

# Inhaltsverzeichnis

1.3	Magnetische Momente, Spin des Elektrons . . . . .	2
1.3.1	Spielereien mit dem Stern Gerlach Magneten . . . . .	8
1.4	Feinstruktur, Spin-Bahn Kopplung . . . . .	11
1.4.1	Kopplung von Drehimpulsen . . . . .	13
1.4.2	Feinstruktur und Hyperfeinstruktur . . . . .	15
1.5	Ununterscheidbare Teilchen, das Heliumatom . . . . .	19
1.5.1	Struktur des Helium Atoms . . . . .	23
1.6	Periodensystem der Atome . . . . .	29
1.10	Molekülphysik . . . . .	50
<b>2</b>	<b>Kern- und Teilchenphysik</b>	<b>57</b>
2.1	Streuexperimente . . . . .	57
2.2	Massenzahl und Bindungsenergie . . . . .	69
2.2.1	Das Tröpfchenmodell der Kernphysik . . . . .	70
2.2.2	Das Schalenmodell der Atomkerne . . . . .	76
2.3	Beta Zerfall . . . . .	85
2.4	Radioaktivität . . . . .	92
2.4.1	Zerfallsketten . . . . .	96
2.4.2	Einheiten zur Quantifizierung von radioaktiver Strahlung . . . . .	97
2.4.3	Natürliche Radioaktivität, Datierungsmethoden . . . . .	98
2.7	Kernspaltung . . . . .	100
2.8	Kernfusion . . . . .	109
2.9	Nukleare Astrophysik . . . . .	118
2.9.1	Entartetes Fermi Gas . . . . .	125
2.9.2	Weisse Zwerge und Neutronensterne . . . . .	127
2.10	Elementarteilchen . . . . .	131
2.10.1	Fundamentale Wechselwirkungen . . . . .	131
2.10.2	Der Zoo der Elementarteilchen . . . . .	136

2.10.3	Heutiges Bild der Elementarteilchen . . . . .	140
<b>3</b>	<b>Festkörperphysik</b>	<b>145</b>
3.3	Fermi Dirac Statistik . . . . .	146
3.6	Bloch Wellen . . . . .	153

### 1.3 Magnetische Momente, Spin des Elektrons

Ein Atom ist ein ideales Beispiel für ein System, bei dem Ladungen, der Atomkern und die Elektronen, und damit auch bewegte Ladungen, also Ströme, auf einem kleinen Raum beschränkt sind. Wenn wir also die magnetischen Eigenschaften von Atomen beschreiben wollen, liegt es nahe, dass wir die bewegten Ladungen der Elektronen oder auch des Atomkerns als eine lokalisierte Stromverteilung auffassen und zunächst einmal das magnetische Dipolmoment dieser Stromverteilung (siehe z.B. Vorlesung Physik 2) bestimmen.

Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass sich das magnetische Dipolmoment einer Stromverteilung  $\vec{j}(\vec{r}')$  berechnet durch das Integral

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2} \int \vec{r}' \times \vec{j}(\vec{r}') d^3r'. \quad (1.1)$$

Für eine elektrische Ladung  $q$ , die sich an der Stelle  $\vec{r}$  mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  bewegt, ergibt sich eine Stromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}') = q\vec{v}\delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

Die  $\delta$ -Funktion bewirkt also, dass die Stromdichte nur am Ort der Ladung  $\vec{r}$  von Null verschieden ist und durch das Produkt aus Ladung und Geschwindigkeit charakterisiert ist. Setzt man nun diesen Ausdruck für die Stromdichte in die Definition (1.1) ein, ergibt sich für das magnetische Dipolmoment dieser bewegten Ladung

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \frac{q}{2} \int \vec{r}' \times \vec{v}\delta(\vec{r} - \vec{r}') d^3r' \\ &= \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{v} \\ &= \frac{q}{2M} \vec{l}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Dabei bezeichnet  $M$  die Masse des geladenen Teilchens und bei dem Übergang zur letzten Zeile dieser Gleichung wurde benutzt, dass der Drehimpuls über

$$\vec{l} = M\vec{r} \times \vec{v}$$

sich aus dem Vektorprodukt des Ortsvektors  $\vec{r}$  mit dem Impulsvektor  $M\vec{v}$  des Teilchens ergibt.

Befindet sich ein solches magnetisches Dipolmoment in einem Magnetfeld  $\vec{B}$ , so ergibt sich je nach der Einstellrichtung des magnetischen Momentes zur Richtung des Magnetfeldes eine potenzielle Energie der Form

$$\Delta V = -\vec{\mu}\vec{B}. \quad (1.3)$$

Es ist energetisch günstiger, die potenzielle Energie ist negativ, wenn sich das magnetische Moment parallel zum Magnetfeld  $\vec{B}$  orientiert. Benutzen wir ein Koordinatensystem, dessen  $z$ -Achse parallel zum Magnetfeld liegt und übernehmen wir aus der Quantenmechanik, dass die  $z$ -Komponente eines Bahndrehimpulses  $l_z$  Eigenwerte (und damit also auch Messwerte) besitzt, die ein ganzzahliges Vielfaches des Wirkungsquantums  $\hbar$  sind

$$l_z = \hbar m, \quad \text{mit } m = -l, -l + 1, \dots, l$$

so ergibt sich für die potenzielle Energie einer bewegten Ladung in einem Magnetfeld

$$\begin{aligned}\Delta V &= -\frac{q}{2M}l_z B \\ &= -\frac{q\hbar}{2M}m B.\end{aligned}\tag{1.4}$$

Bringt man ein Atom, wie etwa das Wasserstoffatom, in ein Magnetfeld, so wird die potenzielle Energie des Elektrons, das sich in einem quantenmechanischen Zustand befindet, der durch die Quantenzahlen  $n$ , die sogenannte radiale Quantenzahl,  $l$  die Quantenzahl für den Betrag des Drehimpulses, und eben  $m$  für die  $z$ -Komponente des Drehimpulses gemäß (1.4) verändert. Die Veränderung  $\Delta V$  hängt natürlich von der Stärke des Magnetfeldes  $B$  ab, von der Quantenzahl  $m$ , die deshalb auch häufig als **magnetische Quantenzahl** bezeichnet wird, und von dem Betrag der Zahl

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2M},\tag{1.5}$$

die man für den Fall, dass  $e$  den Betrag der Elementarladung des Elektrons und  $M$  seine Masse bezeichnet, als **Bohrsches Magneton** definiert. Man sieht aus dieser Abschätzung, dass die magnetischen Effekte eines Atoms durch das Elektron dominiert werden. Hätten wir nämlich das magnetische Moment berechnet, das sich aus der Bewegung des Protons im Atomkern ergeben würde, so müssten wir in (1.5) Ladung und Masse des Protons einsetzen. Die Ladung ist bis auf das Vorzeichen identisch, die Masse des Protons ist aber fast 2000 mal größer als die des Elektrons und deshalb ist der entsprechende Betrag für den Kern  $\mu_K$ , das sogenannte Kernmagneton um einen Faktor von etwa 1/2000 kleiner als das Bohrsche Magneton. Deshalb wollen wir uns auch zunächst auf die magnetischen Eigenschaften beschränken, die mit dem Elektron zusammenhängen.

Setzt man die experimentellen Daten für das Verhältnis  $e/M$  des Elektrons ein (siehe vorhergehenden Abschnitt) so ergibt sich für das Bohrsche Magneton der Wert

$$\mu_B = 9.27 * 10^{-24} \frac{\text{Joule}}{\text{Tesla}} = 0.579 * 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{Tesla}}.\tag{1.6}$$

Würde man also ein Wasserstoffatom in ein Magnetfeld von einem Tesla bringen, das ist schon ein ganz ordentliches Magnetfeld wenn man bedenkt, dass das Erdmagnetfeld lediglich eine Stärke von etwa  $3 * 10^{-5}$  Tesla besitzt, so würde sich die potenzielle Energie des Elektrons lediglich um Werte von der Größenordnung  $0.6 * 10^{-4}$  eV verändern. Dies ist natürlich sehr wenig verglichen mit der Energie von 13.6 eV, mit der ein Elektron im Wasserstoffatom gebunden ist.

Wir halten aber fest, dass das magnetische Moment eines Elektrons  $\vec{\mu}$  mit einem Drehimpuls  $\vec{l}$  über die Beziehung

$$\vec{\mu} = -\mu_B g \frac{\vec{l}}{\hbar}\tag{1.7}$$

miteinander verknüpft sind. Dabei sollte der Fakt  $g$ , das **gyromagnetische Verhältnis**, den wir in diese Beziehung eingeführt haben, nach unseren Überlegungen gerade gleich eins sein.

