekannte. Ihre Lösungen stimmen mit denen, die mit dem überholten Atommodell von Bohr berechnet wurden, überein:

Bohr-Radius:	$a = 2/c_1 = \epsilon \hbar^2 / \pi m e^2 = \mathbf{53 \text{ pm}}$	(3.6a)
--------------	---	--------

Das ist kein Bahnradius, sondern eine Kenngrösse für atomare Grössenordnungen. Ebenso erhält man:

Rydberg-Energie: $E_1 = (-1/a^2) \cdot \hbar^2 / 8\pi^2 m = -1/8 \cdot m e^4 / \epsilon^2 \hbar^2 = \mathbf{-13.6 \text{ eV}}$	(3.6b)
--	--------

3.6 Rotationen in der Quantenwelt

Etappe 6 Teil I: Zustände mit Drehimpuls und Spin.

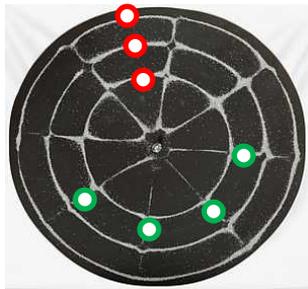
3.6.1 Angeregte Zustände, Knotenflächen, Quantenzahlen, Hybrid-Orbitale

Beim Alphorn, unserem akustischen Analogon zum Atom in 2.5.2, entsprechen die hohen Töne den angeregten Zuständen $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $3d$ usw. Eine gute Bläserin kann die 4. Oktave, also den 16. angeregten Zustand mit 15 Knotenpunkten zum Erklängen bringen. Zu höheren Zuständen gehören sowohl beim Alphorn als auch bei der zweidimensionalen Platte und beim Atom kürzere Wellen und höhere Energien. Es gibt aber physikalische und geometrische Unterschiede:



(1) Im Alphorn und bei der Platte gibt es einen Gleichgewichtszustand, die Ruhe. Im Atom ist wegen der UBR keine Ruhe erlaubt.

(2) Alphorn und schwingende Platte sind endlich, das Atom ist unendlich ausgedehnt.



(3) Die eindimensionalen Knotenpunkte werden im Zweidimensionalen zu Knoten-Kreislinien und Knoten-Geraden, und diese entwickeln sich im Dreidimensionalen zu Knotenkugeln und Knotenflächen.

Wie auf der schwingenden Platte beliebig viele Knotenkreise und Knotengeraden möglich sind, gibt es beim Atom viele Orbitale resp. Zustände:

DREI QUANTENZAHLEN CHARAKTERISIEREN DIE FORMEN DER ORBITALE:

(1) Die **Hauptquantenzahl n** bestimmt nicht nur die **Energie** des Zustands, sondern auch die Anzahl der Knotenflächen der möglichen Orbitale.

Im Grundzustand $n = 1$ gibt es 1 Knotenfläche. Es ist die Knotenkugel im Unendlichen: $1s$ -Zustand.

Im angeregten Zustand $n = 2$ gibt es 2 Knotenflächen:

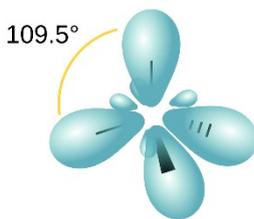
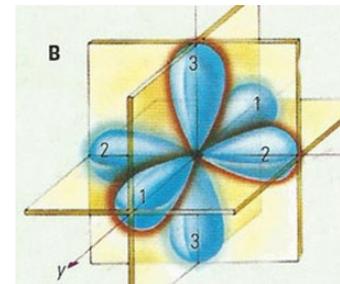
- $2s$ mit einer Knotenkugel im Unendlichen und der zweiten Knotenkugel bei $r = a$ wie in Figur 2.12.

- $2p_z$ mit Knotenkugel im Unendlichen und waagrechter Knotenebene.

- $2p_y$ mit Knotenkugel im Unendlichen und senkrechter Knotenebene.

- $2p_x$ mit Knotenkugel im Unendlichen und senkrechter Knotenebene.

Im angeregten Zustand $n = 3$ mit 3 Knotenflächen ist es komplizierter ...



Die Symmetrie ist oft wichtig. Sie wird von der Umgebung festgelegt. Bei einem einzelnen Atom ist sie beliebig. In einem Kristall müssen die Nachbarn berücksichtigt werden. Beispielsweise sind im Diamanten vier Nachbarn gleichberechtigt, weil es quantenmechanisch möglich ist, dass das $2s$ -Orbital und das $2p_z$ -Orbital und das $2p_y$ -Orbital und $2p_x$ -Orbital, die alle die gleiche Energie besitzen, sich zu einem sp^3 -Orbital zusammenfinden, in dem 4 Elektronen auch geometrisch gleichberechtigt sind.

Manchmal ist eine einzige Richtung im Raum besonders bedeutsam, etwa weil ein elektrisches oder magnetisches Feld in dieser Richtung wirkt. Dann sind l und m wichtige Quantenzahlen.

(2) Die **Nebenquantenzahl l** bestimmt die Anzahl Knotenebenen. Es gilt $0 < l < n$.

- Für alle s -Zustände ist $l = 0$, egal, ob der Grundzustand $1s$ oder angeregte Zustände wie $5s$.

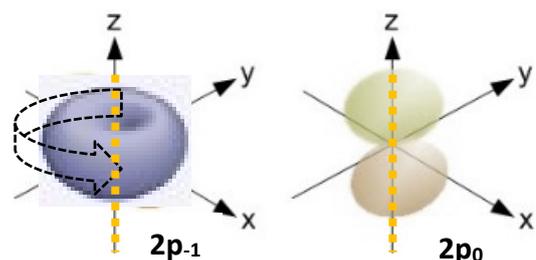
- Für alle p -Zustände ist $l = 1$, egal, ob $2p$ oder $3p$ oder $4p$.

- Für alle d -Zustände ist $l = 2$, egal, ob $3d$ oder $4d$ oder $5d$ usw. Ebenso für f -Zustände.

(3) Die **Magnetquantenzahl m** bestimmt die Knotenebenen durch die z -Achse. – $-l < m < +l$

- Beim $2p_0 = 2p_z$ -Zustand gibt es keine Knotenebene durch die z -Achse, sondern nur diejenige senkrecht dazu.

- Beim $2p_{-1}$ -Zustand und beim $2p_{+1}$ -Zustand handelt es sich um Überlagerungen des $2p_x$ -Zustands und des $2p_y$ -Zustands mit einer Knotenebene durch die z -Achse. Diese Quasi-Hybridorbitale haben mit Drehung, Drehimpuls und Magnetismus zu tun.

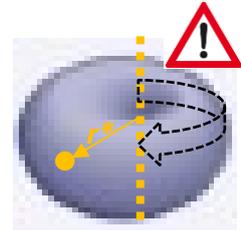


3.6.2 Nicht Drehbewegung, sondern Zustände mit Drehimpuls – Richtungsquantelung (Ergänzung)

Im Modul 2 haben wir betont, dass ein Atom *ohne* Rotation stabil sein kann. Nun müssen wir zugeben, dass ein Atom auch *mit* Rotation stabil sein kann. Allerdings muss uns bewusst bleiben, dass die Masse des Elektrons nicht die gleiche Rolle spielen kann, wie die Masse der Hände der Eiskunstläuferin: Elektronen sind als Quantenobjekte nicht auf einer Bahn, sondern in einem Zustand.



Wir haben bei den 2p-Orbitalen die z-Achse hervorgehoben. Könnten wir uns etwa den Drehimpuls beim 2p₊₁-Zustand wie nebenan gezeichnet vorstellen? Alle Massenteile rotieren mit der gleichen Winkelgeschwindigkeit um die z-Achse und alle Teil-Drehimpulse aufaddiert geben den gesamten Drehimpuls $L = r^*mv = k \cdot h/2\pi$, wie bei Bohrs erlaubten, stationären Bahnen in (2.1). Das m wäre die Gesamtmasse und das r^* wäre ein mittlerer Abstand, der mit ψ berechnet werden müsste.



Es gilt im 2p _{±1} -Zustand wirklich, wie die Anschauung nahelegt: $L_z = \pm h/2\pi$.		
Den allgemeinen Fall bestimmt die Magnetquantenzahl m :	$L_z = \pm m \cdot h/2\pi$	(3.7a)

Hier endet die Anschauung und die Dualität mit dem Teilchenaspekt im m und dem Wellenaspekt im mittleren Radius r^* . Es gilt nämlich für alle 2p-Zustände:

Es gilt für alle 2p-Zustände, was der Anschauung total widerspricht: $L^2 = -2 \cdot (h/2\pi)^2$		
Den allgemeinen Fall bestimmt die Nebenquantenzahl l :	$L^2 = l(l+1) \cdot (h/2\pi)^2$	(3.7b)

Experimentell kann man den Drehimpuls nicht direkt, sondern nur indirekt nachweisen. Mit der Masse muss auch die Ladung des Elektrons sich «bewegen» und in einem Zustand mit Drehimpuls einen Kreisstrom liefern. Dieser Kreisstrom entspricht nach Ampère einem Mini-Elektromagnetchen. Nach den Gesetzen der klassischen Physik stellt es sich in einem äusseren Magnetfeld, welches die z-Achse definiert, parallel, antiparallel oder quer ein. Die drei Orientierungen müssen zu unterschiedlichen Energien führen, was sich im Spektrum äussern sollte.

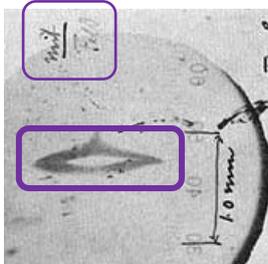


Otto Stern

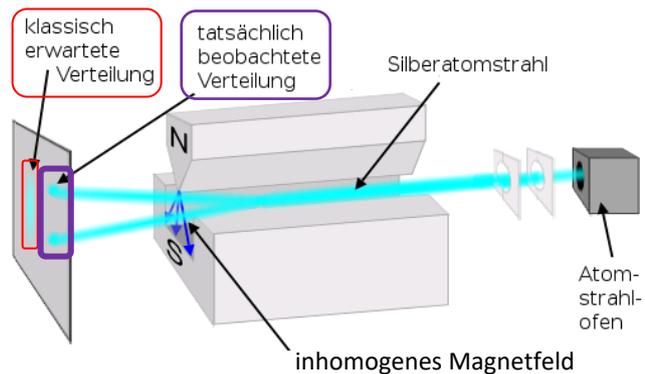
Zehn Jahre nach dem Üetlischwur (→ 2.1.4) führten Otto Stern (immer mit Zigarre im Labor) und Walter Gerlach mit einem Strahl von neutralen Silberatomen ein Experiment durch, das die Fachwelt überraschte. Es wurde zu einem

bisher nicht erwähnten Motiv für die Suche nach der besseren Mechanik, deren Ergebnisse zum Drehimpuls wir soeben zusammengefasst haben.

Nach der klassischen Physik müssten die Silberatome durch ihr magnetisches Moment beim Durchqueren eines inhomogenen Magnetfelds in dem Ausmass längs der z-Richtung des Magnetfelds abgelenkt werden, in dem die beiden Richtungen übereinstimmen. Im Bild ist ein Ausschnitt aus der Postkarte von Gerlach an Bohr mit dem winzigen Effekt (etwa 0.1 mm), der von der Quantenmechanik verursacht wird. Auf dem etwa 20-fach vergrösserten Foto des Experimentes «mit Feld» zeigt sich eine Aufspaltung des Strahls in zwei Teile mit einer Lücke. Das heisst, es gibt genau zwei Ausrichtungen des Drehimpulses und nichts dazwischen.



Erst ab 1925 konnten die Theoretiker mit der Quantenmechanik des Drehimpulses verstehen.

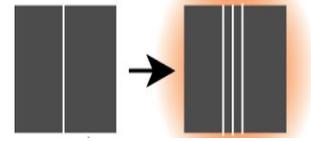


Das Experiment von Stern und Gerlach zeigt:	Die Ausrichtung des Drehimpulses ist gequantelt .
---	---

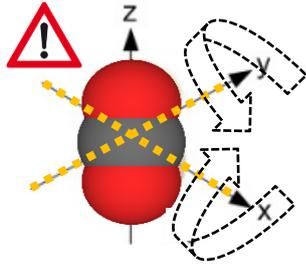
3.6.3 Der normale Zeeman-Effekt und rotierende Moleküle

(Ergänzung)

Die Frage, was geschieht, wenn man Atome in ein Magnetfeld steckt, wurde schon aufgeworfen, bevor die Quanten das Licht der Welt erblickten. Hendrik Antoon Lorentz berechnete, dass die Spektrallinien dreifach aufgespalten werden sollten. 1896 konnte Pieter Zeeman diesen Effekt, den man bald als «normalen Zeeman-Effekt» bezeichnete, bestätigen. Für Elektronen im 3d-Zustand ergibt sich eine Aufspaltung in fünf Linien mit den Quantenzahlen $m = -2, -1, 0, +1, +2$. Elektronen im 4f-Zustand liefern sieben Linien: $m = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$. Dies konnte man schon halb-quantenphysikalisch mit magnetischen Zusatzenergien zu ellipsenförmig erweiterten Bohr-Bahnen erklären.



Für die folgende Betrachtung ist es eine gute Näherung, wenn wir annehmen, die Moleküle seien so starr, wie die Modelle im Chemie-Bausatz. Diese Näherung liefert die Energieniveaus der Rotation, zusammen mit der Schwingung die Grundlage für die Absorption von CO₂ im Infrarot, also für den Treibhauseffekt.