Eine erste Überprüfung dieser Beziehung erfolgt im Einstein-de Haas Experiment, das in der Abb. 1.1 schematisch dargestellt ist. Dabei wird ein Eisenstab, der in einer Spule

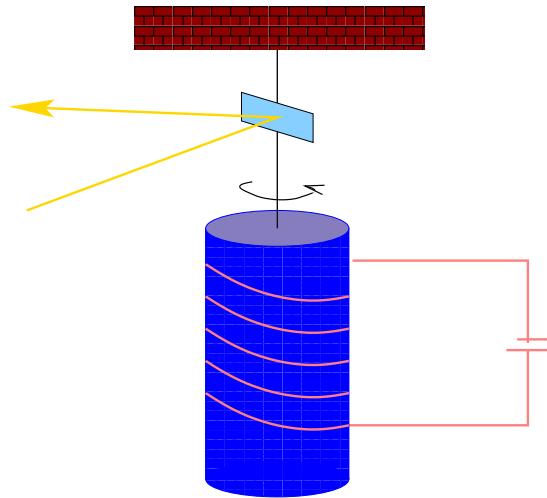


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung des Einstein-de Haas Experimentes

aufgehängt ist, plötzlich ummagnetisiert. Diese Ummagnetisierung kann gemessen werden und ist gegeben durch

$$\Delta M = n\Delta\mu = -n\mu_B g \frac{\Delta l}{\hbar}. \quad (1.8)$$

Dabei steht  $n$  für die Zahl der atomaren Magnete, also der Elektronen, die ja wegen der Größe des Bohrschen Magnetons die magnetischen Eigenschaften dominieren. Die Ummagnetisierung ist also mit einer Änderung des Drehimpulses des gesamten Eisenstabes verknüpft von der Größe

$$\Delta L = n\Delta l. \quad (1.9)$$

Die Änderung des Drehimpulses bewirkt ein Drehmoment, das durch eine Torsion des Aufhängefadens kompensiert wird. Durch die Messung des Drehwinkels bei dieser Torsion des Aufhängefadens (ermöglicht z.B. durch die Messung des Auslenkwinkels eines Lichtstrahls am in der Abb. 1.1 dargestellten Spiegel) wird dieses Drehmoment und damit  $\Delta L$  bestimmt. Aus dem Verhältnis  $\Delta M$  zu  $\Delta L$  lässt sich das gyromagnetische Verhältnis  $g$  bestimmen, ohne dass man die Zahl der Atome  $n$  kennen muss.

Dieses Experiment bestätigt zunächst einmal die Tatsache, dass die atomaren Elementarmagneten mit einem Drehimpuls verknüpft sind. Die Auswertung zeigt aber auch, dass das gyromagnetische Verhältnis  $g$  nicht unbedingt gleich eins sein muss. Ein quantitatives Verständnis dieses gyromagnetischen Verhältnisses setzt ein tieferes Verständnis der Festkörperphysik voraus. Wir wollen hier nur festhalten, dass für bestimmte Materialien (deren Magnetismus durch den Spin und nicht durch den Bahndrehimpuls der Elektronen dominiert wird) das gyromagnetische Verhältnis den Wert  $g = 2$  annimmt.

Aus der Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment und einem externen Magnetfeld ergibt sich eine potentielle Energie nach Gl.(1.3). Für den mit dem magnetischen Moment verbundenen Drehimpuls wäre es also energetisch am günstigsten, wenn sich der Drehimpuls antiparallel zur  $\vec{B}$  einstellen würde. Das ist ganz analog zu einem schweren Kreisel: Auch hier versucht die Erdanziehung, den Kreisel nach unten zu ziehen. Daraus ergibt sich ein Drehmoment, welches zu einer Präzession des Kreisels führt.

Was passiert mit dem magnetischen Moment  $\vec{\mu}$ , das so ausgerichtet ist, dass mit der

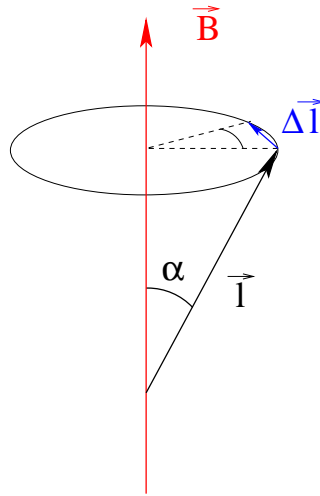


Abbildung 1.2: Vektordiagramm zur Berechnung der Larmor Präzession

Richtung eines Magnetfelds ein Winkel  $\alpha$  gebildet wird (siehe auch Abb. 1.2)? Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass dies ein Drehmoment zur Folge hat der Form

$$\begin{aligned}
 \vec{D} &= \frac{d\vec{l}}{dt} \\
 &= \vec{\mu} \times \vec{B} \\
 &= -\mu_B g \frac{\vec{l} \times \vec{B}}{\hbar} \\
 &= -\hat{e}_\perp \mu_B \frac{g}{\hbar} l B \sin \alpha .
 \end{aligned}$$

Das Drehmoment wirkt also in Richtung des Einheitsvektors  $\hat{e}_\perp$ , der senkrecht zu der von  $\vec{B}$  und  $\vec{l}$  aufgespannten Fläche steht. Dies führt, ganz analog zum schweren Kreisel, ebenfalls zu einer Präzession des Drehimpulses um die Achse der Richtung des Magnetfeldes  $\vec{B}$  mit einer Winkelgeschwindigkeit, der sogenannte **Larmor Frequenz** von

$$\omega = \frac{g\mu_B}{\hbar} B, \quad (1.10)$$

die unabhängig von dem Winkel  $\alpha$  ist.

Klassisch würde eine solche präzedierende Ladungsverteilung eine elektromagnetische Welle abstrahlen, mit einer Frequenz, die genau dieser Larmor Frequenz entspricht. Dabei würde der präzedierende Kreisel langsam so gekippt, dass das magnetische Moment parallel zum externen Magnetfeld orientiert ist und der Zustand niedrigster Energie erreicht ist.

Quantenmechanisch erfolgt diese Orientierung in diskreten Schritten, wobei die sogenannte Magnetquantenzahl  $m$  in Gl.(1.4) in Schritten von  $\Delta m = 1$  so oft reduziert wird, bis der minimale Wert  $l = -m$  erreicht ist. Bei jedem Übergang wird ein Photon mit einer Energie

$$\Delta E = \hbar\omega = g\mu_B B$$

abgestrahlt. Die Frequenz dieser Strahlung entspricht also genau der Larmor Frequenz von (1.10).

Bis zu diesem Punkt haben wir die Eigenschaften der atomaren magnetischen Momente in einem konstanten Magnetfeld betrachtet. Ist die Stärke des Magnetfeldes, das nach wie vor in Richtung  $\hat{e}_z$  orientiert sein soll, aber vom Ort  $\vec{r}$  abhängig, so ergibt sich auch für die Änderung der Potenziellen Energie der magnetischen Dipolmomente in diesem Magnetfeld eine Ortsabhängigkeit (vergl. (1.4))

$$\Delta V(\vec{r}) = \mu_B g m B_z(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad m = -l, \dots, l.$$

Ein solches ortsabhängiges Potenzial  $\Delta V(\vec{r})$  führt zu einer Kraft auf die Elektronen der Form

$$F_z = -\frac{d}{dz}\Delta V(\vec{r}) = -m \mu_B g \frac{dB_z}{dz}$$

deren Betrag und Größe von der Quantenzahl  $m$ , also der Projektionsquantenzahl des Drehimpulses  $\vec{l}$  des Elektrons auf die  $z$ -Achse abhängt. Wird ein Elektron, beziehungsweise das Quasielektron in Form des Silberatoms, im Stern-Gerlach Experiment durch ein inhomogenes Magnetfeld geführt, so erwarten wir eine Aufspaltung des Teilstrahls in  $(2l + 1)$  Komponenten entsprechend der Anzahl der möglichen Werte für  $m$ .

Das überraschende Ergebnis des Stern Gerlach Experimentes war die Tatsache, dass sich 2 Teilstrahlen ausbildeten, also ein Drehimpuls von  $l = 1/2$  vorzuliegen scheint. Im letzten Semester haben wir uns aber überlegt, dass wegen der Eindeutigkeit der Wellenfunktion für einen Bahndrehimpuls nur ganzzahlige Quantenzahlen  $l$  und  $m$  zulässig sind. Das Stern Gerlach Experiment wurde 1921 durchgeführt. Zusammen mit dem Ergebnis des Einstein-de Haas Experimentes, das bereits 1915 durchgeführt worden war, lagen also zu diesem Zeitpunkt 2 rätselhafte Ergebnisse zum atomaren Magnetismus vor, die dadurch gelöst werden konnten, dass man einem Elektron neben seiner Masse und seiner Ladung noch eine intrinsische Eigenschaft, eben den Spin zuordnet.

Dieser Spin verhält sich in mancher Hinsicht wie ein Drehimpuls. So ist auch z.B. mit diesem Spinvektor  $\vec{s}$  ein magnetisches Moment verknüpft allerdings entsprechend (1.7) mit einem gyromagnetischen Verhältnis von  $g = 2$ . Ausserdem ist der Betrag des Spins durch die Quantenzahl  $s = 1/2$  definiert, so dass sich für seine  $z$ -Komponente nur 2 Einstellmöglichkeiten  $m_s = 1/2$  und  $m_s = -1/2$  ergeben.

Häufig versucht man den Spin auch als eine Eigendrehimpuls, also eine Rotation des Elektrons um eine körperfeste Achse darzustellen. Diese Interpretation ist aber falsch. Einerseits wäre auch in diesem Fall ganzzahlige Werte für die Drehimpulsquantenzahlen zu fordern. Andererseits würde bei der Annahme dass der Radius des Elektrons durch den Klassischen Elektronenradius gegeben ist (was ja nach unserer Diskussion im Abschnitt 1.2 eine Überschätzung ist), dies zu Geschwindigkeiten führen, die oberhalb der Lichtgeschwindigkeit liegen, was natürlich nicht mit der Relativitätstheorie verträglich ist.

Eine konsistente Beschreibung des Spins von Elektronen und anderen Elementarteilchen gelang erst 1928, als es dem Theoretiker Paul A.M. Dirac bei seinen Versuchen, die Schrödinger Gleichung mit den Gesetzen der Speziellen Relativitätstheorie zu verknüpfen, gelang eine Gleichung, die **Dirac Gleichung**, zu formulieren, aus der sich sowohl die Eigenschaften des Spins ergeben als auch insbesondere die Erklärung für ein anomales gyromagnetische Verhältnis von  $g = 2$ .

Kehren wir aber zurück zu einer einfachen mathematischen Beschreibung des Spins. Dieser Spin des Elektrons ist charakterisiert durch die Quantenzahlen  $s = 1/2$  und  $m_s = \pm 1/2$ .

Wir haben also zwei Eigenzustände mit den Eigenschaften

$$\hat{s}^2|s, m_s\rangle = \hbar^2 s \left(s + \frac{1}{2}\right) |s, m_s\rangle = \hbar^2 \frac{3}{4} |s, m_s\rangle \quad \text{und} \quad s_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle. \quad (1.11)$$

Es liegt nahe, diese beiden Basiszustände des Hilbertaumes der Spinzustände mit

$$|s, +\frac{1}{2}\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |s, -\frac{1}{2}\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

darzustellen. In dieser Darstellung der Ket Vektoren durch Spaltenvektoren ergibt sich für den Operator  $\hat{s}_z$  die Matrixdarstellung

$$\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad \text{mit} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Man kann sich leicht von der Gültigkeit dieser Darstellung dadurch überzeugen, dass man mit der gewählten Darstellung die Eigenwertgleichungen für  $\hat{s}_z$  in (1.11) verifiziert.

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass die Spinoperatoren  $\hat{s}_x$  und  $\hat{s}_y$  in dieser Darstellung durch

$$\begin{aligned} \hat{s}_x &= \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad \text{mit} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{s}_y &= \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad \text{mit} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.14)$$

gegeben sind. Die  $2 \times 2$  Matrizen  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  und  $\sigma_z$  tragen den Namen Pauli'sche Spinmatrizen und sind nach dem Physiker und Nobelpreisträger Wolfgang Pauli (1900 - 1958) benannt.

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass die in (1.14) definierten Spin-Operatoren hermitesch sind. So gilt ja z.B.

$$\sigma_y^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^{t*} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}^* = \sigma_y.$$

In der Matrixdarstellung ergibt sich ja die Matrix des adjungierten Operators  $\sigma_y^\dagger$  durch Transponieren ( $t$ ) und komplex konjugieren (\*).

Ausserdem erfüllen die Spinoperatoren die Kommutatorrelationen, wie sie auch durch die entsprechenden Drehimpulsoperatoren gefordert sind, wie z.B.:

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= \frac{\hbar^2}{4} \{\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x\} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \\ &= 2 \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \\ &= i \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= i \hbar \hat{s}_z. \end{aligned}$$



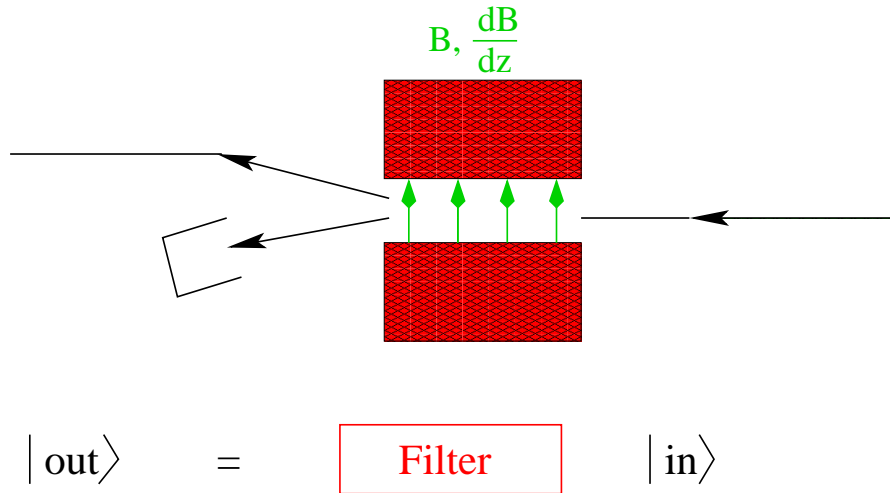


Abbildung 1.3: Stern Gerlach Magnet als Filter für Elektronen mit Spinprojektion  $+1/2$

Ausserdem betrachten wir den Operator

$$\begin{aligned}
 \hat{s}^2 &= \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 \\
 &= \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^2 \right\} \\
 &= \frac{\hbar^2}{4} 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Die Spinzustände sind also Eigenzustände zu diesem Operator  $\hat{s}^2$  mit dem richtigen Eigenwert von (1.11).

### 1.3.1 Spielereien mit dem Stern Gerlach Magneten

In diesem Teilabschnitt sollen einige Gedankenexperimente mit dem Stern-Gerlach Magneten diskutiert werden und mit der gerade eingeführten Nomenklatur für die Spin-Zustände beschrieben werden. Dazu betrachten wir erst einmal einen Experimentaufbau mit einem Stern-Gerlach Magneten, wie er in Abb. 1.3 dargestellt ist.

Der von rechts einlaufende Strahl von Elektronen<sup>1</sup> ist nicht polarisiert und enthält Elektronen mit einer Spinprojektion parallel ( $m_s = 1/2$ ) und antiparallel ( $m_s = -1/2$ ) zur Richtung des Magnetfeldes, die die  $z$ -Achse definiert. Durch das inhomogene Magnetfeld wird der Elektronenstrahl in zwei Teilstrahlen aufgespalten und wir führen den Teilstrahl der Elektronen mit  $m_s = -1/2$  in einen Faraday Becher, so dass nur noch Elektronen mit der Spinprojektion  $m_s = 1/2$  weitergeführt werden.

Mit dieser Anordnung ist der Stern Gerlach Magnet also ein Spin-Filter oder ein Polarisator für den Elektronenspin in  $z$ -Richtung. Wir können diese Funktion des Polarisators

<sup>1</sup>Wir wissen natürlich, dass das Stern Gerlach Experiment mit neutralen Atomen wie etwa einem Silberatom durchgeführt wird. Trotzdem wollen wir an dieser Stelle von Elektronen sprechen, da ja der Spin des Elektrons die entscheidende Rolle spielt.

in der theoretischen Darstellung durch einen Projektionsoperator  $\mathcal{P}_z$  beschreiben in der Form

$$\mathcal{P}_z = |m_s = 1/2\rangle\langle m_s = 1/2|. \quad (1.15)$$

Wendet man nämlich diesen Operator auf einen eingehenden Zustand  $|in\rangle$  an, so gilt

$$|out\rangle = \mathcal{P}_z|in\rangle = |m_s = 1/2\rangle\langle m_s = 1/2|in\rangle.$$

Der Ergebniszustand  $|out\rangle$  ist ein Vektor des Hilbertraumes in Richtung des Basisvektors  $|m_s = 1/2\rangle$  mit einer Amplitude, die durch das Skalarprodukt von  $|m_s = 1/2\rangle$  mit dem eingehenden Zustand gegeben ist. Stellen wir diesen Operator in der Basis von (1.12) dar, so ist der Ket Vektor  $|m_s = 1/2\rangle$  durch den Spaltenvektor mit Komponenten 1 und 0 gegeben und der zugehörige Bra Vektor  $\langle m_s = 1/2|$  durch den entsprechenden Zeilenvektor (mit komplex konjugierten Elementen, was natürlich in diesem Fall redundant ist), so ergibt sich der Projektionsoperator zu

$$\mathcal{P}_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Wenn man also einen einkommenden Elektronenstrahl hat, bei dem die Elektronen mit der Wahrscheinlichkeitsamplitude  $\alpha$  eine positive Spinprojektion besitzt und mit der Amplitude  $\beta$  eine negative (damit der Zustand normiert ist sollte gelten:  $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ ) so ist dieser eingehende Strom von Elektronen durch den Vektor

$$|in\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

beschrieben, und die Anwendung des Stern Gerlach Filters wird durch die Operation

$$\begin{aligned} |out\rangle &= \mathcal{P}_z|in\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

mathematisch beschrieben: Der auslaufende Elektronenstrahl besitzt die Wahrscheinlichkeitsamplitude 0 für Elektronen mit Spin  $m_s = -1/2$ , ist also zu 100 Prozent polarisiert. Wir sehen an diesem Beispiel sehr deutlich, wie die Durchführung eines Experimentes durch die Anwendung eines Operators auf einen Zustand dargestellt wird.

Natürlich ist es nutzlos, den aus dem Stern-Gerlach Filter auslaufenden Teilchenstrahl noch einmal durch einen identischen Filter laufen zu lassen. Mathematisch äußert sich diese Tatsache, dass ein wiederholtes Anwenden des Filters das gleiche Ergebnis erzielt wie ein einmaliges Anwenden darin, dass gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_z^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathcal{P}_z, \end{aligned} \quad (1.18)$$

eine Beziehung, die Projektionsoperatoren definiert.

Natürlich kann aber auch daran denken einen Stern-Gerlach Filter um 90 Grad zu drehen um so einen Filter bezüglich der  $y$ -Komponente zu erhalten. Wie sieht die mathematische Darstellung eines solchen Filters in  $y$ -Richtung aus?