Die Rotation um die z-Achse spielt bei normalen Temperaturen keine Rolle. Für die Rotationen um die x- oder die y-Achse kann man die Energie analog zur kinetischen Energie ausrechnen. Die Grösse $J = mr^{*2}$ heisst Trägheitsmoment (mit dem mittleren Abstand r^*). Die Eiskunstläuferin hat ein grosses J , wenn sie ihre Arme ausstreckt, und umgekehrt. Es gilt:

$$E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \text{und analog} \quad E_{rot} = \frac{1}{2}J\omega^2 = \frac{L^2}{2J}$$

Bei der Berechnung der Energien mit L^2 erhielt man vor 1926 mit der semiklassischen Quantenphysik $L^2 = \mathbf{l}^2 \cdot (h/2\pi)^2$ die falschen ΔE . Erst die QM-Formel $L^2 = \mathbf{l}(l+1) \cdot (h/2\pi)^2$ erklärte die Messwerte ΔE :

QM: Mit den Werten $l = 0, 1, 2$ und 3 , erhalten wir:

$$E_l = 0E, 2E, 6E, 12E \text{ usw.}$$

halb-quantenphysikalisch erwartet man:

$$E_l = 0E, 1E, 4E, 9E \text{ usw.}$$

Für die Übergänge zwischen diesen Termen sagt die QM:

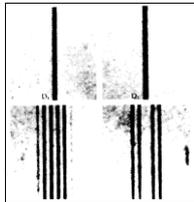
$$\Delta E = 2E, 4E, 6E \text{ usw. wie im Experiment}$$

halb-quantenphysikalisch erwartet man:

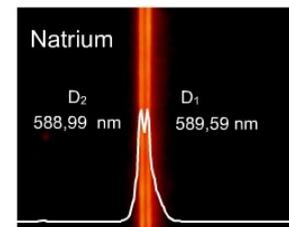
$$\Delta E = 1E, 3E, 5E \text{ usw. falsch}$$

3.6.4 Der anomale Zeeman-Effekt und die Entdeckung des Elektronen-Spins

Schon 1898 hatte man entdeckt, dass sich gewisse Spektrallinien im Magnetfeld nicht in drei, sondern in zwei, vier oder eine andere gerade Anzahl aufspalten: das bezeichnete man als «anomalen Zeeman-Effekt». Er passte nicht ins Schema, schien anomal.



Dass die orange Linie der Na-Lampen auch ohne äusseres Magnetfeld aus zwei sehr nahen Linien besteht, wusste man schon lange. Heute ist bekannt, dass der 3p-Zustand selbst das Magnetfeld für die Energieaufspaltung erzeugt.



Verschiedene Physiker bearbeiteten das Problem *dieser klassisch nicht beschreibbaren Zweideutigkeit des Valenzelektrons*, wie Wolfgang Pauli schrieb.

Als er 1923 in Kopenhagen von einem Kollegen nach dem Grund seiner Sorgenfalten gefragt wurde, antwortete er: *Wie kann man glücklich sein, wenn man über den anomalen Zeeman-Effekt nachdenkt?* Pauli war sehr nahe am Elektronen-Spin. Er erfand zur Beschreibung des anomalen Zeeman-Effekts *eine vierte Quantenzahl*. Heute heisst sie Spin-Quantenzahl. Sie kann nur die zwei Werte «up» und «down», \uparrow oder \downarrow , annehmen.

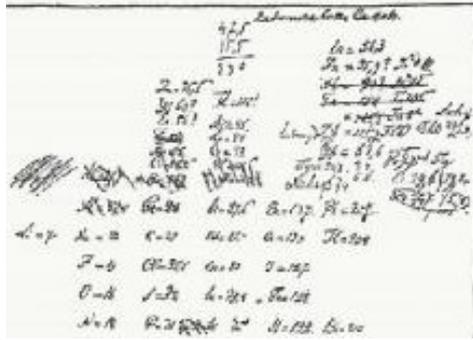
Den Schritt zum Elektronenspin, der Eigendrehung des Elektrons, wagten die zwei noch jüngeren holländischen Physiker Samuel Goudsmit, der bei Ehrenfest doktorierte, und George Uhlenbeck, Ehrenfests Assistent. Auf dem späteren Foto aus Leyden stehen sie links und rechts von Hendrik Kramers. Pauli hatte Kramers noch von der Publikation einer Spin-Idee abgehalten. 1925 sagte Ehrenfest zu Goudsmit: «Der Spin könnte schon falsch sein, aber Du hast bis jetzt noch keinen Ruf, also hast Du nichts zu verlieren, wenn Du es publizierst.» und er riet, Uhlenbeck zuerst zu nennen, sonst ginge der vergessen.



Niemand hat für die Entdeckung des Spins jemals einen Nobelpreis erhalten!

3.6.5 Mit Quantenmechanik und dem Pauli-Prinzip das Periodensystem erklären.

Die Entwicklung des periodischen Systems der Elemente war eine geniale Detektivarbeit in der



gigantischen Fülle der chemischen Stoffe und Erscheinungen. Lothar Meyer und Dimitri Mendelejew hatten sie schon 1869, lange vor dem Quantenzeitalter, weitgehend abgeschlossen. Die Physik führte mit der Radioaktivität neue Elemente hinzu. Nach der Entdeckung Rutherfords wurde klar, dass das Geschehen in der Elektronenhülle für die chemischen Phänomene entscheidend war. Doch mit Bohrs Atommodell konnte wenig erklärt werden. Zwar erklärte Henry Moseley mit Röntgenspektren bald, wie die vielen seltenen Erden, die chemisch schwer zu unterscheiden sind,

die Plätze 57 bis 71 im Periodensystem einnehmen müssen. Doch die Dissertation von Wolfgang Pauli zeigte, dass man mit der halbklassischen Quantenphysik von Bohr nicht einmal das einfachste Molekül, das H_2^+ -Ion erklären konnte.

Es brauchte viel Neues in der Physik, bis sie in die Lage kam, die empirische gewonnen Gesetze der Chemie auf eine allgemeine Basis zu stellen: Wieso gibt es einerseits die stark reagierenden Metalle Li, Na, K, Rb, Cs und andererseits die nicht reagierenden Gase He, Ne, Ar, Kr, Xe? Vom inerten Helium führt nur ein Elektron mehr zum reaktiven Lithium, das in Akkus gefährliche Brände auslösen kann! Wie kann man die «Oktett-Regel» (8 Elektronen im energetisch gleichen Zustand, in der gleichen «Schale», sind besonders stabil.) von Gilbert Lewis und Irvin Langmuir ableiten?



Die Massen und elektrischen Ladungen, die Grössen und Drehimpulse der Atome waren für die Physiker immer bedeutsam. Doch erst die Formulierung der Quantenmechanik und die Entdeckung des Spin machten Antworten auf viele chemische Fragen möglich:

1925, noch bevor Uhlenbeck und Goudsmit den Spin publizierten und lange bevor Schrödinger seine ψ -Wellen erfand, postulierte Wolfgang Pauli aufgrund von verwickelten Überlegungen zu gewissen Spektralgesetzen das Ausschlussprinzip:

Pauli-Prinzip: Es dürfen höchstens zwei Elektronen im gleichen Quanten-Zustand ψ sein.

Erst 1945 erhielt er den Nobelpreis *for the discovery of the Exclusion Principle, also called the Pauli Principle*. Das Pauli-Prinzip setzte einerseits eine physikinterne Entwicklung in Gang. Heisenberg schrieb 1926: *Wir denken uns entsprechend der Compton-Uhlenbeck-Goudsmitischen Hypothese die Elektronen als kleine magnetische Kreisel, denen wir eine bestimmte Achsenrichtung zuschreiben wollen (...)*. Andererseits ermöglichte es, das Periodensystem zu verstehen:

- Im Grundzustand des H-Atoms ist das eine Elektron gemäss der Quantenmechanik in einem $1s$ -Zustand. Man spricht von der Elektronenkonfiguration $1s^1$.
- Im Grundzustand des He-Atom sind beide Elektronen in einem $1s$ -Zustand. Wegen der doppelten Kernladung ist dieser beim He nur etwa halb so gross wie beim H. Die beiden Spins sind entgegengesetzt. Die Elektronenkonfiguration lautet $1s^2$. Genaueres zum Helium in → 3.5.6.
- Im Grundzustand des Li-Atom sind wegen des Pauli-Prinzips nur 2 Elektronen im $1s$ -Orbital. Das dritte Elektron dort keinen Platz und muss in das viel grössere $2s$ -Orbital. Es ist dort nur schwach gebunden, da die beiden $1s$ -Elektronen $2/3$ der Kernladung abschirmen. Die Reaktivität des Li ist auf das schwach gebundene dritte Elektron in der Elektronenkonfiguration zurückzuführen: $1s^2 2s^1$.
- Im Grundzustand füllen die Elemente der 1. Periode zuerst das $2s$ - und dann das $2p$ -Orbital. Die Elektronenkonfiguration des letzten Elements dort, des Neons, lautet: $1s^2 2s^2 2p^6$.
- Das Pauli-Prinzip erklärt auch den Sprung vom Ne zum Na, denn die 3 unterschiedlichen $2p$ -Orbitale (p_{+1} , p_0 , p_{-1} resp. p_x , p_y , p_z → 3.4.1) sind voll. Die Elektronenkonfiguration des Na lautet: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.

Abgesehen von Ausnahmen (z. B. Cer $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^1 5d^1 6s^2$) geht es so weiter. Die Oktett-Regel ergibt sich aus den $s^2 p^6$ -Zahlen auf verschiedenen Energiestufen («Schalen»).

3.6.6 Mit Quantenphysik ins Körperinnere blicken

(Ergänzung)

Abstrakt geht es darum, durch Wechselwirkung von Strahlung mit der Materie des Körpers Information über diese Materie zu gewinnen. Konkret geht das auf viele Arten.



Wilhelm Conrad Röntgen erkannte die Möglichkeiten seiner «X-Strahlen» schon 1895. Knapp 20 Jahre später wurde der Wellenaspekt von 100 keV-Röntgen-Lichtquanten nachgewiesen. Heute ist das Filmmaterial durch einen Speicherchip ersetzt, und die feststehende Apparatur hat sich zum CT, dem Computer-Tomographen entwickelt. Die rotierende Quelle strahlt aus verschiedenen Richtungen, und der Computer verarbeitet die viele Daten zu einem 3D-Bild, das anschliessend scheinbar betrachten werden kann (griechisch: tomos = Messer). Allerdings wirkt die Röntgenstrahlung auch in diesem Gerät ionisierend und damit grundsätzlich schädlich. Zudem erzeugen verschiedene weiche Gewebe nicht sehr unterschiedliche Schattierungen. Gesucht ist eine Strahlung, die Information möglichst über die verschiedenen Weichteile im Körperinnern liefert, aber keine ionisierende Wirkung hat.



Die Geschichte des MRI (magnetic resonance imaging) beginnt mit dem jungen Isidor Rabi, der 1927 aus den USA nach Zürich kommt, um bei Schrödinger Quantenphysik zu studieren. Nach Umwegen stösst er auf die magnetische Wirkung des Wasserstoffs. Zurück an der Columbia-University untersucht er die magnetischen Momente von Atomkernen, die auch quantisiert sind. In einem äusseren Magnetfeld richtet sich das Proton parallel oder antiparallel aus, was mit einer Energieänderung ΔE verbunden ist: je stärker das Magnetfeld, umso grösser ΔE . Im modernen MRI benötigt man einen so starken Magneten, dass er mit supraleitenden Drähten betrieben werden muss. Das Prinzip des MRI, das wir in der Einleitung zu Modul 1 skizziert haben, basiert auf dem der NMR (nuclear magnetic resonance), die Rabi im Physiklabor entdeckt hat. Im Detail ist es



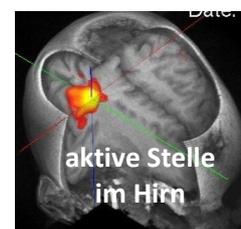
aber kompliziert:

Dem starken Magnetfeld werden wechselnde Zusatzfelder überlagert, so dass – unerlaubt anschaulich gesprochen – das Kernmagnetchen zum Kreiseln kommt. Dann überlässt man es sich selbst. Es strahlt Energie ab, kommt zum Stillstand und wird erneut angeregt mit Strahlung der Frequenz f , die der Bedingung $hf = \Delta E_{\text{magnetisch}}$ erfüllt. Weil f im Radiobereich ist, ist die Strahlung ungefährlich. Die abgestrahlte Energie wird aufgefangen und mit sehr viel Computing-Aufwand so schnell zum 3D-Bild verarbeitet, dass man heute einem Herzen in Echtzeit beim Pumpen zuschauen kann.

Die wechselnden Zusatzfelder verursachen das starke Rattern beim MRI. Sie sind nötig, damit man eine räumliche Auflösung erreicht. Weil an verschiedenen Orten das Magnetfeld unterschiedlich stark ist, ist es auch das f , das man aufhängt. Zusätzlich hängt die Zeit, in der das Magnetchen zum Stillstand kommt, die sogenannte Relaxationszeit, von seiner Umgebung ab. Ein H-Atom im Wassermolekül und ein H-Atom in einem Eiweissmolekül besitzen unterschiedliche Relaxationszeiten. Damit kann man aus den Relaxationszeiten auf die Gewebeart schliessen, aus der das Signal kommt.



Richard Ernst und Kurt Wüthrich von der ETH erhielten Nobelpreise für ihre Beiträge zu diesen Erkenntnissen. Die Relaxationszeit kann man mit der Halbwertszeit beim radioaktiven Zerfall vergleichen, der im Kapitel → 3.2.3 thematisiert wurde. Heute gelingt es mit funktioneller MRI, Orte mit erhöhter Gehirnaktivität zu erkennen und dem Gehirn «Beim Arbeiten zuschauen». Dabei benützt man die unterschiedlichen magnetischen Eigenschaften von Blut mit und ohne Sauerstoff.