Zur Konstruktion des entsprechenden Operators  $\mathcal{P}_y$  vergewissern wir uns, dass der Zustand

$$|m_s^y = 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

ein normierter Eigenzustand zum Operator  $\hat{s}_y$  mit dem Eigenwert  $\hbar/2$  ist. Wir benutzen dazu einfach die Darstellung dieses Operators aus (1.14) und berechnen

$$\begin{aligned} \hat{s}_y |m_s^y = 1/2\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} |m_s^y = 1/2\rangle. \end{aligned}$$

Analog zu (1.15) ergibt sich also für

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_y &= |m_s^y = 1/2\rangle \langle m_s^y = 1/2| \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Was erhalten wir also, wenn wir hinter den ersten Stern-Gerlach Filter in  $z$ -Richtung einen zweiten in  $y$ -Richtung aufstellen? Mathematisch erhalten wir das Resultat dadurch, dass wir den Operator  $\mathcal{P}_y$  auf das Ergebnis von (1.17) anwenden also

$$\begin{aligned} |out_2\rangle &= \mathcal{P}_y |out\rangle \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{2} \\ \frac{i\alpha}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Man erhält einen auslaufenden Strahl, dessen Elektronen mit gleicher Wahrscheinlichkeit ihren Spin parallel und antiparallel zur  $z$ -Achse orientiert haben.

Dieses Ergebnis ist auf dem ersten Blick überraschend. Naiv würde man sagen, dass der erste Filter nur Elektronen mit positivem  $s_z$  durchlässt und der zweite nur solche mit positivem  $s_y$ . Der auslaufende Strahl enthielte also nur Elektronen für die  $s_z$  und  $s_y$  positiv sind. Bei dieser Argumentation ignoriert man aber die Tatsache, dass der Kommutator von  $\hat{s}_y$  mit  $\hat{s}_z$  ungleich Null ist. Die beiden Observablen  $s_z$  und  $s_y$  können also nicht gleichzeitig bestimmt sein. In der Tat zerstört der zweite Filter, bei dem die Orientierung des Spins bezüglich der  $y$ -Achse ausgewertet wird, das Ergebnis der ersten Polarisation. Ein entsprechendes Experiment würde das Ergebnis von (1.21) bestätigen.

## 1.4 Feinstruktur, Spin-Bahn Kopplung

Zu Beginn dieses Abschnitts wollen wir uns noch einmal einige zentrale Ergebnisse aus der Diskussion der stationären Lösungen für die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms in Erinnerung rufen, wenn dabei lediglich die Coulomb Wechselwirkung zwischen dem Proton des Atomkerns und dem Elektron berücksichtigt wird. Wir haben dazu in der Vorlesung Physik III gesehen, dass die stationäre Schrödinger Gleichung in der Form dargestellt werden kann

$$\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} |n, l, m_l, s, m_s\rangle = E_n |n, l, m_l, s, m_s\rangle \quad \text{mit } E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2} Z^2, \quad (1.22)$$

wobei  $Z$  die Kernladungszahl ist, was uns erlaubt auch die Bewegung eines Elektrons um einen Atomkern mit  $Z$  Protonen zu beschreiben. Die Energien hängen also allein von der Hauptquantenzahl  $n = 1, 2, \dots$  ab. Für eine gegebene Hauptquantenzahl gibt es Zustände mit der Bahndrehimpulsquantenzahl  $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$  und für jedes  $l$  wiederum Zustände mit  $m_l = -l \dots l$ . Ausserdem können wir die Eigenzustände noch mit den Spinquantenzahlen  $s = 1/2$  und  $m_s = \pm 1/2$  für das Elektron charakterisieren.

Nach der klassischen Vorstellung für einen Zustand mit solchen Quantenzahlen kreist das Elektron mit einem Bahndrehimpuls von  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$  um den Atomkern. Aus der Sicht des Elektrons stellt sich diese Bewegung so dar, als ob das Proton des Atomkerns um das Elektron kreisen würde. Dies ganz in Analogie zur Planetenbewegung im Sonnensystem: Aus unserer Sicht scheint ja die Erde um die Sonne zu kreisen, obwohl natürlich die Bewegung der Erde auf einer Kreisbahn um die Sonne ein etwas realistischeres Bild ist.

Das Elektron "sieht" sich also von dem Kreisstrom einer Kernladung  $Ze$  an der Stelle  $\vec{r}_{eZ}$ , das ist der Ortsvektor der Kernladung ausgehend vom Koordinatenursprung am Ort des Elektrons, mit einer Geschwindigkeit  $\vec{v}$  umgeben. Ein solcher Strom bewirkt am Koordinatenursprung, also am Ort des Elektrons, nach dem Biot-Savartschen Gesetz ein Magnetfeld der Form

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \frac{Ze\mu_0}{4\pi r_{eZ}^3} [\vec{v} \times \vec{r}_{eZ}] \\ &= \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{v} \times (-\vec{r})] \\ &= \frac{Ze\mu_0}{4\pi r^3} \frac{1}{M} \vec{l}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile haben wir ausgenutzt, dass der Ortsvektor des Kerns aus der Sicht des Elektrons,  $r_{eZ}$  bis auf das Vorzeichen dem Ortsvektor  $\vec{r}$  des Elektrons im kernfesten Koordinatensystem entspricht. Das Biot-Savartsche Gesetz liefert nach (1.23) ein Magnetfeld am Ort des Elektrons, das proportional zu seinem Drehimpuls  $\vec{l}$  ist. Bei der Rücktransformation auf das Ruhesystem des Atoms ergibt sich noch ein weiterer Faktor  $1/2$ , der sogenannte **Thomas Faktor**, der nur in einer umfangreichen relativistischen Betrachtung begründet werden kann. Die Wechselwirkung des mit dem Elektronenspin verknüpften magnetischen Momentes (siehe (1.7)) mit diesem Magnetfeld liefert einen magnetischen Beitrag zur potenziellen Energie der Form

$$\Delta V_{ls} = -\vec{\mu}_s \vec{B}$$

$$= - \left( -\frac{\mu_B}{\hbar} g \right) \frac{Ze\mu_0}{8\pi r^3} \frac{1}{M} \vec{l} \cdot \vec{s}. \quad (1.24)$$

Die atomaren Ströme sind sehr klein, das gleiche gilt aber auch für die Abstände ( $r$ ), so dass die auftretenden Magnetfelder doch von der Größenordnung von etwa einem Tesla sind. Berücksichtigt man, dass das Bohrsche Magneton  $\mu_B$  einen Wert von etwa  $0.5 \cdot 10^{-4}$  eV/Tesla aufweist, so ergibt sich für den Betrag des magnetischen Korrekturterms in (1.24) die Abschätzung

$$|\Delta V_{ls}| \sim 10^{-4} \text{ eV}.$$

Verglichen mit den Energien durch das Coulombfeld in (1.22) ist diese Energiekorrektur sehr klein und es liegt nahe, die entsprechende Korrektur im Hamiltonoperator als kleine Störung aufzufassen.

Die Behandlung von solchen Störungen, die sogenannte **Störungstheorie** ist ein sehr umfangreiches Kapitel der Quantenmechanik. An dieser Stelle wollen wir lediglich die “Rechenregeln” für die einfachste Behandlung betrachten: der **Störungstheorie 1. Ordnung**. Diese Regeln können angewandt werden, wenn ein Hamiltonoperator der Form

$$H = H_0 + \Delta V, \quad (1.25)$$

vorliegt. Dabei sollen die Lösungen für den ungestörten Operator  $H_0$  bekannt sein

$$H_0|n, i\rangle = \varepsilon_n|n, i\rangle,$$

wobei sich die Quantenzahl  $i$  auf unterschiedliche stationäre Lösungen bezieht bezüglich derer die Energieeigenwerte  $\varepsilon_n$  entartet sind. Die Störungstheorie ist dann eine gute Näherung, wenn die Matrixelemente der Störung  $\Delta V$  klein sind im Vergleich zu den Energiedifferenzen des ungestörten Hamiltonoperators, also

$$|\langle n, i' | \Delta V | n, i \rangle| \ll |\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}|. \quad (1.26)$$

In diesem Fall kann man die Einfluss des Störterms  $\Delta V$  auf die Energieeigenwerte von  $H = H_0 + \Delta V$  dadurch abschätzen, dass man die Matrix der Störung

$$\langle n, i' | \Delta V | n, i \rangle,$$

im Unterraum der zu einer Energie  $\varepsilon_n$  entarteten Zustände diagonalisiert. Die Eigenwerte liefern die Energiekorrekturen und die Eigenvektoren sind die angepassten stationären Zustände.

Im Fall des Wasserstoffatoms sind die zu einem Energiewert  $\varepsilon_n$  entarteten Zustände durch die Quantenzahlen  $l$ ,  $m_l$  und  $m_s$  (siehe (1.22)) beschrieben und die Abschätzung (1.26) ist sehr gut erfüllt. Die Aufgabe der Störungstheorie erster Ordnung besteht also darin, den Korrekturterm zu diagonalisieren in der Basis

$$\langle n, l, m_l, m_s | \Delta V_{ls} | n, l', m_l', m_s' \rangle = \langle n, l, m_l, m_s | \chi \vec{l} \cdot \vec{s} | n, l', m_l', m_s' \rangle. \quad (1.27)$$

Dabei haben wir die Darstellung von  $\Delta V_{ls}$  komprimiert um die Abhängigkeit von den Drehimpulsen  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  herauszustellen.

Bevor wir nun diese Diagonalisation etwas genauer betrachten, wollen wir das Vorzeichen des Korrekturterms abschätzen. Da der Faktor  $\chi$  ein positives Vorzeichen besitzt, erwarten wir also, dass

$$\langle \chi \vec{l} \cdot \vec{s} \rangle \begin{cases} > 0 & \text{wenn } \vec{l} \text{ und } \vec{s} \text{ parallel zueinander} \\ < 0 & \text{wenn } \vec{l} \text{ und } \vec{s} \text{ antiparallel zueinander stehen} \end{cases} \quad (1.28)$$

### 1.4.1 Kopplung von Drehimpulsen

Für eine genauere Bestimmung definieren wir einen neuen Vektoroperator, den Gesamtdrehimpuls eines Elektrons durch

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}. \quad (1.29)$$

Diese Definition ist so zu verstehen, dass wir einen Operator

$$\hat{j}_x = \hat{l}_x + \hat{s}_x,$$

definieren und entsprechende Definitionen für die  $y$  und  $z$ -Komponente einführen. Diese Operatoren  $\hat{j}_x, \hat{j}_y$  und  $\hat{j}_z$  bezeichnet man mit Recht als Drehimpulsoperatoren, denn sie sind hermitesch und besitzen die Kommutatorrelationen von Drehimpulsoperatoren. Als Beispiel sei ausgeführt

$$\begin{aligned} [\hat{j}_x, \hat{j}_y] &= [(\hat{l}_x + \hat{s}_x), (\hat{l}_y + \hat{s}_y)] \\ &= [\hat{l}_x, \hat{l}_y] + \underbrace{[\hat{l}_x, \hat{s}_y]}_{=0} + \underbrace{[\hat{s}_x, \hat{l}_y]}_{=0} + [\hat{s}_x, \hat{s}_y] \\ &= i\hbar\hat{l}_z + i\hbar\hat{s}_z \\ &= i\hbar\hat{j}_z. \end{aligned}$$

Der Kommutator zwischen einem Bahndrehimpulsoperator und einem Spinoperator, also z.B.  $[\hat{l}_x, \hat{s}_y]$  in der zweiten Zeile dieser Gleichung ist identisch null, da die Operatoren  $\hat{l}_x$  und  $\hat{s}_y$  auf unabhängige Faktoren des quantenmechanischen Zustandes eines Elektrons wirken. Der Bahndrehimpulsoperator wirkt in der Ortsdarstellung des Zustandes  $|n, l, m_l, m_s\rangle$  auf die Wellenfunktion  $\Phi_{nlm_l}$ , während der Spinoperator auf die Spinfunktion  $|s, m_s\rangle$  wirkt, die wir ja nach den Ausführungen im vorausgehenden Abschnitt durch einen Spaltenvektor der Dimension 2 darstellen können. Wenn Bahndrehimpuls- und Spinoperatoren aber auf unterschiedliche Faktoren des Gesamtzustandes wirken, dann ist es auch gleich, in welcher Reihenfolge sie angewendet werden, was ja bedeutet, dass der Kommutator identisch null ist. Wir betrachten das Quadrat dieses Gesamtdrehimpulses

$$\vec{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$$

und können uns davon überzeugen, dass die folgenden Kommutatoren identisch Null sind

$$[\vec{j}^2, \hat{j}_z] = [\vec{j}^2, \vec{l}^2] = [\vec{j}^2, \vec{s}^2] = 0, \quad (1.30)$$

während z.B.

$$[\vec{j}^2, \hat{l}_z] \neq 0 \quad \text{und} \quad [\hat{j}_z, \vec{l}^2] \neq 0. \quad (1.31)$$

Aus diesen Gleichungen wird deutlich, dass es ein gemeinsames Eigenfunktionssystem gibt zu den Operatoren  $\vec{l}^2$ ,  $\vec{s}^2$ ,  $\vec{j}^2$  und  $\hat{j}_z$ . Wir bezeichnen diese Eigenfunktionen durch die jeweiligen Quantenzahlen:

$$\begin{aligned} \vec{l}^2 |l, s, j, m_j\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, s, j, m_j\rangle \\ \vec{s}^2 |l, s, j, m_j\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |l, s, j, m_j\rangle \\ \vec{j}^2 |l, s, j, m_j\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |l, s, j, m_j\rangle \\ \hat{j}_z |l, s, j, m_j\rangle &= \hbar m_j |l, s, j, m_j\rangle. \end{aligned} \quad (1.32)$$

$m_l$	$m_s$	$m_j = m_l + m_s$	mögliche $j$
-1	-1/2	-3/2	3/2
-1	+1/2	-1/2	3/2 oder 1/2
0	-1/2	-1/2	3/2 oder 1/2
0	1/2	1/2	3/2 oder 1/2
1	-1/2	1/2	3/2 oder 1/2
1	1/2	3/2	3/2

Tabelle 1.1: Basiszustände für ein Elektron mit  $l = 1$  und Spin  $s = 1/2$ .

Dies ist also eine alternative Basis, die wir als Basis der zu  $j$  gekoppelten Zustände bezeichnen, zur Basis der Eigenzustände der Operatoren  $\vec{l}^2$ ,  $\vec{s}^2$ ,  $\hat{l}_z$  und  $\hat{s}_z$ :

$$|l, m_l, s, m_s\rangle, \quad (1.33)$$

die wir hier als ungekoppelte Basis bezeichnen wollen. Natürlich gibt es eine Transformation von der einen in die andere Basis etwa in der Form

$$|l, s, j, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} |l, m_l, s, m_s\rangle \underbrace{\langle l, m_l, s, m_s | l, s, j, m_j \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan Koeff.}}, \quad (1.34)$$

oder auch in umgekehrter Weise

$$|l, m_l, s, m_s\rangle = \sum_{j, m_j} |l, s, j, m_j\rangle \underbrace{\langle l, s, j, m_j | l, m_l, s, m_s \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan Koeff.}}. \quad (1.35)$$

Die Transformationskoeffizienten bezeichnet man als Clebsch-Gordan Koeffizienten.

Wir wollen hier nicht auf die Details dieser Clebsch-Gordan Transformation eingehen, sondern die Transformation und ihre generellen Regeln an einem Beispiel verdeutlichen. Dazu betrachten wir den Fall der Zustände mit  $l = 1$  und  $s = 1/2$ .

In der Tabelle 1.1 sind die 6 Kombinationen von Quantenzahlen für  $m_l$  und  $m_s$  aufgeführt. Da der Operator  $\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$  ist, muss für die Quantenzahl zum Operator  $\hat{j}_z$  gelten

$$m_j = m_l + m_s. \quad (1.36)$$

Wir sehen also, dass der minimale Wert für  $m_j$  in unserem Beispiel der Wert  $m_j = -3/2$  ist. Dies bedeutet aber, dass wir gekoppelte Zustände mit  $j = 3/2$  erwarten können, denn  $m_j$  muss ja Werte von  $-j$  bis  $j$  einnehmen können. Damit können wir also schon einen Unterraum der Dimension  $2 * j + 1 = 4$  den Zuständen mit  $j = 3/2$  zuordnen. Im Beispiel der Zustände, die in Tabelle 1.1 aufgelistet sind, verbleiben also noch 2 Zustände mit  $m_j = \pm 1/2$  die wir dann als Zustände mit einem Gesamtdrehimpuls von  $j = 1/2$  identifizieren können.

Insbesondere können wir z.B. identifizieren (hier und im folgenden werden wir darauf verzichten, die Quantenzahlen  $l = 1$  und  $s = 1/2$  aufzuführen):

$$|j : 3/2, m_j : -3/2\rangle = |m_l : -1, m_s : -1/2\rangle,$$

die Transformation (1.34) ist also in diesem Fall trivial und beschränkt sich auf einen Summanden. Ein wenig komplizierter ist der Fall für

$$|j : 3/2, m_j : -1/2\rangle = \alpha|m_l : -1, m_s : +1/2\rangle + \beta|m_l : 0, m_s : -1/2\rangle,$$

mit zwei Summanden in der Transformation. Die Koeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  sind Clebsch-Gordan Koeffizienten und haben den Wert

$$\begin{aligned}\alpha &= \langle m_l : -1, m_s : 1/2 | j : 3/2, m_j : -1/2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \beta &= \langle m_l : 0, m_s : -1/2 | j : 3/2, m_j : -1/2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}.\end{aligned}$$

Wir wollen an dieser Stelle nicht weiter darauf eingehen, wie man die Clebsch-Gordan Koeffizienten berechnet, sondern lediglich vermerken, dass sich bei der Kopplung von 2 Drehimpulsen, wie etwa  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  zu  $\vec{j}$ , Auswahlregeln zu beachten sind in der Form (Vergleiche (1.36))

$$\begin{aligned}m_j &= m_l + m_s \\ |l - s| &\leq j \leq l + s.\end{aligned}\tag{1.37}$$

## 1.4.2 Feinstruktur und Hyperfeinstruktur

Nach diesem Ausflug in die Technik der Kopplung von zwei Drehimpulsen, werden wir sehen, dass die Basis der gekoppelten Zustände, die geeignete Basis für die Berechnung des Spin-Bahn Terms (1.24) darstellt. Dazu berechnen wir den Operator  $\vec{j}^2$

$$\vec{j}^2 = (\vec{l} + \vec{s})^2 = \vec{l}^2 + \vec{s}^2 + 2\vec{l} \cdot \vec{s},$$

und lösen diese Gleichung auf nach dem Operatorprodukt

$$\vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{\vec{j}^2 - \vec{l}^2 + \vec{s}^2}{2}.\tag{1.38}$$