3.6.7 Der Spin als Variable in der Zustandsfunktion

(Ergänzung)

Die Zustandsfunktion für ein Quantenobjekt, das sich im gewöhnlichen Raum bewegen kann, das drei Freiheitsgrade hat, wie der Fachausdruck lautet, ist eine Funktion von drei Variablen: $\psi(x,y,z)$. Wenn eine Punktsymmetrie vorliegt, wie beim Atom, ist es zweckmässig, die Kugelkoordinaten zu benutzen. Kugelkoordinaten werden auch in der Geographie benutzt: geographische Länge = φ und geographische Breite = ϑ . Die räumliche Zustandsfunktion für das H-Atom hat die Form $\psi(r,\varphi,\vartheta)$. Die Variablen sind Teilmengen aus der Menge der reellen Zahlen: $r > 0$; $0 < \varphi < 2\pi$; $-\pi/2 < \vartheta < +\pi/2$. Die Winkelvariable φ ist eng mit dem Drehimpuls eines Zustands verknüpft. Es gibt sogar eine Unbestimmtheitsrelation, die den Winkel und den Drehimpuls verbindet.

Der in 3.4.5 erwähnte Spin ist nicht nur ein **zusätzlicher Freiheitsgrad**, sondern auch eine spezielle Variable. Diese Variable kann nur zwei Werte einnehmen, nicht die Werte eines ganzen Intervalls der reellen Zahlen, wie die geometrischen Variablen. Trotzdem und zusätzlich besitzt der Spin eine Richtung im Raum, ähnlich wie der Drehimpuls: $\chi(\text{up}) = \uparrow$ oder $\chi(\text{down}) = \downarrow$. Die Funktion χ besitzt also besondere Eigenschaften. Sie ist beispielsweise nicht stetig.

Der nur mit relativistischer Quantenphysik erklärbarer Spin besitzt beim Elektron zwei Einstellmöglichkeiten \uparrow oder \downarrow . Der Elektronenspin steht am Grund des Pauli-Prinzips.

Soll die Zustandsfunktion für ein Atom auch den Spin erfassen, kann sie als Produkt einer Raumbfunktion und einer Spinfunktion geschrieben werden: $\Psi = \psi(r,\varphi,\vartheta) \cdot \chi(s)$. Wolfgang Pauli hat 1927 den Spin konkret mit 2×2 Matrizen beschrieben. Sie passen zur Matrizenform der Quantenmechanik, die Heisenberg 1925 eingeführt hat.

1927 wurde der Spin der Protonen entdeckt, und als man 1932 das Neutron fand, zeigte es sich, dass auch dieses einen solchen Spin besass. Wegen des Vektorcharakters addieren sich beispielsweise die 4 Spins der 4 Nukleonen im Helium-Atomkern zu null.

Später realisierte man, dass es auch Quantenobjekte mit Spin 0 oder 1 gibt. Quantenobjekte, die den Spin $\frac{1}{2}$ besitzen wie das Elektron, nennt man **Fermionen**, weil Fermi unter anderem die vielen quasi freien Elektronen in einem Metall untersucht hat. Quantenobjekte mit Spin 0, wie das Photon, nennt man **Bosonen**. Wenn mehrere Bosonen oder Fermionen zusammenwirken, verhalten sie sich unterschiedlich, wie \rightarrow 3.5.4 dargelegt wird.

Enrico Fermi (\rightarrow PANORAMA 1950) war als junger Forscher in Leyden, als dort der Spin entdeckt wurde. Später forschte in Rom am Neutron. Er erhielt 1938 den Nobelpreis *for his demonstrations of the existence of new radioactive elements produced by neutron irradiation, and for his related discovery of nuclear reactions brought about by slow neutrons*. Er flüchtete mit seiner Frau Laura vor Mussolini direkt von Stockholm in die USA. Dort arbeitete er im Manhattan-Projekt und leitete den Bau des ersten Kernreaktors in Chicago. Dieser erzeugte 1942 erstmals Wärme und spaltbares Plutonium-239. «Fermi-Probleme» sind überraschende Aufgabenstellungen, die sich im Kopf überschlagsmässig lösen lassen. Das klassische Beispiel lautet: Wie viele Klavierstimmer gibt es in Chicago?



AKTIVITÄTEN ZU 3.6

AUFGABEN:

3.11) Ein Blick in die Nobel-Lecture von David Ketterle über Bose-Einstein-Kondensation

3.16) Fehler bei der Darstellung des Treibhauseffekts

BIOGRAPHIEN:

Lucy Mensing

Enrico Fermi

3.7 Mehrere Quantenobjekte – etwas Quantenstatistik

Etappe 6 Teil II: Ununterscheidbarkeit und ihre Konsequenzen

3.7.1 Quantenphysik verstehen, ohne viel zu rechnen. – Was heisst überhaupt «verstehen»?

Schon Galilei sagte, das Buch der Natur sei in der Sprache der Mathematik geschrieben. Ebenso stark gewichtete Werner Heisenberg 1973 in seinem Buch *Schritte über Grenzen* (S. 237) die Rolle der Mathematik: *Denn die kleinsten Einheiten der Materie sind tatsächlich nicht physikalische Objekte im gewöhnlichen Sinne des Wortes; sie sind Formen, Strukturen, oder im Sinne Platons, Ideen, über die man unzweideutig nur in der Sprache der Mathematik reden kann.* Dass mangelnde Mathematik physikalischen Fortschritt behindert, hat Schrödinger 1926 vor seinem grossen Wurf ausgedrückt: *Wenn ich nur mehr Mathematik könnte!* Doch dann gelang ihm in der Artikelserie *Quantisierung als Eigenwertproblem*, eine neue Grundlage für die Quantenmechanik in Form einer Differentialgleichung zu formulieren: Als Einstein sie kennenlernte, schrieb er Schrödinger: *Der Gedanke Ihrer Arbeit zeugt von ächter Genialität.* – Können wir nichts von der Natur verstehen, wenn wir «nicht-genial» sind und die Mathematik der Differentialgleichungen nicht beherrschen?

Ebenso wie bei der scheinbaren Welle-Teilchen-Paradoxie liefert Feynman auch hier einen Schlüssel. Im Zusammenhang mit der QED schrieb er einem Kollegen: *What do I mean by understanding? Nothing deep or accurate – just to be able to see some of the qualitative consequences of the equations by some method other than solving them in detail.* Genau das versuchen wir auch: Einige qualitative Konsequenzen aus den Naturgesetzen herauszulesen, ohne die Gleichungen im Detail zu lösen.

3.7.2 Die spinnen, die Quantenobjekte: Kollektivisten und Individualisten.

Sobald zwei oder mehrere oder viele (10^{23}) Quantenobjekte der gleichen Sorte zusammenwirken, ist ihr statistisches Verhalten von Bedeutung und setzt Zusatzforderungen an die Lösungen von (3.4). Beispiele sind das He-Atom und das H_2 -Molekül. In Biomolekülen wirken eine grosse Anzahl von Elektronen zusammen, noch grösser ist die Anzahl Leitungselektronen in einem Cu-Draht oder die der Photonen im Laserresonator. Enrico Fermi (\rightarrow 3.5.3) und Paul Adrien Dirac haben die Statistik von Elektronen und ihresgleichen, der Bauteile der Materie, formuliert.



P. A. Dirac

Der Inder Satyendranath Bose und Albert Einstein haben die alternative Statistik für Lichtquanten, Gluonen, Higgs-Bosonen, Gravitonen und andere «Klebetilchen» im Universum gefunden. Das statistische Verhalten von Quantenobjekten hängt von ihrem Spin (ganzzahlig oder halbzahlig) ab und ist in beiden Fällen **radikal anders** als das von klassischen Objekten:



S. Bose

QUANTENOBJEKTE BESITZEN IM GEGENSATZ ZU KLASSISCHEN OBJEKTEN KEINE INDIVIDUALITÄT.

Dass Quantenobjekte ununterscheidbar sein sollen, steht in starkem Widerspruch zu unseren Vorstellungen. Ununterscheidbarkeit spielte erstmals bei Max Plancks Untersuchung der Wärmestrahlung eine Rolle. Später haben Einstein und andere Physiker diesen Wesenszug der Quantenobjekte, der ebenso irritierend ist wie die Dualität, weiter untersucht. Erwin Schrödinger schrieb dazu um 1950: *Manche älteren Philosophen würden, wenn ihnen der Fall [der Quantenobjekte, HPD] vorgelegt werden könnte, sagen: eure neumodischen Atome bestehen überhaupt aus keinem Stoff, sie sind reine Form.*

Schrödinger erläutert den Sachverhalt mit zwei Quantenobjekten, die auf drei Zustände zu verteilen sind, durch zwei Preise, die drei Preisträger:innen Anna, Beat und Chris zugesprochen werden. Die verschiedenen Statistiken werden durch verschiedene Preistypen repräsentiert: Klassische Objekte entsprechen unterscheidbaren Gold- und Silbermedaillen, Bosonen entsprechen ununterscheidbaren Medaillen aus irgendeinem Material und Fermionen entsprechen ununterscheidbaren Mitspielplätzen in einem Olympiateam.

(1) Die «gewöhnliche» oder klassische oder Boltzmann-Statistik

Auf welche Arten kann man 2 «gewöhnliche», unterscheidbare, klassische Objekte G und S an 3 Orten A, B, C unterbringen, respektive sie auf drei Zustände verteilen? – Im Schema unten wird deutlich, dass das auf 9 verschiedene Arten erfolgen kann.

Anna			G	S	G	S			GS	Grundzustand	2 klassische Teilchen
Beat	G	S			S	G		GS		1. angeregter Zustand	G = Goldmedaille 
Chris	S	G	S	G			GS			2. angeregter Zustand	S = Silbermedaille 

Die Boltzmann-Statistik gilt beispielsweise für die Verteilung von Stickstoffmolekülen auf verschiedene Energieniveaus eines Gases. Sie wird hier veranschaulicht durch 2 **unterscheidbare** Medaillen, eine aus Gold G, eine aus Silber S. – Es gibt 3^2 Verteilmöglichkeiten: Die Goldmedaille an A, B oder an C *und* je die Silbermedaille wiederum an A, B oder an C.

(2) Die Bose-Einstein-Statistik für Quantenobjekte mit ganzem Spin ⇔ **kollektivistische Bosonen**

Auf welche Arten kann man 2 **ununterscheidbare** Medaillen B1 und B2 (= Quantenobjekte) an 3 Orten unterbringen, wenn sie vom «geselligen Typus» sind, sich also **im gleichen Zustand** vertragen? Es gibt 6 Möglichkeiten: 3 «gerechte» mit zwei Sieger:innen *oder* 3 «ungerechte» Möglichkeiten mit einem Doppelsieg ⇔ gar nicht oder einfach oder doppelt besetzt. ⇔ Unbegrenzt viele Bosonen können den gleichen quantenphysikalischen Zustand einnehmen.

Anna			B1		B1			B1B2	Grundzustand	2 gesellige Q.objekte
Beat		B1			B2		B1B2		1. angeregter Zustand	B = eine Medaille
Chris		B2		B2			B1B2		2. angeregter Zustand	2 zum Verteilen 

Die Bose-Einstein-Statistik gilt beispielsweise für die vielen Photonen, die einen kohärenten Laser-Wellenzug bilden. Sie gilt auch für die vielen Cooper-Paare (aus 2 Elektronen mit entgegengesetztem Spin und Totalspin 0), welche die Supraleitung für die MRI-Elektromagnete ermöglichen.

(3) Die Fermi-Dirac-Statistik für Quantenobjekte mit halbem Spin ⇔ **individualistische Fermionen**

Auf welche Arten kann man 2 **ununterscheidbare** Quantenobjekte an 3 Orten unterbringen, wenn sie vom «individualistischen Typus» sind, sich also **nicht im gleichen Zustand** vertragen? Wir veranschaulichen solche Quantenobjekte durch 2 nicht unterscheidbare, **identische Mitspielfläche** F1 und F2, in einem bestimmten Spiel mitzuspielen.

Anna			F1		F1				Grundzustand	2 individualist. Quantenobj.
Beat	F1				F2				1. angeregter Zustand	F = Platz im Spiel
Chris	F2		F2						2. angeregter Zustand	2 Stück zum Verteilen 

Die Fermi-Dirac-Statistik gilt häufig. Sie gilt für Elektronen in Atomen, Molekülen und Kristallen, für Neutronen in Atomkernen und in Neutronensternen: Der Individualismus sorgt für eine minimale Grösse von Atomkernen, Atomhüllen, Neutronensternen usw. trotz Anziehungskräften.

Die Fermi-Dirac-Statistik ist die Grundlage des **Pauli-Ausschluss-Prinzips**. Wolfgang Pauli postulierte es 1925 als eine «quantenmechanische Zweideutigkeit» des Elektrons, dies noch bevor Uhlenbeck und Goudsmit die Spin-Idee veröffentlichten. Wenn man die Spin-Quantenzahl nicht berücksichtigt, gilt:

Pauli-Prinzip: Es dürfen höchstens zwei Elektronen im gleichen Quanten-Zustand ψ sein.

3.7.3 Mehrere klassische Teilchen, Bosonen oder Fermionen im Potentialtopf (Ergänzung)

Wir betrachten nun konkrete Anwendungen der Schrödinger-Gleichung (3.4) gemäss 3.5.3 und der abstrakten Darlegungen zu den beiden Sorten von Quantenobjekten im Abschnitt 3.5.4. Wir nehmen natürlich nur den einfachsten Fall mit je nur 2 Quantenobjekten. In den Abschnitten (1) und (2) werden Vorbereitungsarbeiten erledigt.

(1) **Ein Quantenobjekt allein** im Potentialtopf. Noch spielt es keine Rolle, ob es ein Boson oder ein Fermion ist. Wir betrachten die Zustandsfunktion für den Grundzustand in der Schreibweise von 3.5.2:

$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right)$ und setzen diese Funktion zur Kontrolle ein in die Schrödingergleichung (3.4):

$$\frac{d}{dx}\psi_1(x) = \frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right)\right] = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \frac{d}{dx}\left[\cos\left(\frac{\pi x}{b}\right)\right] = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \frac{\pi}{b} \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{b}\right)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \psi_1(x) \right) = \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \frac{\pi}{b} \cdot \sin \left(\frac{\pi x}{b} \right) \right) = -\sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \frac{\pi}{b} \cdot \frac{\pi}{b} \cdot \cos \left(\frac{\pi x}{b} \right) = -\frac{\pi^2}{b^2} \cdot \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos \left(\frac{\pi x}{b} \right) = -\frac{\pi^2}{b^2} \cdot \psi_1(x)$$

Hier können wir beruhigt feststellen, dass unsere Zustandsfunktion die Schrödinger-Gleichung erfüllt, die im Inneren des Potentialtopfs keine potentielle Energie aufweist: Man dividiert sie durch $\psi_1(x)$.

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \psi_1(x) \right) = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \left(-\frac{\pi^2}{b^2} \right) \cdot \psi_1(x) = E_1 \cdot \psi_1(x)$$

und erhält nach dem Kürzen für die Energie des Grundzustands wie in → 2.7: $E_1 = \frac{\hbar^2}{8b^2 m}$

(2) Schrödinger-Gleichung für **zwei Quantenobjekte** und Ableitungen bei **zwei Variablen**:

Wir müssen die Orte der beiden Objekte folgendermassen durch zwei Koordinaten kennzeichnen:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) + \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] \psi(x_1, x_2) + E_{pot}(x_1, x_2) \cdot \psi(x_1, x_2) = E \cdot \psi(x_1, x_2) \quad (3.4+)$$

$$\text{ohne potentielle Energie: } -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) + \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] \psi(x_1, x_2) = E \cdot \psi(x_1, x_2) \quad (3.4\$)$$

Mathematisch ist zu beachten, dass beim Ableiten nach x_1 die Variable x_2 als konstanter Parameter zu behandeln ist und umgekehrt beim Ableiten nach x_2 die Variable x_1 ein konstanter Parameter ist.

Wir illustrieren (3.4\$) an folgender Beispielfunktion:

$$\begin{aligned} \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) + \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] \psi(x_1, x_2) &= \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) + \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] a \cdot \cos(bx_1) \cdot \cos(cx_2) = \\ a \cdot \cos(cx_2) \cdot \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) \right] \cos(bx_1) &+ a \cdot \cos(bx_1) \cdot \left[\frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] \cos(cx_2) = \\ a \cdot \cos(cx_2) \cdot [-b^2] \cos(bx_1) &+ a \cdot \cos(bx_1) \cdot [-c^2] \cos(cx_2) = \\ &= -ab^2 c^2 \cos(bx_1) \cdot \cos(cx_2) = -b^2 c^2 \cdot \psi(x_1, x_2) \end{aligned}$$

(3) **Zwei Bosonen** mit den Koordinaten (x_1, x_2) im Potentialtopf. Konkretes Beispiel zwei He-4-Atome ohne Wechselwirkung zwischen zwei Spiegeln im Abstand b .

Die Zustandsfunktion für ein System aus Bosonen muss nicht nur die Schrödinger-Gleichung, sondern auch noch folgende Symmetrie-Bedingung erfüllen:

Die Zustandsfunktion für Bosonen ist symmetrisch gegen Vertauschung der Quantenobjekte:

Das bedeutet für zwei Bosonen: $\Psi_B(x_1, x_2) = +\Psi_B(x_2, x_1)$

Die Zustandsfunktion Ψ_B ist mit Einzelboson-Zuständen folgendermassen realisierbar:

$$\Psi_B(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2) + \psi_1(x_2) \cdot \psi_2(x_1) = +[\psi_1(x_2) \cdot \psi_2(x_1) + \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2)] \quad (3.5a)$$

Wir setzen den bekannten Grundzustand $\psi_{Gr}(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos \left(\frac{\pi x}{b} \right) = C \cdot \cos \left(\frac{\pi x}{b} \right)$ in (3.5a) ein:

$$\Psi_{BGr}(x_1, x_2) = C \cos \left(\frac{\pi x_1}{b} \right) \cdot C \cos \left(\frac{\pi x_2}{b} \right) + C \cos \left(\frac{\pi x_2}{b} \right) \cdot C \cos \left(\frac{\pi x_1}{b} \right) = 2C^2 \cdot \cos \left(\frac{\pi x_1}{b} \right) \cdot C \cos \left(\frac{\pi x_2}{b} \right).$$

Wir wissen, dass mehrere Bosonen im gleichen Zustand sein dürfen. Wir überprüfen nun (3.4**)

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \cdot \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) + \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] 2C^2 \cdot \cos \left(\frac{\pi x_1}{b} \right) \cdot \cos \left(\frac{\pi x_2}{b} \right) = E \cdot 2C^2 \cdot \cos \left(\frac{\pi x_1}{b} \right) \cdot \cos \left(\frac{\pi x_2}{b} \right)$$

Die Rechnung verläuft so, wie im Abschnitt (2) durchgeführt worden ist. Die Funktion steht auf beiden Seiten der Gleichung und lässt sich wegdividieren. Aus den Ableitungen entstehen das Minus-Zeichen sowie die Faktoren $\left(\frac{\pi}{b} \right)^2$ und $\left(\frac{\pi}{b} \right)^2$ also wird im Grundzustand von zwei Bosonen: $E_{BGr} = 2 \frac{\hbar^2}{8b^2 m} = 2E_1$

Das ist, was der «gesunde Menschenverstand» erwartet: Zwei Bosonen liefern die doppelte Energie. Es gibt zudem angeregte Zustände mit höheren Energien, und: Ruhe ist unmöglich. 😊

(4) **Zwei Fermionen** mit den Koordinaten (x_1, x_2) im Potentialtopf. Konkretes Beispiel zwei He-3-Atome ohne Wechselwirkung zwischen zwei Spiegeln im Abstand b .

Die Zustandsfunktion für ein System aus Fermionen muss nicht nur die Schrödinger-Gleichung, sondern auch noch folgende Antisymmetrie-Bedingung erfüllen:

Die Zustandsfunktion für Fermionen ist antisymmetrisch gegen Vertauschung der Q.objekte:Das bedeutet für zwei Fermionen: $\Psi_F(x_1, x_2) = -\Psi_F(x_2, x_1)$ Die Zustandsfunktion Ψ_F ist mit Einzelfermion-Zuständen folgendermassen realisierbar:

$$\Psi_F(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2) - \psi_1(x_2) \cdot \psi_2(x_1) = -[\psi_1(x_2) \cdot \psi_2(x_1) - \psi_1(x_1) \cdot \psi_2(x_2)] \quad (3.5b)$$

Wir setzen den bekannten Grundzustand $\psi_{Gr}(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right) = C \cdot \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right)$ in (3.5b) ein:

$$\Psi_{FGr}(x_1, x_2) = C \cos\left(\frac{\pi x_1}{b}\right) \cdot C \cos\left(\frac{\pi x_2}{b}\right) - C \cos\left(\frac{\pi x_2}{b}\right) \cdot C \cos\left(\frac{\pi x_1}{b}\right) = 0.$$

Wir hätten wissen sollen, dass das nicht geht, denn es sind nie zwei Fermionen im gleichen Zustand.

Der Grundzustand des Systems Ψ_{FGr} erlaubt ein Fermion im Grundzustand $\psi_{Gr}(x) = C \cos\left(\frac{\pi x}{b}\right)$ und zwingt das zweite Fermion in den ersten angeregten Zustand $\psi_{An}(x) = C \sin\left(\frac{2\pi x}{b}\right)$, also gilt

$$\Psi_{FGr}(x_1, x_2) = C \cos\left(\frac{\pi x_1}{b}\right) \cdot C \sin\left(\frac{2\pi x_2}{b}\right) - C \cos\left(\frac{\pi x_2}{b}\right) \cdot C \sin\left(\frac{2\pi x_1}{b}\right).$$

Auch von dieser Zustandsfunktion ist zu zeigen, dass sie die Gleichung (3.4**) erfüllt:

$$\frac{-\hbar^2 C^2}{8\pi^2 m} \left[\frac{d}{dx_1} \left(\frac{d}{dx_1} \right) + \frac{d}{dx_2} \left(\frac{d}{dx_2} \right) \right] \left[\cos\left(\frac{\pi x_1}{b}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{b}\right) - \cos\left(\frac{\pi x_2}{b}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_1}{b}\right) \right] = E_{FGr} \Psi_{FG}(x_1, x_2)$$

Die Rechnung verläuft so, wie im Abschnitt (2) durchgeführt worden ist, allerdings ist sie doppelt so umfangreich. Die Funktion Ψ_{FGr} steht auf beiden Seiten der Gleichung und lässt sich wegdividieren. Es bleibt:

$$\frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \left[-\left(\frac{\pi}{b}\right)^2 - \left(\frac{2\pi}{b}\right)^2 \right] = E_{FGr} \Leftrightarrow \text{😊 } E_{FGr} = 5 \frac{\hbar^2}{8b^2 m} = 5E_1 \text{ 😊}$$

(5) **Vergleich Fermionen – Bosonen:** Offenbar äussert sich das individualistische Verhalten der Fermionen, das Pauli-Prinzip, so wie eine abstossende Kraft, die im Potentialtopf nach oben treibt.(6) **Vergleich Quantenobjekte – klassische Objekte:** Wenn die Objekte nicht wechselwirken, gilt für das System $E = E_1 + E_2$. Während Quantenobjekte nie ruhen können, nur gewisse Energiestufen annehmen und das Pauli-Prinzip beachten müssen, besitzen klassische Objekte alle Freiheiten.**3.7.4 Verschränkung allgemein**

Die Zustandsfunktion (3.5b) ist ein Beispiel für einen verschränkten Zustand gemäss der Definition:

Zwei oder mehr Quantenobjekte sind in einem **verschränkten Zustand (entangled state)**, wenn die Zustandsfunktion **nicht als Produkt** von Einzelzustandsfunktionen geschrieben werden kann.Der Begriff wurde 1935 von Schrödinger in seinem durch die Katze berühmt gewordenen Artikel geprägt. Solche Zustände waren schon früher bei der quantenmechanischen Untersuchung des He-Atoms und des H₂-Moleküls gefunden worden. Solche Zustände von zwei Fermionen wurden abersteht. Besteht eine „Verschränkung der Voraussetzungen“, so kann sie offenbar nur darauf zurückgehen, daß die zwei Körper früher einmal im eigentlichen Sinn *ein* System gebildet, das heißt in Wechselwirkung gestanden, und *Spuren* aneinander hinterlassen haben. Wenn zwei getrennte Körper, die einzeln maximal bekannt sind, in eine Situation kommen, in der sie aufeinander einwirken, und sich wieder trennen, dann kommt regelmäßig das zustande, was ich eben *Verschränkung* unseres Wissens um die beiden Körper nannte. Der gemeinsame Erwartungskatalog be-

nicht als spektakulär betrachtet, obwohl Max Born schon 1926 das Zusammenwirken der Teile eines auseinanderfliegenden Quantensystems als «Gespensterfeld» bezeichnet hat.

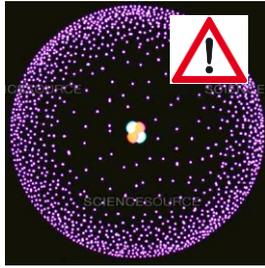
Heute gilt der quantenmechanische Messprozess als Verschränkung von Messobjekt und Messapparat. Wie der Ausschnitt aus dem Originalartikel zeigt, ging es auch Schrödinger 1935 um die Analyse des Messvorgangs.

Durch den Nobelpreis 2022 ist die Verschränkung in helles Licht getaucht worden. Es gelingt auch, verschränkte Bosonen herzustellen. Beispielsweise sind die beiden Photonen der Vernichtungsstrahlung eines Elektron-Positron-Paares hinsichtlich ihrer Polarisation und Richtung verschränkt. Die Richtungs-Verschränkung bildet die Grundlage der in der Tumordiagnostik wichtigen Positronen-Emissions-Tomographie PET. Verschränkte Zustände sind im Quantencomputer wesentlich. Mehr zur Verschränkung steht im → Kapitel 3.8.

3.7.5 Verschränkung im Helium-Atom

(Ergänzung)

Die Quantenmechaniker machten sich nach der Erklärung des H-Atoms und des He⁺-Ions sofort hinter das Helium (weshalb ist das Bild falsch?) und das analoge Li⁺-Ion und stiessen folgendermassen auf die in 3.4.5 angegebene Elektronenkonfiguration 1s²: Heisenberg berücksichtigte Spin und Pauli-Prinzip in



einem allgemeinen Artikel *Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik*, in dem er für zwei gekoppelte Resonatoren eine antisymmetrische Zustandsfunktion untersuchte. Dann dachte er *Über die Spektren von Atomsystemen mit zwei Elektronen* nach. Er machte zuerst *Eine Berechnung ohne Berücksichtigung der Elektronenmagnete* [ohne magnetische Momente der Elektronen] und fand *mit der Schrödingerschen Methode der Eigenfunktionen* [ψ der 1s-Zustandstände] Werte für die Lage der He-Energieniveaus, die mit der Spektroskopie übereinstimmten. Die Grundidee dieser Rechnung soll hier skizziert werden. (Heisenbergs anschliessende *Berechnung mit Berücksichtigung der Elektronenmagnete* führt auf die sogenannte Spin-Bahn-Kopplung und ist Thema für die Hochschule.)