Ein Eigenzustand zu den Operatoren  $\vec{j}^2$ ,  $\vec{l}^2$  und  $\vec{s}^2$ , und das gilt ja für den gekoppelten Zustand, ist also auch Eigenzustand zum Operator  $\vec{l} \cdot \vec{s}$  mit dem Eigenwert

$$\vec{l} \cdot \vec{s} |l, s, j, m_j\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left( j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \frac{3}{2} \right) |l, s, j, m_j\rangle.\tag{1.39}$$

Wenn wir also den Erwartungswert des Spin-Bahnterms  $\chi \vec{l} \cdot \vec{s}$  für die gekoppelten Zustände eines  $p$  Niveaus (also  $l = 1$ ) ausrechnen, so ergeben sich für die Zustände, charakterisiert durch die Bezeichnung  $p_j$ , die folgenden Korrekturen

$$\begin{aligned}p_{3/2} : \quad &\langle l : 1, j : 3/2, m_j | \chi \vec{l} \cdot \vec{s} | l : 1, j : 3/2, m_j \rangle = \hbar^2 \chi \frac{1}{2} \\ p_{1/2} : \quad &\langle l : 1, j : 1/2, m_j | \chi \vec{l} \cdot \vec{s} | l : 1, j : 1/2, m_j \rangle = -\hbar^2 \chi.\end{aligned}\tag{1.40}$$



Durch die Spin-Bahn Wechselwirkung wird also der  $p_{1/2}$  Zustand abgesenkt und der  $p_{3/2}$  Zustand angehoben in der Energie, und zwar so, dass der Schwerpunkt, also die Energiekorrektur gewichtet mit der Entartung der Zustände  $(2j + 1)$  erhalten bleibt. Das Vorzeichen dieser Energiekorrektur stimmt natürlich mit der Abschätzung aus (1.28) überein.

Wir haben bereits diskutiert, dass die Energieverschiebungen durch diesen Spin-Bahn Term sehr klein sind (von der Größenordnung  $10^{-4}$  eV). Es zeigt sich, dass die Effekte der relativistischen Kinematik von der gleichen Größenordnung sind. Eine Quelle dieser relativistischen Effekte liegt in dem Ausdruck für die kinetische Energie eines freien Elektrons der Masse  $M$  und mit dem Impuls  $p$ :

$$\begin{aligned}\sqrt{M^2c^4 + c^2p^2} &= Mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{M^2c^2}} \\ &= Mc^2\left(1 + \frac{1}{2}\frac{p^2}{M^2c^2} - \frac{1}{8}\left(\frac{p^2}{M^2c^2}\right)^2 + \dots\right) \\ &= Mc^2 + \frac{p^2}{2M} - \frac{p^4}{8M^3c^4} + \dots\end{aligned}\quad (1.41)$$

Für kleine Impulse ist der Quotient  $p^2/M^2c^2$  klein gegenüber 1 und man kann die Entwicklung der Wurzel beim Übergang von der ersten Zeile zur zweiten Zeile nach den führenden Gliedern abbrechen. Dies zeigt, dass in dem Grenzfall kleiner Impulse die relativistische kinetische Energie übergeht in eine Konstante, die Ruhenergie des Elektrons  $Mc^2$ , plus die nicht-relativistische kinetische Energie plus Korrekturen der Ordnung  $p^4$  und höher. Diese relativistischen Korrekturen sind im Fall des Wasserstoffatoms von gleicher Größenordnung wie die Spin-Bahn Wechselwirkung.

Eine konsistente Zusammenfassung dieser relativistischen Effekte, des Spins und der Spin-Bahn Wechselwirkung erfolgt in der relativistischen Verallgemeinerung der Schrödinger Gleichung für Teilchen mit Spin 1/2: der **Dirac Gleichung**. Eine Lösung der Dirac Gleichung für das Wasserstoffatom führt zu stationären Lösungen mit Energieeigenwerten der Form:

$$E_{nlj} = \frac{E_0}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\}. \quad (1.42)$$

Dabei bezeichnet  $E_0 = -13.6$  eV das nichtrelativistische Ergebnis für das Wasserstoffatom im Grundzustand und

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

ist die Feinstrukturkonstante. Die Energieeigenwerte aus der Dirac Gleichung zeigen also für das Wasserstoffatom eine  $j$  Entartung, d.h.: Zustände mit verschiedenem Bahndrehimpuls  $l$  aber gleichem  $j$  haben die selbe Energie.

Ergänzen wollen wir diesen Abschnitt durch eine erste Bemerkung über die **Hyperfine-wechselwirkung**. Auch der Atomkern besitzt in der Regel einen Spin und damit verknüpft ein magnetisches Moment. Im Fall des Wasserstoffatoms ist der Atomkern ein Proton mit dem Spin  $\vec{I}$  vom Betrag  $I = 1/2$ . Das zugehörige magnetische Moment ergibt sich in Analogie zu (1.7) zu

$$\vec{\mu}_{\text{Proton}} = g_p \mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar}. \quad (1.43)$$

Im Vergleich zu (1.7) fehlt ein  $-$  Zeichen, da die Ladung des Protons im Gegensatz zu der des Elektrons positiv ist, und das Bohrsche Magneton  $\mu_B$  ist ersetzt durch das Kernmagneton

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2M_p} = \frac{M}{M_p}\mu_B \approx \frac{1}{1836}\mu_B \quad (1.44)$$

das um etwa den Faktor 2000 kleiner ist, da die Masse des Protons  $M_p$  entsprechend größer ist als die Masse des Elektrons  $M$ . Der  $g$ -Faktor des Protons ist anormal und besitzt den Wert

$$g_P \approx 5.58$$

ist also noch anormaler als der Wert für den Elektronenspin ( $g = 2$ ). Dies ist bereits ein Hinweis darauf, dass das Proton kein echtes Elementarteilchen ist wie das Elektron. Wir werden darauf im Kapitel der Vorlesung zur Teilchenphysik zurückkommen.

Das magnetische Moment des Protons "spürt" das Magnetfeld des umlaufenden Elektrons. Dieses Magnetfeld weist in Richtung des Gesamtdrehimpulses  $j$  des Elektrons, so dass sich für die Wechselwirkung des Kernspins mit dem Magnetfeld des Elektrons eine Wechselwirkung gibt von der Form

$$\begin{aligned} \Delta V_{HF} &= -\vec{\mu}_{\text{Proton}} \cdot \vec{B}_j \\ &= g_p \frac{\mu_K}{\hbar} \vec{I} \cdot \vec{B}_j \\ &= \chi_{HF} \vec{I} \cdot \vec{j}. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Wegen des kleinen Wertes von  $\mu_K$  ist diese Wechselwirkung um einen Faktor 1000 kleiner als die Spin-Bahn Wechselwirkung in der Feinstruktur, also etwa von der Größenordnung  $10^{-6}$  eV, und trägt deshalb den Namen Hyperfeinwechselwirkung. Das Vorzeichen der Wechselwirkung und die Operatorstruktur wird durch das Skalarprodukt  $\vec{I} \cdot \vec{j}$  definiert. Dies legt nahe einen neuen Spinvektor

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{j}, \quad (1.46)$$

einzuführen. Ein Eigenzustand zu den Operatoren  $\vec{I}^2$ ,  $\vec{j}^2$  und  $\vec{F}^2$  ist dann auch Eigenzustand zum Operator

$$\vec{I} \cdot \vec{j} = \frac{1}{2} [\vec{F}^2 - \vec{I}^2 - \vec{j}^2], \quad (1.47)$$

(vergleiche die Überlegungen zu (1.38)). In der Basis der Zustände, in denen der Kernspin und der Drehimpuls des Elektrons zum  $F$ -Spin gekoppelt sind ist also auch der Operator der Hyperfeinwechselwirkung diagonal und wir erhalten für den Fall des atomaren Wasserstoffs ( $I = j = 1/2$ ) eine Energiekorrektur der Form

$$\langle \Delta V_{HF} \rangle = \frac{\hbar^2 \chi_{HF}}{2} [F(F+1) - I(I+1) - (j(j+1))] = \frac{\hbar^2 \chi_{HF}}{2} \begin{cases} 0.5 & \text{für } F = 1 \\ -1.5 & \text{für } F = 0 \end{cases} \quad (1.48)$$

Das Wasserstoffatom besitzt also in seinem Grundzustand einen  $F$ -Spin von  $F = 0$  (der Spin des Protons und des Elektrons sind antiparallel). Der entsprechende Zustand mit  $F = 1$  liegt  $5.9 \cdot 10^{-6}$  eV über dem Grundzustand. Bei einem Übergang von  $F = 1$  zu

$F = 0$  wird also elektromagnetische Strahlung<sup>2</sup> der Energie

$$\Delta E = h\nu = 5.9 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \quad (1.49)$$

emittiert. Dies entspricht einer Frequenz  $\nu$  von 1420 MHz und einer Wellenlänge von

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = 21 \text{ cm} . \quad (1.50)$$

Die Beobachtung von Radiowellen mit dieser Wellenlänge wird vor allen Dingen in der Astronomie benutzt, um die Dichte von atomarem Wasserstoff im Weltall zu bestimmen.