Als Vorbereitung haben wir in 3.7.3 zwei Quantenobjekte im einfachen Potentialtopf untersucht. Heisenberg hat bei seinen Rechnungen zum Helium erstmals von *Zuständen mit in den Elektronen-Koordinaten antisymmetrischer Eigenfunktion* gesprochen. Im Helium bilden die ununterscheidbaren Elektronen wegen der gegenseitigen Abstossung ein Gesamtsystem. Es ist das einfachste System, in dem **das zentrale Konzept der Quantenphysik, die Verschränkung**, eine Rolle spielt.

Weil Heisenberg grundlegende Einsichten ausgehend von quantenmechanischen Resonatoren gefunden hat, wird hier und beim H₂-Molekül oft fälschlicherweise das antisymmetrische Verhalten von Fermionen auf irgend eine «Resonanzkopplung» oder eine «Resonanzkraft», zurückgeführt.

Für die Zustandsfunktionen der beiden Elektronen 1 und 2 mit der Abkürzung \mathbf{r} für die je vier Variablen x, y, z, s ergibt sich zusätzlich zur Schrödinger-Gleichung (3.4b) die Forderung für die antisymmetrische, fermionische Zustandsfunktionen: $\Psi_F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Psi_F(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$

Nun kann jede Funktion $\Psi(\mathbf{r})$ als Produkt einer räumlichen Funktion ψ (also ein 1s-, 2s-, 2p- usw. Zustand) und einer Spinfunktion χ (up oder down) geschrieben werden. Deshalb gibt es zwei Arten, der Antisymmetrie-Forderung gerecht zu werden:

Singulett-Zustand: Geometrie symmetrisch und Spin antisymmetrisch

$$\Psi_{\text{singulett}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{\text{symmetrisch}}(x_1, x_2) \cdot \chi_{\text{antisymmetrisch}}(1, 2)$$

Triplet-Zustand: Geometrie antisymmetrisch und Spin symmetrisch

$$\Psi_{\text{triplett}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{\text{antisymmetrisch}}(x_1, x_2) \cdot \chi_{\text{symmetrisch}}(1, 2)$$

Die Wörter «Singulett» und «Triplet» stammen aus der Spektroskopie und benennen die Aufspaltung einer Spektrallinie im Magnetfeld auf 1 (keine Aufspaltung) respektive 3 Linien. Ein Singulett entsteht bei antiparallelen Spins $\downarrow\uparrow$, ein Triplet entsteht bei parallelen Spins $\uparrow\uparrow$ oder $\downarrow\downarrow$. Zwei parallele Spins aufaddiert geben einen Gesamtspin, der up oder down oder «seitwärts» zeigen kann und damit im Magnetfeld zu einer Aufspaltung in drei Linien führen.

Ohne Berücksichtigung der Elektronenmagnete wird die Energie eines Zustands $\Psi(r_1, r_2)$ nur durch Geometrie $\psi(x_1, x_2)$ bestimmt. Für Helium und das Lithium-Ion gilt nun:

Singulett-Zustand: Beide Elektronen im 1s-Zustand \Leftrightarrow tiefste Energie \Leftrightarrow Normalfall

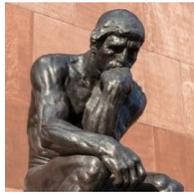
$$\psi_{\text{symmetrisch}}(x_1, x_2) = 1s\text{Zustand}(x_1) \cdot 1s\text{Zustand}(x_2) \quad (\text{nur mit Spin } \downarrow\uparrow \text{ möglich})$$

Triplet-Zustand: Ein Elektron im 1s- und das andere im 2s-Zustand \Leftrightarrow energetisch ungünstiger

$$\psi_{\text{antisymmetrisch}}(x_1, x_2) = 1s\text{Zustand}(x_1) \cdot 2s\text{Zustand}(x_2) - 1s\text{Zustand}(x_2) \cdot 2s\text{Zustand}(x_1)$$

Weil ein 2s-Zustand eine höhere Energie aufweist als ein 1s-Zustand, besitzt der Singulett-Zustand die tiefere Energie. Seine Energie kann mit der Annahme einer teilweisen Abschirmung des Kerns für das zweite Elektron durch das erste abgeschätzt werden. Weil im Singulett-Zustand die Spins antiparallel sind, spricht man auch von **Para-Helium**. Der Grundzustand des **Ortho-Heliums**, das sich im Triplet-Zustand mit parallelen Spins befindet, liegt etwa 20 eV höher als der Grundzustand des Para-Heliums.

3.7.6 Die Elektronenpaar-Bindung quantenmechanisch genauer verstehen. (Ergänzung)



Die Quantenmechanik erklärte erstmals, weshalb «die Welt nicht zusammenfällt», nämlich, weshalb die Atome stabil sind, die Elektronen nicht in die Kerne stürzen. Erst in einem zweiten Schritt vermochte sie auch zu erklären «was die Welt zusammenhält». Die verschiedenen Bindungen überlassen die meisten Physikbücher lieber der Chemie, denn die Realität ist komplex. Wir versuchen trotzdem, eine Brücke zu schlagen. Während die Ionenbindung und die metallische Bindung – zumindest im Prinzip – leicht zu verstehen sind, bildet die Elektronenpaar-Bindung eine Knacknuss-Aufgabe:

Wie ist es möglich, dass zwei elektrisch neutrale Atome elektrisch zusammenhalten können? Es gibt ja keine anderen Kräfte als elektrische. Diese Frage wurde 1927 von Schrödingers Mitarbeitern Walter Heitler und Fritz London, im damaligen Biergarten auf dem «Globus»inselnchen in Zürich beantwortet.

Die **klassische Physik** sagt, dass es **kein H_2^+ -Molekül-Ion**, geben darf. Begründung:

Energetisch am günstigsten wäre gestreckt und punktsymmetrisch: $p^+ - e^- - p^+$.

Die Coulomb-Anziehung $p^+ - e^-$ ist aber viermal stärker als die Coulomb-Abstossung $p^+ - p^+$, weil der Abstand quadratisch eingeht. Die beiden Protonen müssten so aufs Elektron stürzen!

Die **Quantenmechanik** weiss hingegen: «Das Quantenobjekt ‘Elektron’ ist überall und nirgends».

Beim H_2^+ kann das Elektron zum Beispiel in einem Orbital sein, das zu je $3/7$ um die beiden Protonen liegt und nur zu $1/7$ im Zentrum des Moleküls. Das Elektron schirmt die Ladungen der Protonen teilweise ab. Diese haben nur noch die Wirkung $+4/7 \cdot e$. Dann stellt sich beim Abstand X ein Kräftegleichgewicht ein. Beim Proton 2 gilt: $F_{\text{Proton1-Proton2}} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{4e/7 \cdot 4e/7}{(2X) \cdot (2X)} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{1e/7 \cdot 4e/7}{(1X) \cdot (1X)} = F_{\text{Elektron-Proton2}}$.

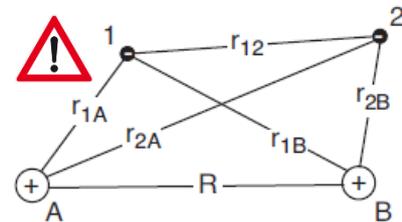
Es **kann** ein H_2^+ -Molekül-Ion existieren. In der simplen Rechnung musste X offenbleiben. Wir finden, dass ein stabiles Orbital mit einem Energieminimum denkbar ist, können aber nicht begründen, weshalb das beim Kernabstand $X = 106 \text{ pm} = 2 \text{ Bohr-Radien} = 2 \cdot a$ der Fall ist. – Bei der **Elektronenpaarbindung im H_2 -Molekül** geht es um zwei Aufgaben:

[A.I] eine Zustandsfunktion für zwei Elektronen im Kraftfeld von zwei Kernen im Abstand R der beiden Atomkerne, respektive der beiden Protonen A und B, zu finden und

[A.II] die gesamte elektrische Energie als Funktion des Abstands R auszurechnen, deren Minimum zu suchen und zu hoffen, dass es negativ ist, also einer stabilen Bindung entspricht, d.h. sowohl

[Summe aller elektr. Energien beim idealen R] < 0 als auch

$\frac{d}{dR}$ [Summe aller elektr. Energien als Funktion von R] $= 0$



FIGUR 3.8: ORTE IM H_2 -MOLEKÜL

Ansatz der Lösung von A.I: Wie beim Helium-Atom müssen auch beim H_2 -Molekül alle denkbaren Zustandsfunktionen der Antisymmetrie-Forderung für Fermionen gerecht werden. Es gibt zwei Varianten, den – wie sich zeigt – stabilen Singulett- und den instabilen Triplettzustand.

Singulett-Zustand: Geometrie symmetrisch und Spin antisymmetrisch

$$\Psi_{\text{singulett}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{\text{symmetrisch}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \cdot \chi_{\text{antisymmetrisch}}(1, 2)$$

Dabei gilt: $\psi_{\text{symmetrisch}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_A(\mathbf{x}_1)\psi_B(\mathbf{x}_2) + \psi_A(\mathbf{x}_2)\psi_B(\mathbf{x}_1)]$

Und ebenso den Triplett-Zustand: Geometrie antisymmetrisch und Spin symmetrisch.

Alles ist aber komplizierter als beim He-Atom, weil es nun zwei Kraftzentren A und B gibt. Die volle Bedeutung der räumlichen Variablen $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ zeigt die Figur 3.8. Es scheinen 6 Variablen aufzutreten. Effektiv können alle Größen auf die beiden Variablen r_{1A} und r_{2B} und den Parameter R zurückgeführt werden. Wir schreiben oben kurz $\mathbf{x}_1 = r_{1A}$ und $\mathbf{x}_2 = r_{2B}$. Da R s ist ein Parameter, weil die Kerne sehr viel schwerer sind als die Elektronen und deshalb die zugehörigen de Broglie-Wellenlängen so klein sind, dass wir in unserer Näherung die Kerne als klassische Objekte behandeln dürfen.

Aus dem Coulomb-Gesetz ergeben sich zwei abstossende und vier anziehende elektrischen Wechselwirkungen mit folgenden Werten, die wir in eine vervollständigte Schrödinger-Gleichung vom Typus (3.4) einsetzen müssen(t)en:

$$\text{😊 } E_{\text{pot}} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \left\{ \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2B}} \right\} \text{😊}$$

Die Bestimmung der räumlichen Zustandsfunktionen war für Heitler und London anspruchsvoll. Alle Probleme, bei denen drei und mehr (astronomische oder quantenmechanische) Körper beteiligt sind, können mathematisch nur **näherungsweise** gelöst werden! Zwei verschiedene Annäherungen liefern für die unbekannte Zustandsfunktion den Ansatz: zwei **eingedrückte 1s-Orbitale** im Abstand R !

- Ist R sehr gross, dann haben wir zwei freie H-Atome, energetisch am günstigsten je im 1s-Zustand.

- Wird R sehr klein, dann sind die Verhältnisse für die Elektronen ähnlich wie beim He-Atom oder beim Li^+ -Ion von \rightarrow 3.7.5.

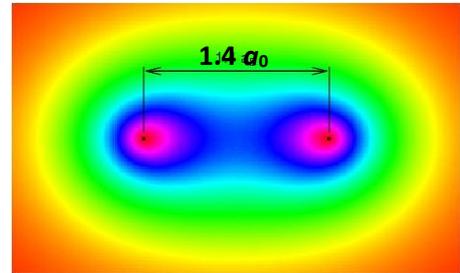
Wir betrachten nur die symmetrische Orts-Zustandsfunktion, die zusammen mit dem Spin-Singulett energetisch günstiger ist. Es ist plausibel, dass heute Berechnungen mit dem Computer zum Molekül-Orbital führen, das in Figur 3.9 dargestellt ist.

- Aus Symmetriegründen ist das Molekül rotationsymmetrisch.

- Aussen sind die Konturen «baseball-artig».

- Innen sind die Konturen «erdnüsschen-artig».

Ob das Orbital energetisch stabil ist, wissen wir jetzt noch nicht.



Figur 3.9: $w(x)$ DES H_2 -MOLEKÜLS

Ansatz zur Lösung von A.II: Es gilt nachzuweisen, dass für ein gewisses R ein Gesamtenergieminimum existiert, das negativ ist und daher einer stabilen Bindung entspricht. Wir wissen bloss, dass die Elektronen «überall und nirgends» sind, und müssen mit den Erwartungswerten ihrer Orte $\langle r_{12} \rangle$ usw. rechnen, die sich aus der Heitler-London-Zustandsfunktion (vgl. Figur 3.9) ergeben.

$$\langle E_{pot} \rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon} \left\{ \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{\langle r_{12} \rangle} - \frac{e^2}{\langle r_{1A} \rangle} - \frac{e^2}{\langle r_{2A} \rangle} - \frac{e^2}{\langle r_{1B} \rangle} - \frac{e^2}{\langle r_{2B} \rangle} \right\}$$

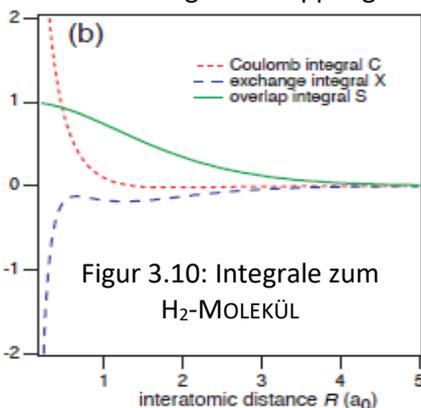
Die Berechnung verläuft nach dem Prinzip, das in 3.7.3 durchgeführt ist. Alle 6 Summanden der Energie sind mit dem 2 Summanden enthaltenden Singulettzustand zu berechnen. Das führt (1) zum **Coulomb-Integral C**, das «Coulomb-klassisch» heissen sollte, und (2) zum **Austauschintegral X**, das «**Coulomb-quantenphysikalisch**» heissen sollte. Nach der klassischen Physik gäbe es nur C mit den Wahrscheinlichkeitsdichten $w = [\varphi_A(r_{1A})\varphi_B(r_{2B})]^2$. **Das Integral X mit den teilweise vertauschten Elektronen in den Orbitalen A und B gäbe es klassisch nicht!** Es ist eine Konsequenz der Ununterscheidbarkeit.

$$C = \iiint d^3r_A \iiint d^3r_B \cdot \varphi_A(r_{1A})\varphi_B(r_{2B}) \frac{1}{4\pi\epsilon} \left[\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2B}} \right] \varphi_A(r_{1A})\varphi_B(r_{2B})$$

$$X = \iiint d^3r_A \iiint d^3r_B \cdot \varphi_A(r_{1A})\varphi_B(r_{2B}) \frac{1}{4\pi\epsilon} \left[\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2A}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2B}} \right] \varphi_A(r_{2A})\varphi_B(r_{1B})$$

Die Auswertung dieser sehr komplizierten Raum-Integrale mit Heitler-Londons zwei eingedrückten 1s-Orbitalen im Abstand R , liefert die Kurven, die in Figur 3.10 dargestellt sind:

- Das unwichtige Überlappungsintegral S gibt an, wie oft beide Elektronen am gleichen Ort sind.



Figur 3.10: Integrale zum H_2 -MOLEKÜL

- C und X streben für ∞ grosse Werte von R gegen Null \Leftrightarrow Es sind zwei einzelne H-Atome ohne Wechselwirkung.

- C strebt für ∞ kleine Werte von R gegen $+\infty \Leftrightarrow$ Coulomb-Abstossung zwischen den Protonen (ohne Neutron wie beim He).

- X strebt für ∞ kleine Werte von R langsamer als C gegen $-\infty \Leftrightarrow$ ein quantenmechanisches Verhalten, das keine klassische Erklärung erlaubt: Quantenmechanik bleibt hier unanschaulich.

- Für $R \approx 2a$ ist C leicht negativ \Leftrightarrow schwache Bindung, weil die Elektronen im gesamten Molekül-Orbital mehr Raum haben, nimmt der Lokalisierungsaufwand gemäss Heisenbergs UBR ab.

- Für $R \approx 2a$ gilt $-X \ll -C < 0$, denn in diesem Bereich gilt $[\varphi_A(r_{1A})\varphi_B(r_{2B})]^2 \ll \varphi_A(r_{1A})\varphi_B(r_{2B})\varphi_A(r_{2A})\varphi_B(r_{1B})$.

Diese wichtige, aber schwierige Einsicht können Sie bestätigen, indem Sie in einer Figur 3.9 in der Nähe der Symmetrieachse zwei häufige Elektronenpositionen wählen, die Grössen r_{1A} usw. einzeichnen und die Produkte ohne und mit Vertauschung bilden. Wir stellen fest:

Die Elektronenpaarbindung entsteht nur durch elektrische Anziehung und Abstossung. Vor allem weil die Elektronen als Fermionen ihre Rollen im Austauschintegral tauschen müssen, entsteht ein stabiles Energieminimum und damit die chemische Elektronenpaar-Bindung.

Die Näherungsrechnung von Heitler und London ist korrekt, liefert gute Werte für R aber nur mässige Übereinstimmung für E . Dank Computerrechnung gibt es jetzt gute Übereinstimmung von Theorie und Experiment mit folgenden Werten: Die Elektronenpaarbindung im H_2 -Molekül besitzt eine Länge von $R = 1.4 \cdot a$ und eine Bindungsenergie von $E = 4.5$ eV. Wie man aus der Wirkung von zwei Elektronen anstelle von einem erwartet, ist das H_2 -Molekül «enger» und «härter» als das H_2^+ -Molekül-Ion 2.7.3.

Die Näherungsrechnung zeigt, dass das Austauschintegral hauptsächlich für das Energieminimum und die Stabilität verantwortlich ist. Leider ist daraus der irreführende Begriff «Austauschkraft» entstanden. Dieser suggeriert, dass es neben den elektromagnetischen Kräften in der Chemie bei der Elektronenpaarbindung plötzlich eine ganz neuartige Kraft gäbe. Diese «Wechselwirkungskraft» ist jedoch nur eine Folge der Quantenmechanik bei Fermionen. Auf eine Vorarbeit von Heisenberg zurückgehend, wird ebenso **unpassend** gelegentlich von «Resonanz» gesprochen, wo es um Verschränkung geht.

Eine analoge Rechnung zum **Triplet-Zustand** führt zu einem Orbital ohne Elektronendichte in der Symmetrieebene zwischen den Protonen. Das ist energetisch ungünstig und liefert keine Bindung. In der Chemie wird manchmal von einem «Anti-bonding-Zustand» gesprochen.

Wer mehr über die herausfordernde Quantenchemie wissen will, findet Bilder beispielsweise bei https://www.wmi.badw.de/teaching/Lecturenotes/Physik4/Physik4_Kapitel9.pdf

Ohne äusseres Magnetfeld trägt der Spin zwar nichts zur Energie des Moleküls bei. Die Rolle des Spins ist aber zentral für die Existenz des H_2 -Moleküls. Und der Spin sorgt dafür, dass es kein H_3 -Molekül gibt. Eine «ménage à trois» ist nicht möglich, weil das wieder ein Singulettzustand wäre und das Pauliprinzip das dritte Elektron in einen anderen Zustand drängte. Man spricht von einer **Sättigung** der Einfachbindung. Hingegen ist mit 4 Elektronen eine Doppelbindung möglich, etwa beim O_2 .

Ein Spin-antiparalleles Elektronenpaar $\uparrow\downarrow$ ist der quantenphysikalische Hintergrund für den Valenzstrich der klassischen Chemie.

Wegen des Elektronenspins gibt es nur Elektronen**paar**bindungen. Es gibt H_2 und H_3^+ , aber kein H_3 .

Die in der Biologie wichtigen **H-Brückenbindungen** sind mit der Elektronenpaarbindung verwandt. Mehrere Elektronen bilden einen Potentialtopf für das Proton. **Van der Waals-Kräfte** sind schwache Mehrfachbindungen. Es sind Konstellationen, bei denen das Energieminimum sehr wenig ausgeprägt ist, so dass Bindungsenergie und Stabilität der Bindung gering bleiben.

Die Quantenmechanik erklärt die Grundlagen sowohl des Lebens als auch der Evolution:

- (1) Die DNA-Moleküle sind dank chemischer Bindungen sehr stabil.
- (2) DNA-Moleküle können u. a. dank des Tunneleffekts Veränderungen erfahren.

ORTHO- UND PARA-WASSERSTOFF

Schon bevor das H_2 -Molekül quantenmechanisch durchgerechnet war, erkannten Werner Heisenberg und Friedrich Hund die Bedeutung der **Spins der beiden Protonen**: Sie sind ebenfalls ununterscheidbar. Auch für sie gibt es Singulett- und Triplet-Zustände, die sich physikalisch unterscheiden müssten. Später zeigte es sich, dass der sogenannte **Parawasserstoff** dem **Singulettzustand der Kernspins** entspricht und bei $T = 0$ K ausschliesslich vorkommt. Orthowasserstoff entspricht dem Tripletzustand. Bei 80 K sind beide Formen im thermodynamischen Gleichgewicht zu je 50% vorhanden. Bei der ortho- zu para-Umwandlung wird etwa 1kJ/mol frei. – Beim Betanken von Raketen mit flüssigem Wasserstoff ist auf die quantenmechanische Ununterscheidbarkeit der Protonen zu achten!



Heisenberg erhielt 1933 den Nobelpreis für die Erschaffung der Quantenmechanik, deren Anwendung, unter anderem, zur Entdeckung der verschiedenen Formen des Wasserstoffs geführt hat.

AKTIVITÄTEN ZU 3.7

Fermi-Aufgabe: Schätzen Sie ab, wie viele Klavierstimmer es in Chicago geben könnte

3.8 Die Quantenwelt ist nicht lokal.

Etappe 7: Bells Ungleichungen und die Konzepte 'Verschränkung' und 'Nichtlokalität'

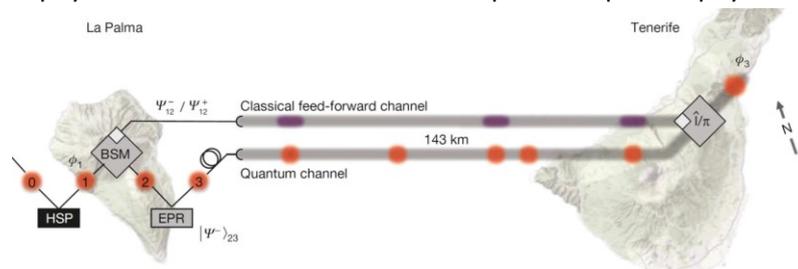


The Royal Swedish Academy of Sciences has decided to award the Nobel Prize in Physics 2022 to **Alain Aspect**, Université Paris Saclay, **John F. Clauser**, Walnut Creek (CA) and **Anton Zeilinger**, University of Vienna, for experiments with entangled photons, establishing the violation of Bell inequalities and pioneering quantum information science.

3.8.1 «Quantenphysik 2.0» und ihre Anwendungen

Manchmal wird die Physik mit der Schrödingergleichung und ihren vielen Anwendungen in der Elektronik, der Chemie usw. als «Quantenphysik 1.0» bezeichnet. Zunehmend spielt die quantenphysikalische Informationsverarbeitung eine Rolle, die mit den Stichworten **Verschränkung (entanglement)** und **Bells Ungleichungen** verknüpft ist.

Spektakulär ist die Übertragung von Information über 143 km zwischen La Palma und Teneriffa



mit verschränkten Lichtquanten durch Zeilingers Gruppe (Ma et al., 2012). Doch nicht die technischen Einzelheiten von abhörsicherer Kommunikation, von Quanten-Teleportation oder von Quantencomputern sollen hier erläutert werden, sondern ihre physikalischen Grundlagen.

Die Hintergründe des Nobelpreises 2022 reichen fast ein Jahrhundert zurück. Idee und Begriff «Verschränkung» wurden von Erwin Schrödinger 1935 geprägt und im gleichen Artikel publiziert wie seine berühmte Katze (→ 2.8.1). Dort schreibt er im Abschnitt «Theorie des Messens, zweiter Teil»:

*Wenn zwei getrennte Körper, die einzeln maximal bekannt sind, in eine Situation kommen, in der sie aufeinander einwirken, und sich wieder trennen, dann kommt regelmässig das zustande, was ich eben **Verschränkung unseres Wissens** um die beiden Körper nannte.*

Schon damals war es klar, dass beispielsweise die beiden Elektronen im Helium-Atom (→ 3.5.6) und im H₂-Molekül (→ 3.5.7) verschränkt sind. Die Zustandsfunktionen von verschränkten Quantensystemen zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Zustandsfunktion **ψ nicht als reines Produkt** geschrieben werden kann, sondern vom Typus der Funktionen (3.5a) oder (3.5b) sind. Weil sich solche Systeme aber lange Zeit nur auf atomare Dimensionen begrenzten, schien Verschränkung zwar irritierend, aber nicht spektakulär.

3.8.2 Opposition aus dem Exil: Das Einstein-Podolski-Rosen-Gedankenexperiment (EPR).

Einstein hatten sich an den Solvay-Konferenzen 1927 und 1930 noch mit Bohr über die Gültigkeit der



Bohr und Einstein

Quantenmechanik gestritten und erfolglos versucht, die Unbestimmtheitsrelation zu widerlegen. Bohr, Heisenberg und Pauli formulierten darauf eine Sicht, die als Kopenhagener Interpretation der Quantenphysik in die Geschichte eingegangen ist. Die Kopenhagener Interpretation überzeugte den Physik-Mainstream. Einstein und Schrödinger schienen ältere Herren zu sein, nicht mehr ganz in der Lage, den Fortschritt der Physik mitzumachen.

Nach der Flucht aus Nazi-Deutschland schrieb Einstein aus seinem Exil maliziös an Schrödinger, ebenfalls im Exil, noch in Oxford: **Die Heisenberg-Bohrsche Beruhigungsphilosophie – oder Religion? – ist so fein ausgeheckt, dass sie dem Gläubigen einstweilen ein sanftes Ruhekippen liefert.**

Einstein war überzeugt, dass die Quantenmechanik noch unvollkommen und verbesserungsfähig sei. Er hoffte, eine im Hintergrund wirkende Variable könnte die Kausalität und die lokale Realität retten. 1935 schreckte er «die Gläubigen» auf mit dem Artikel *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?* Einstein hatte ihn in Princeton zusammen mit Boris Podolsky und Nathan Rosen verfasst, daher die Abkürzung EPR. Wie er später schrieb, ging es ihm weniger um den Zufall als um den Realitätsbegriff (Besitz das Elektron auch dann die Eigenschaft «Ort», wenn niemand hinschaut und misst? Beim klassischen Objekt «Mond» ist die Antwort klar.) als um die Frage: **«Lokalität [= Trennbarkeit] oder spukhafte Fernwirkung?»**. Gibt es eine Wirkung von «hier und jetzt» auf «dort und jetzt» jenseits der Grenzen der Relativitätstheorie?

EPR gingen von einem Gedankenexperiment aus, bei dem ein angeregtes Quantensystem (radioaktives Atom usw.) zerfällt und zwei Quantenobjekte (Lichtquanten, Elektronen usw.) aussendet, die auseinanderfliegen: Man könnte schreiben: $\psi_{\text{AnfangAB}} \rightarrow (\psi_{\text{EndeA}} \& \psi_{\text{EndeB}})$.