---

<sup>2</sup>Bei dieser Strahlung handelt es sich nicht um elektrische Dipolstrahlung, da ja bei einem solchen Übergang die Parität des Anfangs und Endzustandes unterschiedlich sein müssen. Bei diesem Übergang wird aber an dem Ortsanteil der Wellenfunktion nichts geändert und lediglich die Spinorientierung zwischen dem Spin des Protons und des Elektrons gedreht. Es handelt sich dabei um eine magnetische Wechselwirkung und man spricht von einem magnetischen Dipolübergang. Ein solcher Übergang ist unterdrückt, da die magnetischen Wechselwirkungen im Allgemeinen schwächer sind; er tritt nur auf, wenn ein elektrischer Übergang wegen der Auswahlregeln für die Quantenzahlen verboten ist.

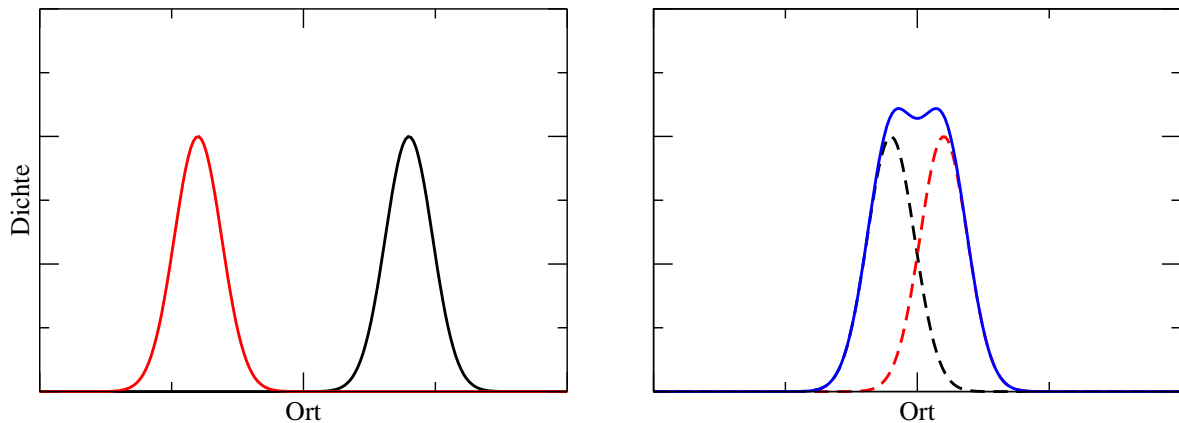


Abbildung 1.4: Wahrscheinlichkeitsdichte eines von zwei ununterscheidbaren Teilchen zu detektieren, siehe Diskussion im Text

## 1.5 Ununterscheidbare Teilchen, das Heliumatom

Elementare Teilchen, wie etwa die Elektronen, kann man nicht markieren, d.h.: sie sind ununterscheidbar. Zusammen mit den Grundeigenschaften der Quantenmechanik führt diese Ununterscheidbarkeit zu sehr interessanten Konsequenzen. Um uns diese Konsequenzen vor Augen zu führen, machen wir ein Gedankenexperiment. Wir betrachten dazu zwei Elementarteilchen, also zum Beispiel zwei Elektronen. Zur Vereinfachung wollen wir annehmen, dass es keine Wechselwirkung zwischen diesen beiden Teilchen gibt, der Hamiltonoperator ist also die Summe von Operatoren, die jeweils nur auf die Koordinaten eines Teilchens wirken,  $H = H(\vec{r}_1) + H(\vec{r}_2)$ . In diesem Fall wissen wir, dass es Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung gibt, die ein Produkt von Einteilchenwellenfunktionen sind

$$\Phi_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{\alpha}(\vec{r}_1)\phi_{\beta}(\vec{r}_2) \quad (1.51)$$

wobei die Funktionen  $\phi_{\alpha}$  und  $\phi_{\beta}$  Lösungen des jeweiligen Einteilchenproblems sind.

Das eine der Teilchen sei am Punkt  $\vec{r}_{\alpha}$  lokalisiert und werde etwa durch eine gaußförmige Wellenfunktion beschrieben  $\phi_{\alpha}(\vec{r})$ , die eine maximale Amplitude am Ort  $\vec{r}_{\alpha}$  besitzt. Ganz entsprechend sei das andere Elektron mit Wellenfunktion  $\phi_{\beta}(\vec{r})$  am Ort  $\vec{r}_{\beta}$  lokalisiert. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ein Elektron an einer Stelle  $\vec{r}$  zu finden wird dann durch

$$\rho(\vec{r}) = \phi_{\alpha}^*(\vec{r})\phi_{\alpha}(\vec{r}) + \phi_{\beta}^*(\vec{r})\phi_{\beta}(\vec{r}),$$

definiert. Sind die Orte weit genug auseinander, so wie es z.B. im linken Teilbild der Abb. 1.4 dargestellt ist, so könnte man versucht sein zu sagen, dass, wenn immer wir ein Elektron in der Nähe von  $\vec{r}_{\alpha}$  detektieren, dann ist das Elektron 1, und wenn wir ein Elektron in der Nähe von  $\vec{r}_{\beta}$  finden, dann muss es wohl das andere, das Elektron 2 sein.

Was ist aber, wenn die Ortsvektoren  $\vec{r}_{\alpha}$  und  $\vec{r}_{\beta}$  so eng beieinander liegen, wie es im rechten Teilbild der Abb. 1.4 dargestellt ist? In diesem Fall können wir nicht wissen, welches Elektron detektiert wurde, da ja die Elektronen ununterscheidbar sind. Streng genommen gilt das natürlich auch für den Fall, wenn  $\vec{r}_{\alpha}$  und  $\vec{r}_{\beta}$  zwei Orte bezeichnen, die weit auseinanderliegen. In diesem Fall ist die Dichte  $\phi_{\alpha}^*\phi_{\alpha}$  am Ort  $\vec{r}_{\beta}$  zwar klein aber nicht identisch null, so dass auch hier eine Unterscheidbarkeit nicht gegeben ist.

Wir wollen diese Eigenschaft der Ununterscheidbarkeit etwas genauer definieren und führen dazu einen Austauschoperator  $\hat{P}_{12}$  ein. Der Operator wirkt auf Vielteilchenwellenfunktionen und tauscht die Koordinaten von  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  aus. Am Beispiel der Produktwellenfunktion (1.51) aufgezeigt, bedeutet das

$$\hat{P}_{12}\Phi_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{P}_{12}\phi_{\alpha}(\vec{r}_1)\phi_{\beta}(\vec{r}_2) = \phi_{\alpha}(\vec{r}_2)\phi_{\beta}(\vec{r}_1) = \Phi_{\beta\alpha}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.52)$$

oder ausgedrückt in der Bracket Darstellung

$$\hat{P}_{12}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle = |\Phi_{\beta\alpha}\rangle. \quad (1.53)$$

Die Ununterscheidbarkeit von den zwei beschriebenen Teilchen bedeutet dann: Egal welches Experiment ich mache, es führt zu identischen Ergebnissen, ganz gleich ob die beiden Teilchen vertauscht werden oder nicht.

Die Durchführung einer Messung ist mit einem hermiteschen Operator  $\hat{O}$  verknüpft. Ununterscheidbarkeit bedeutet dann, dass ich für  $\hat{O}$  das gleiche Eigenwertspektrum und die gleichen Wahrscheinlichkeiten, einen dieser Eigenwerte  $o_{\gamma}$  zu erzielen, bekomme, ganz egal ob ich  $\hat{O}$  auf  $\Phi_{\alpha\beta}$  oder  $\Phi_{\beta\alpha}$  anwende:

$$\begin{aligned} \hat{O}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle = o_{\gamma}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle &\Leftrightarrow \hat{O}|\Phi_{\beta\alpha}\rangle = o_{\gamma}|\Phi_{\beta\alpha}\rangle \\ &= \hat{O}\hat{P}_{12}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle = o_{\gamma}\hat{P}_{12}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle = \hat{P}_{12}\hat{O}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle \end{aligned} \quad (1.54)$$

Damit haben wir also gezeigt, dass

$$\hat{O}\hat{P}_{12}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle = \hat{P}_{12}\hat{O}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle.$$

Da diese Beziehung für alle Produktzustände  $|\Phi_{\alpha\beta}\rangle$  gilt und diese Zustände eine Basis des Hilbertraumes der Zweiteilchenzustände bilden, gilt also für die Operatoren

$$\hat{O}\hat{P}_{12} = \hat{P}_{12}\hat{O} \quad \text{beziehungsweise} \quad [\hat{O}, \hat{P}_{12}] = 0. \quad (1.55)$$

Da  $\hat{O}$  ein Operator ist, der einer beliebigen physikalischen Messgröße zugeordnet ist, gilt die Kommutatorrelation also insbesondere auch für den Hamiltonoperator und allen Operatoren, die gleichzeitig mit dem Hamiltonoperator vertauschen. Wir erwarten also, dass die stationären Lösungen der Schrödingergleichung, also die Eigenzustände zum Hamiltonoperator, auch Eigenzustände zum Permutationsoperator  $\hat{P}_{12}$  sind.

Wie sehen aber die Eigenwerte und Eigenzustände des Permutationsoperators  $\hat{P}_{12}$  aus? Zur Beantwortung dieser Frage vergegenwärtigen wir uns, dass ein zweimaliges Anwenden des Permutationsoperators wieder zum Ausgangszustand zurückführt

$$\hat{P}_{12}(\hat{P}_{12}|\Phi_{\alpha\beta}\rangle) = \hat{P}_{12}|\Phi_{\beta\alpha}\rangle = |\Phi_{\alpha\beta}\rangle.$$

Der Operator  $\hat{P}_{12}^2$  ist also der 1-Operator. Das bedeutet aber, dass die möglichen Eigenwerte  $\hat{P}_{12}$  die Zahlen +1 oder -1 sind.