Misst man bei A beispielsweise die z-Komponente des Drehimpulses, so ist wegen der Drehimpulserhaltung bekannt, dass in B das ψ_{EndeB} den entgegengesetzten Wert zeigt. Nun sagt die UBR, dass man bei A nicht gleichzeitig auch noch die x-Komponente des Drehimpulses messen könne. Bei ψ_{EndeB} hingegen kann man sie messen, wenn man dort den Gesamtdrehimpuls nicht gemessen hat. Doch man kann auf die x-Komponente von A zurückschliessen! Macht man diese Abfolge von Messungen bei diesem *kombinierten System* (angedeutet durch das &) erst dann, wenn die Objekte so weit voneinander entfernt sind, dass sie *keinerlei Wechselwirkung* mehr aufeinander ausüben, kommt man zur Folgerung:



EPR-Experiment: Idee

EPR behaupten 1935: Entweder gibt es **eine verborgene Variable** [d.h. die Quantenmechanik ist unvollständig], **oder** es gibt **eine spukhafte Fernwirkung**.

Einstein, Podolsky und Rosen glaubten natürlich nicht an Spuk und schlossen ihren Artikel: *Während wir somit gezeigt haben, dass die [Zustands-] Funktion keine vollständige Beschreibung der physikalischen Realität liefert, lassen wir die Frage offen, ob eine solche Beschreibung existiert oder nicht. Wir glauben jedoch, dass eine solche Theorie [mit verborgenen Variablen] möglich ist.* Der «Outsider» Einstein trat damit eine breite Lawine los, die bis heute in Bewegung ist.

Wolfgang Pauli war sehr aufgebracht, als er den EPR-Artikel las: *Einstein hat sich wieder einmal zur Quantenphysik öffentlich geäußert. (...) Bekanntlich ist das jedes Mal eine Katastrophe, wenn es geschieht. «Weil, so schliesst er messerscharf – nicht sein kann, was nicht sein darf.»*

Niels Bohr reagierte sofort mit einem Artikel, der den gleichen Titel trug, und kündigte an: *Es wird gezeigt, dass ein [von EPR formuliertes] gewisses «Kriterium der physikalischen Realität» eine wesentliche Mehrdeutigkeit aufweist, wenn man es auf Quantenphänomene anwendet. In diesem Zusammenhang wird ein mit «Komplementarität» bezeichneter Gesichtspunkt erklärt, unter dem die quantenmechanische Beschreibung physikalischer Systeme innerhalb des Geltungsbereichs allen rationalen Erfordernissen der Vollständigkeit genügt.*

Die meisten Physiker schlossen sich Bohr an. Einstein, Schrödinger und de Broglie verstummten. Die «orthodoxe» Kopenhagener Interpretation siegte. Die unkritische Haltung hat David Mermin später als «Shut up and calculate!» karriert. Wer an «Kopenhagen» zweifelte, galt als nicht ganz seriös.

3.8.3 Bells Ungleichung ermöglicht, einen philosophischen Streit im Physiklabor zu entscheiden.



David Bohm

Während des 2. Weltkriegs interessierte man sich nicht für naturphilosophische Feinheiten, und auch in der anschließenden Aufbauphase spielten der Transistor (1947 erste Vorführung im BELL-Lab) und der Laser (1954 erster Mikrowellen-MASER) die führenden Rollen. Doch Ende der 50er Jahre lebte die Diskussion am Pausentisch, abseits der «offiziellen Physik», wieder auf. David Bohm entwickelte eine Variante der Quantentheorie, die mit einer verborgenen Variablen die genau gleichen Vorhersagen machte wie die Quantenmechanik. Hugh Everett schlug die **Viele-Welten-Interpretation** vor, in der Schrödingers Katze in einer Welt tot ist, aber in einer anderen lebendig bleibt.

Alles änderte sich 1964 mit dem Artikel: *On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox*. Im CERN hatte der irische Theoretiker John Bell (→ PANORAMA 1950) die Grundlagen der Quantenmechanik analysiert und gefunden, dass der Satz in John von Neumanns berühmten Grundlagen der Quantenphysik, welcher verborgene Variablen als unmöglich erklärte, nicht stimmte. Die Voraussetzungen waren nicht erfüllt.

Bell gelang darauf eine spektakuläre theoretische Einsicht: **Es gibt keine Theorie mit verborgenen Variablen**, die alle Ergebnisse der Quantenphysik reproduziert. Ausgehend von der Bohm-Version des EPR-Gedankenexperiments konnte er eine **Ungleichung** ableiten, auf Grund der durch das **Experiment zwischen Theorien** mit und solchen ohne verborgene Variablen **entschieden** werden kann.



John Bell

Das gab einerseits Bohm und seinen Anhängern Auftrieb in der naturphilosophischen Debatte (Einstein war bereits 1955 verstorben, de Broglie diskutierte aber bis 1987 mit) und führte andererseits die Experimentalphysiker dazu, nach Realisierungen für dieses Experiment zu suchen. Dabei zeigte sich: So überzeugend und einfach die Idee, so aufwendig und anspruchsvoll ihre Konkretisierung im Labor! Bells ursprüngliche Ungleichung und die verschiedenen Ungleichungen für ähnliche Experimentieranordnungen, die später gefunden wurden, beziehen sich auf **Korrelationen** von Messwerten. Was Korrelationen sind, muss daher kurz erläutert werden.

3.8.4 Noch etwas mehr Statistik: Korrelationen

Eine Korrelationen beschreibt die Beziehung zwischen zwei Grössen, die durch Zahlen erfasst werden können, z. B. zwischen dem Interesse für Physik y und dem Interesse für Mathematik x . Hier ist klar, dass kein funktionaler Zusammenhang, etwa $y = 0.7 \cdot x$, gilt. Es gibt nur eine allgemeine, statistische Tendenz «je interessierter an Mathematik, desto interessierter an Physik», mit Ausnahmen. Diese statistische Tendenz wird durch den **Korrelationskoeffizienten r** erfasst.

In Anlehnung an → 3.1.2 erläutern wir r nur für den Spezialfall mit $n = 3$. Wir betrachten die Interessen von Anna, Beat und Christine, die durch gerichtete Zahlenpaare $(x;y)$ mit Werten $(1;1) \leq (x;y) \leq (6;6)$ beschreiben werden:

Der **Korrelationskoeffizient r** zwischen den Grössen x und den Grösse y ist

$$r_{xy} = \frac{(x_A - \langle x \rangle) \cdot (y_A - \langle y \rangle) + (x_B - \langle x \rangle) \cdot (y_B - \langle y \rangle) + (x_C - \langle x \rangle) \cdot (y_C - \langle y \rangle)}{3 \cdot \Delta x \cdot \Delta y}$$

Wobei $\langle x \rangle$ und $\langle y \rangle$ die Mittelwerte und Δx und Δy die Standardabweichungen (Schwankungen) sind.

Wir illustrieren r mit drei extremen und einem typischen Beispiel.

(1) «konforme Gruppe»: Anna = (6;5), Beat = (5;4), Christine = (4;3) $\Rightarrow \langle x \rangle = 5, \langle y \rangle = 4, \Delta x = \Delta y = \sqrt{2/3}$

$$r_{xy} = \frac{(6-5) \cdot (5-4) + (5-5) \cdot (4-4) + (4-5) \cdot (3-4)}{3 \cdot \sqrt{2/3} \cdot \sqrt{2/3}} = +1$$

Vollständig gesetzmässiges Verhalten liefert die maximale Korrelation mit dem Wert $r = 1$.

(2) «konträre Gruppe»: Anna = (6;3), Beat = (5;4), Christine = (4;5) $\Rightarrow \langle x \rangle = 5, \langle y \rangle = 4, \Delta x = \Delta y = \sqrt{2/3}$

$$r_{xy} = \frac{(6-5) \cdot (3-4) + (5-5) \cdot (4-4) + (4-5) \cdot (5-4)}{3 \cdot \sqrt{2/3} \cdot \sqrt{2/3}} = -1$$

Vollständig anti-gesetzmässiges Verhalten liefert die maximale Antikorrelation mit dem Wert $r = -1$.

(3) «typische Gruppe»: Anna = (6;5), Beat = (5;3), Christine = (4;4) $\Rightarrow \langle x \rangle = 5, \langle y \rangle = 4, \Delta x = \Delta y = \sqrt{2/3}$

$$r_{xy} = \frac{(6-5) \cdot (5-4) + (5-5) \cdot (3-4) + (4-5) \cdot (4-4)}{3 \cdot \sqrt{2/3} \cdot \sqrt{2/3}} = +0.5$$

Ein typisches Verhalten liefert eine Korrelation zwischen den Extremen -1 und $+1$; hier ist $r = 0.5$.

Die Beziehung zur Steigung m der bestmöglichen Geraden durch die Punktemenge in der x - y -Ebene und weitere Informationen zu Korrelationen finden Sie im Internet. Wenn die Punkte strukturlos verteilt sind, also nicht Korrelation, sondern Chaos herrscht, gilt $r = 0$, wie das folgende Beispiel zeigt:

(4) «CH»: Anna = (1;1), Beat = (1;5), Christine = (5;1) und Daniel = (5;5); $\langle x \rangle = 3 = \langle y \rangle = 3, \Delta x = \Delta y = 4$

$$r_{xy} = \frac{(1-3) \cdot (1-3) + (1-3) \cdot (5-3) + (5-3) \cdot (1-3) + (5-3) \cdot (5-3)}{4 \cdot 4 \cdot 4} = 0$$

3.8.5 Experimente mit Photonen entscheidet gegen «den gesunden Menschenverstand».

Sobald es realisierbar schien, machten sich die Experimentatoren an die Arbeit. Das Bild zeigt John Clauser ca. 1970 im Labor der UC Berkeley, wo er von seinem Chef die Erlaubnis erhalten hatte, 50% seiner Arbeitszeit für die spekulativen Grundlagen der Quantenphysik und nicht für die «seriöse» Radioastronomie zu verwenden. Clauser benützte dazu Apparaturen seines Vorgängers Carl Kocher, der 2022 keinen Nobelpreis erhielt. Kocher hatte durch Anregung von Kalzium mit UV-Licht jeweils ein Quantensystem aus zwei verschränkten Photonen erzeugt, deren Polarisation er gemessen hat. Clauser, Commins und Freedman verbesserten sowohl die Lichtquelle als auch die Polarisatoren derart, dass der *Experimental Test of Local Hidden-Variable Theories* im Rahmen der Messgenauigkeit klar gegen verborgene Variablen und zugunsten der Quantenmechanik ausfiel.



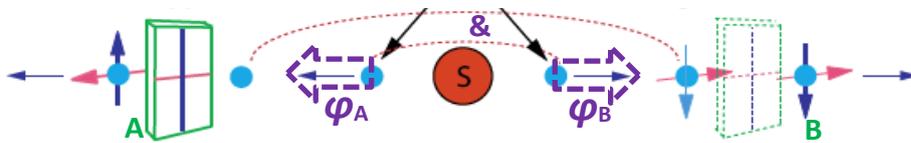
John Clauser

1978 kam Rainold Bertlmann zum CERN und arbeitete dort mit Bell zusammen. Bertlmann liebte es, verschiedenfarbige Socken zu tragen. 1981 schrieb Bell einen Artikel *Bertlmann's socks and the nature of reality*. Darin verglich er den EPR-Effekt mit Bertlmanns Socken: Wenn Bertlmann um eine Ecke kommt und man sieht, dass die Farbe eines Sockens pink ist, dann kann man mit Sicherheit voraussagen, dass der zweite Socken nicht auch pink ist. Allerdings gibt es einen wesentlichen Unterschied zwischen der Natur der Photonen und dieser Veranschaulichung: In der Natur sind beide Socken effektiv grau: vor der Messung haben sie je 50% Wahrscheinlichkeit für beide Farben. Und genau dies ist der Grund dafür, dass man mit Korrelationen arbeiten muss.



QUANTEN-SOCKEN
BERTLMANN'S SOCKEN

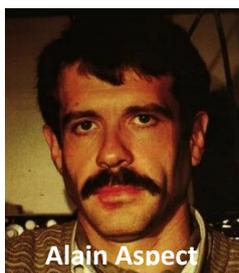
Die Realisierung von EPR-Experimenten mit verschränkten Photonen erfolgt konkret so, wie es in der technischen Erläuterung des Nobelkomitees 2022 gemäss Figur 3.10 dargestellt wird:



FIGUR 3.10: EPR-EXPERIMENT MIT POLARISATIONSMESSUNG AN VERSCHRÄNKTEN PHOTONEN

In der Quelle S werden zwei Photonen gemeinsam erzeugt (blaue Kugeln). Sie bewegen sich auf die beiden Messstellen A und B zu, wobei sie ihre gemeinsame Herkunft nicht vergessen: punktierte, rote Linien; &. Mit einem Polarisator (grün) wird in A die z-Komponente des Spins gemessen. Vor dem Polarisator ist sie unbekannt (grauer Socken). Nach dem Verlassen des Polarisators ist sie up oder down (gelb oder pink). Symbolisch kann man für die Messung und ihre Ergebnisse $S(A_1) = \pm 1$ schreiben. Wenn das Ergebnis up ist (blauer Pfeil), ist sicher das Ergebnis bei B down, auch wenn man es nicht misst. Man könnte nun bei B die x-Komponente des Spins messen und dies als $S(B_2) = \pm 1$ schreiben. Paradoxerweise würde man so die Unbestimmtheitsrelation für den Spin austricksen, die sagt, man könne nicht zugleich die z- und die x-Komponente bestimmen.

Man könnte sich in A aber auch dafür entscheiden, die x-Komponente zu messen und die Ergebnisse als $S(A_2) = \pm 1$ schreiben. Das Pendant dazu ist $S(B_1) = \pm 1$. Mit den vier Ergebnispaares $(A_i; B_j)$ lassen sich aus ihren Werten $(\pm 1; \pm 1)$ Korrelationen ausrechnen. Bells Ungleichungen sind Beziehungen zwischen den Werten dieser Korrelationen. Theorien mit verborgenen Variablen und die Quantenmechanik liefern für diese Korrelationen unterschiedliche Werte.



Alain Aspect

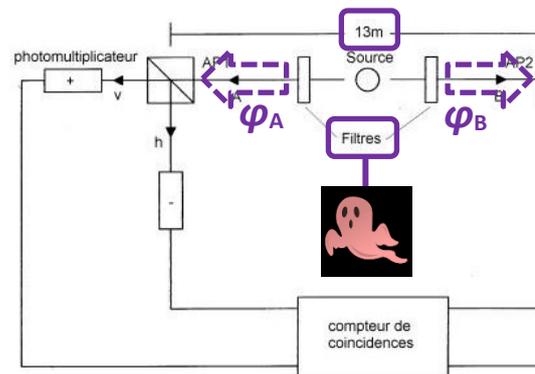
1982 publizierten Aspect, Grangier und Roger die Ergebnisse ihrer Messung mit der Apparatur von Figur 3.11. Sie hatten Clausers Experiment in verschiedener Hinsicht so verbessert, dass die Voraussetzung «zufällig» gut eingehalten werden konnte.

In dieser *Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment* setzten auch sie die EPR-Idee mit Lichtquanten als Quantenobjekte φ_A und φ_B um. Sie konnten verschiedene Polarisationsrichtungen einstellen. A und B waren in den Messstellen 13 m voneinander entfernt.

In dem in Figur 3.11 zur Hälfte wiedergegebenen Schema kann man die Quelle, Filter, die Zustandsfunktionen der beiden Photonen, (nur links) einen Strahlteiler, einen Detektor und die Zähl-Elektronik für Koinzidenzen über 13 m hinweg erkennen.

Aspect et al. kamen auf Grund ihrer Ergebnisse zum Schluss, dass die Quantenmechanik die Wirklichkeit vollständig beschreiben und dass es keine verborgenen Variablen geben könne. Im Original:

*We are thus led to
the rejection of realistic local theories.*



FIGUR 3.11: EXPERIMENT VON ASPECT ET AL.

Aber auch: *Only two loopholes remain for advocates of realistic theories without action at a distance.*

Verschiedene Forscher bemühten sich, mit besseren Experimenten diese Schlupflöcher zu stopfen. Einer von ihnen war Anton Zeilinger (→ 2.3.4). Die Schlupflöcher hatten mit den Einstellungen der Polarisationsfilter von Figur 3.10 zu tun, die in Figur 3.11 einfach Filter heißen. Ihre Einstellungen wurden bei Aspect et al. zwar erst getroffen, nachdem die Photonen schon unterwegs waren, jedoch regelmäßig. Zeilinger et al. gelang es 1998, die Einstellungen α und β der Polarisationsfilter vollkommen zufällig zu wählen und ihren Abstand auf 400 m zu erhöhen, so dass keinerlei Wechselwirkung denkbar war. $E(\alpha, \beta)$ ist der normierte Erwartungswert der Korrelationen der Resultate von A und B:

$$E(\alpha, \beta) = [C_{++}(\alpha, \beta) + C_{--}(\alpha, \beta) - C_{+-}(\alpha, \beta) - C_{-+}(\alpha, \beta)]/N$$

Dabei bedeutet + ein Spin up an diesem Ort und für diese Komponente. Weiter ergibt:

$$\text{Mit verborgenen Variablen: } S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') = |E(\alpha, \beta) - E(\alpha', \beta)| + |E(\alpha, \beta') - E(\alpha', \beta')| \leq 2$$

$$\text{Mit Quantenmechanik bei einer perfekten Apparatur: } S(0^\circ, 45^\circ, 22.5^\circ, 67.5^\circ) = 2\sqrt{2} = 2.82\dots$$

Bells Ungleichungen konkret im Experiment von Zeilinger et al.:

Mit verborgenen Variablen $\Leftrightarrow S \leq 2$. Mit Quantenmechanik und realer Apparatur $\Leftrightarrow S = 2.74$.

Das Experiment von Zeilinger et al. ergab $S = 2.73 \pm 0.02$, also positiv für die Quantenmechanik mit 30 Standardabweichungen, und negativ für die verborgenen Variablen. Die Bilanz bleibt eindeutig:

Das Experiment liefert die erschreckende Folgerung: ***[There is spooky] action at a distance!***
Einsteins Hoffnung erfüllt sich nicht.

John Bell bedauerte das:

So for me, it is a pity that Einstein's idea doesn't work.

The reasonable thing just doesn't work.

Die theoretischen und experimentellen Ergebnisse führen zum aktuellen Erkenntnisstand der Physik:

Theoretischer Befund:

«Die Quantenwelt kann nicht zugleich realistisch und lokal sein.»

Experimentelle Entscheidung:

«Die Quantenwelt ist realistisch, aber nicht lokal. Sie zeigt spukhafte Fernwirkungen.»

«Verschränkung» ist der Fachbegriff für «spukhafte Fernwirkung, die sich aus den Gesetzen der Quantenmechanik ergibt». Verschränkung entzieht sich unserem Vorstellungsvermögen noch stärker als die Dualität. Die offizielle Populär-Darstellung zum Nobelpreis 2022 von zwei verschränkten Quantenobjekten – zwei Kügelchen mit Funken à la Leonardo da Vinci – ist sicher unsinnig. Verschränkte Quantenobjekte sind keine Teilchen mit neuartiger Wechselwirkung, sondern bilden ein verbundenes, unteilbares System, wenn nicht irgendetwas Dekohärenz verursacht.



Das Verhalten von Quantenobjekten wird mit Messgeräten «überprüft», beispielsweise mit dem RTM. Wenn das RTM den Ort eines Atoms misst, entsteht eine Verschränkung zwischen beiden Quantenobjekten. Allgemein: **«Messen» = Verschränkung zwischen Messobjekt und Messgerät herstellen.**

3.8.6 Klassische und Quantenwelt, respektive klassische und quantenphysikalische Weltsicht

In seinem Exil in Oxford schrieb der Nobelpreisträger Schrödinger nicht nur den langen Artikel mit der berühmten Katze und der Definition von «Verschränkung», sondern auch einen Artikel mit dem technisch klingenden Titel «Discussion of probability relations between separated systems». Darin hielt er eine philosophische, bis heute gültige Einschätzung fest:

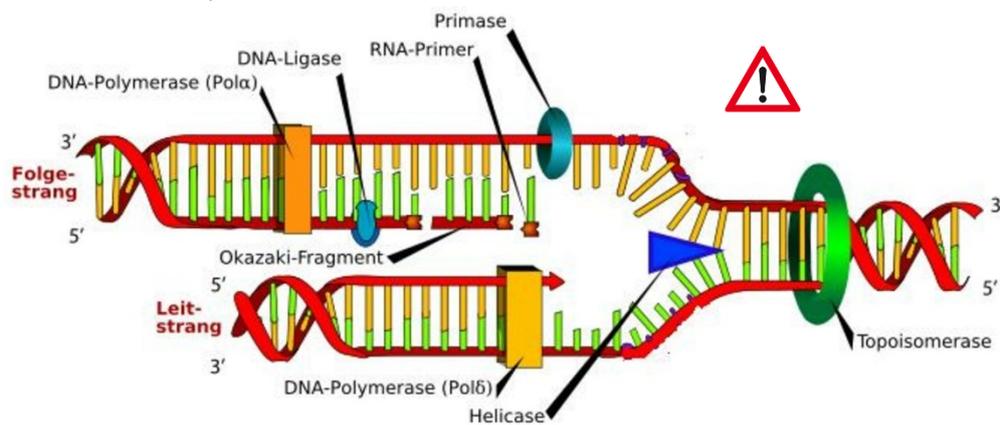
Erwin Schrödinger 1935:

*I would not call [entanglement] one but the characteristic trait of quantum mechanics, the one that enforces its entire **departure from classical lines of thought**.*

Was kennzeichnet «departure from classical lines of thought»? Ein Beispiel: Beim Aufblasen und Spielen mit einem Ballon genügt das klassische Teilchenmodell der Atome. Sie stossen sich untereinander, prallen auf die Gummihaut und beanspruchen insgesamt ein Volumen, das von Druck und Temperatur abhängt. Wird aber das Gas verflüssigt, macht sich das Eigenvolumen der Atome bemerkbar. Die Aufgabe ist dann nicht mehr die Fausts: «erkennen, was die Welt im Innersten zusammenhält», sondern «erkennen, was die Welt vom Zusammensturz abhält». Es ist die Welle-Teilchen-Dualität, die dem Elektron im H-Atom Raum schafft, und es ist die Verschränkung zwischen den Elektronen, die in grösseren Atomen zusammen mit dem Pauli-Prinzip (→ 3.5.3) für Festigkeit sorgt.



Ein anderes Beispiel liefert das Leben. Die Biochemie hat unwahrscheinlich viele Informationen über



Aufbau, Funktionsweise und Duplikation der Erbsubstanz. Man kann sie mit einem klassischen Teilchenbild von Helix-Strängen und passenden Basenpaar-Stäben erfassen.

Jenseits solcher «classical lines of thought», die auf der Stabilität der chemischen Bindungen beruhen, gibt es die quantenmechanische Instabilität die zu spontanen und induzierten Mutationen führen, die teilweise auf dem Tunneleffekt (→ 2.4.4) beruhen. – Nebenbei: Einen Stimulus für die Untersuchung der DNA erhielten Crick und Watson durch Schrödingers Buch «What is life?»

Schrödinger fand, dass quantenmechanische Verschränkung einen dazu zwingt, die «classical lines of thought» komplett zu verlassen. Während heute technische Anwendungen der Verschränkung über grosse Distanzen (1000 km) und mit relativ grossen Massen (70 pg) gelingen, ist bis jetzt nicht sicher, dass Verschränkung auch in den grossen Biomolekülen eine Rolle spielt, denn die Umgebung wirkt in Richtung Dekohärenz.

Wir können hier bilanzieren und dabei Erkenntnisse aus Modul 2 aufnehmen:

**Überall ist «Quantenwelt». Es gilt keine Grenze zwischen Mikro- und Makrokosmos.
Die Quantenphysik gilt immer, macht sich aber nicht immer bemerkbar.**

**«Messung» bedeutet «Verschränkung von Objekt und Messgerät».
Eine Trennung von Messobjekt, Messgerät und Rest des Universums ist unmöglich.**

**Die Wirklichkeit liegt unter einem durchgehenden Schleier,
hinter dem der Zufall wirkt und einen scharfen Blick in die Quantenwelt verunmöglicht.**

WIE IST DIE QUANTENWELT? – BILANZ DES MODULS 3

LEITIDEE 3.1: Der quantenmechanische Zufall äussert sich in Schwankungen.

Radioaktive Atome zerfallen **irgendwann** (mit einer gewissen Ws.) und **nie** (sicher gerade jetzt).

Roadmap 4: Der quantenphysikalische **Zufall** wird beim radioaktiven Zerfall sichtbar, nicht im Zerfallsgesetz $I(t)$, sondern in den **Schwankungen** $\pm\sqrt{I}$ der Zerfallsrate.

LEITIDEE 3.2a: Teilchen- und Wellenaspekt sind komplementär.

Roadmap 5: Dualität erhält einen präzisen Rahmen.

LEITIDEE 3.2b: Über der Natur liegt ein Schleier: x und p sind nicht zugleich scharf bestimmt.

Werner Heisenberg: Die Natur ist unbestimmt: $\Delta x \cdot \Delta p \geq h/4\pi$ und $\Delta E \cdot \Delta t \geq h/4\pi$.

Das Δ hat eine genaue Bedeutung: **Standardabweichung!**

Die Lokalisierung eines Quantenobjekts erfordert **Lokalisierungsenergie**.

LEITIDEE 3.3a: Ein klassisches Teilchen und ein Quantenobjekt verhalten sich im Potentialtopf ganz unterschiedlich.

LEITIDEE 3.3b: ψ erfüllt die Schrödinger-Gleichung, die das betrachtete System beschreibt.

Roadmap 6 Richtige Quantenmechanik \leftrightarrow Schrödinger-Gleichung

Roadmap 7 Verschränkung ist die Präzisierung des Wellenaspekts.

LEITIDEE 3.4a: Quantenobjekte, die einmal in Wechselwirkung standen, bleiben dies bis in beliebige Zeiten und Entfernungen (Einsteins Gespensterfeld).

LEITIDEE 3.4b: Verschränkte QO ermöglichen Quantencomputer, unterliegen aber unvermeidlichen Wechselwirkungen, die Dekohärenz erzeugen.

Roadmap in Richtung Klimathematik:

Planks Strahlungsgesetz liefert die Grundlagen des Energiegleichgewichts.

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für Schwingungen und Rotationen des CO₂-Moleküls als Ganzes führen zu den Energien, welche die Treibhauswirkung dieses Moleküls erklären.

AUS DER PHYSIKGESCHICHTE

bis 1935

QM erklärt
chemische Bindung;
EPR-Paradoxon

um 1960

QM-Anwendungen:
Festkörperphysik,
Hochenergiephysik ...

nach 1975

Grundlegendiskussion:
Verschränkung,
Dekohärenz ...

ERKENNTNISSE ZUM WESEN DER PHYSIK

⑥ Die Irritation, die der quantenphysikalische Zufall bei Einstein und Schrödinger verursacht hatte, führte zum EPR-Papier und zu Schrödingers Katze. Die **Paradoxa** boten Anlass zur **Klärung** von Grundlagen in den Begriffen Verschränkung und Dekohärenz.

⑦ Die Entwicklung von EPR-Paradoxien zur nicht-lokalen Realität und der Quantenkryptographie zeigt, dass reine und angewandte Forschung nicht getrennt werden können.

⑧ Vor 50 Jahren schrieb der Kernphysiker Emilio Segrè: *Die Theorie der Messung in der Quantenmechanik hat Anlass zu langen Diskussionen gegeben, die heute noch nicht ganz abgeschlossen sind.* Diese Aussage gilt unverändert!