Wir betrachten jetzt Eigenzustände zu  $\hat{P}_{12}$  mit dem Eigenwert +1. Diese Zustände ändern sich also nicht, wenn die Koordinaten der Teilchen 1 und 2 vertauscht werden. Wir betrachten einen solchen **symmetrischen** Zustand von Produktfunktionen in der Ortsdarstellung

$$\Phi_{\alpha\beta}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_{\alpha}(\vec{r}_1)\phi_{\beta}(\vec{r}_2) + \phi_{\alpha}(\vec{r}_2)\phi_{\beta}(\vec{r}_1) \}. \quad (1.56)$$

Für zwei identische Teilchen, die nicht miteinander wechselwirken, ist die Produktfunktion des ersten Summanden eine Lösung der stationären Schrödinger genau so wie die des zweiten und zwar mit dem gleichen Energieeigenwert. Damit ist aber auch die in (1.56) dargestellte Linearkombination eine Lösung dieses Problems. Ausserdem kann man sich leicht davon überzeugen, dass

$$\hat{P}_{12}\Phi_{\alpha\beta}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_{\alpha\beta}^S(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \Phi_{\alpha\beta}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (1.57)$$

$\Phi_{\alpha\beta}^S$  also ein Eigenzustand zum Permutationsoperator  $\hat{P}_{12}$  ist mit dem Eigenwert  $+1$ . Der Vorfaktor  $1/\sqrt{2}$  in (1.56) wurde so gewählt, dass (bei normierten Einteilchenwellenfunktionen  $\phi_\alpha$  und  $\phi_\beta$ ) auch der Zustand  $\Phi_{\alpha\beta}^S$  normiert ist. Zum Beweis dieser Aussage berechnen wir

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\alpha\beta}^S | \Phi_{\alpha\beta}^S \rangle &= \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \{ \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta^*(\vec{r}_2) + \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta^*(\vec{r}_1) \} \{ \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) + \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) \} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \underbrace{\int d^3r_1 \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\alpha(\vec{r}_1)}_{=1} \underbrace{\int d^3r_2 \phi_\beta^*(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_2)}_{=1} + \right. \\ &\quad \underbrace{\int d^3r_1 \phi_\alpha^*(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_1)}_{=0} \underbrace{\int d^3r_2 \phi_\beta^*(\vec{r}_2)\phi_\alpha(\vec{r}_2)}_{=0} + \\ &\quad \left. + \underbrace{\int d^3r_1 \phi_\beta^*(\vec{r}_1)\phi_\alpha(\vec{r}_1)}_{=0} \underbrace{\int d^3r_2 \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_2)}_{=0} + \right. \\ &\quad \left. \underbrace{\int d^3r_1 \phi_\beta^*(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_1)}_{=1} \underbrace{\int d^3r_2 \phi_\alpha^*(\vec{r}_2)\phi_\alpha(\vec{r}_2)}_{=1} \right\} \\ &= 1 \end{aligned}$$

Analog zur symmetrischen Wellenfunktion von (1.56) kann man auch eine antisymmetrische Wellenfunktion definieren

$$\Phi_{\alpha\beta}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_\alpha(\vec{r}_1)\phi_\beta(\vec{r}_2) - \phi_\alpha(\vec{r}_2)\phi_\beta(\vec{r}_1) \}. \quad (1.58)$$

Auch diese Wellenfunktion ist eine Eigenfunktion zum Hamiltonoperator für nicht wechselwirkende Teilchen und zum Vertauschungsoperator allerdings mit dem Eigenwert  $-1$ . Der Vorfaktor  $1/\sqrt{2}$  wird wiederum benötigt, damit der Zweiteilchenzustand normiert ist.

Wir haben also jetzt Eigenzustände zum Vertauschungsoperator mit den möglichen Eigenwerten  $+1$  und  $-1$  konstruiert. Welche dieser Möglichkeiten wählt die Natur? Die Antwort darauf lautet, dass das von der "Teilchensorte" abhängt:

- Teilchen mit einem halbzahligen Spin, also z.B. ein Elektron oder ein Proton mit einem Spin  $s = 1/2$ , aber auch z.B. Atomkerne mit einer ungeraden Anzahl von Nukleonen, die, wie wir noch sehen werden ebenfalls ein halbzahligen Spin ( $1/2$  oder aber auch  $3/2$ ,  $5/2$  ...) besitzen, haben Vielteilchenwellenfunktionen, die antisymmetrisch sind. Dies bedeutet, dass die Wellenfunktion gleich ist, bis auf ein wechselndes Vorzeichen, wenn die Koordinaten von zwei der Teilchen des Systems getauscht werden. Man bezeichnet diese Teilchen mit ungeradem Spin als **Fermionen**.

- Teilchen mit einem ganzzahligen Spin, wie z.B. Mesonen aber auch die Quanten des elektromagnetischen Feldes, die Photonen, oder auch Atomkerne mit einer geraden Zahl von Nukleonen haben symmetrische Vielteilchenwellenfunktionen, die sich bei der Vertauschung der Koordinaten von zwei Teilchen nicht ändern. Man bezeichnet diese Teilchen als Bosonen.

Diese Eigenschaften der Bosonen und Fermionen sind durch viele experimentelle Tatsachen belegt. Man kann diese Eigenschaft aber auch im Rahmen der Quantenfeldtheorie explizit beweisen. Dieser Beweis geht aber über den Rahmen dieser Vorlesung hinaus.

Eine Konsequenz der Antisymmetrie von Wellenfunktionen ist das sogenannte **Pauli Prinzip**<sup>3</sup>: Nach dem Pauli Prinzip dürfen zwei Fermionen nicht den gleichen Einteilchenzustand besetzen. Zwei Einteilchenzustände, die von 2 identischen Fermionen besetzt sind müssen sich also in wenigstens einer Quantenzahl unterscheiden. Dieses Pauli Prinzip ist eine direkte Konsequenz der Antisymmetrisierung von Vielteilchenwellenfunktionen für Fermionen. Schreibt man nämlich z.B. die antisymmetrisierte Wellenfunktion aus (1.58) auf für den Fall identischer Einteilchenzustände  $\alpha = \beta$ , so ergibt sich die Funktion  $\Phi_{\alpha\alpha}^A = 0$ , die Wahrscheinlichkeitsamplitude dieses Zustandes ist also identisch null.

Dieses Pauliprinzip ist eine Konsequenz der Antisymmetrisierung, die weitreichende Folgen hat. Wir werden sehen, dass darauf z.B. das Periodensystem der chemischen Elemente basiert und auch die Stabilisierung von Festkörpern bis hin zu massiven Sternen auf diesem Prinzip beruht. Die Forderung nach antisymmetrischen Wellenfunktionen für Fermionen geht aber noch über diese Formulierung des Pauli Prinzipes hinaus. Dazu betrachten wir die Zweiteilchendichte, die sich aus der antisymmetrischen Wellenfunktion (1.58) ergibt

$$\rho_{\alpha\beta}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_{\alpha\beta}^{A*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_{\alpha\beta}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (1.59)$$

Diese Zweiteilchendichte gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass man bei dem Zweiteilchensystem, das durch die Wellenfunktion  $\Phi_{\alpha\beta}$  beschrieben wird, ein Fermion an der Stelle  $\vec{r}_1$  und das zweite an der Stelle  $\vec{r}_2$  vorfindet. Für  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}$  gibt diese Zweiteilchendichte die Wahrscheinlichkeit an, die beiden Fermionen an der gleichen Stelle  $\vec{r}$  anzutreffen. Diese Wahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\beta}^A(\vec{r}, \vec{r}) &= \frac{1}{2} |\phi_\alpha(\vec{r})\phi_\beta(\vec{r}) - \phi_\alpha(\vec{r})\phi_\beta(\vec{r})|^2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.60)$$

Also auch an einer Stelle  $\vec{r}$ , an der die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen vorzufinden

$$\rho(\vec{r}) = |\phi_\alpha(\vec{r})|^2 + |\phi_\beta(\vec{r})|^2,$$

groß ist, ist die Wahrscheinlichkeit beide Teilchen vorzufinden identisch null. Also auch ohne jede Wechselwirkung zwischen den Teilchen gibt es eine kinematische Korrelation, die es verhindert, dass zwei ununterscheidbare Fermionen sich an der gleichen Stelle aufhalten können. Diese Korrelation wirkt also nahezu wie eine Abstossung zwischen den Fermionen.

---

<sup>3</sup>Das Pauli Prinzip ist so benannt nach dem Physiker Wolfgang Pauli (1900-1958), der dieses Postulat 1925 aufstellte

Eine entsprechende Diskussion können wir auch für die symmetrische Wellenfunktion von zwei Bosonen durchführen und die entsprechende Zweiteilchendichte berechnen. In diesem Fall ergibt sich mit der symmetrisierten Wellenfunktion aus (1.56)

$$\begin{aligned}\rho_{\alpha\beta}^S(\vec{r}, \vec{r}) &= \frac{1}{2} |\phi_\alpha(\vec{r})\phi_\beta(\vec{r}) + \phi_\alpha(\vec{r})\phi_\beta(\vec{r})|^2 \\ &= 2 |\phi_\alpha(\vec{r})|^2 |\phi_\beta(\vec{r})|^2.\end{aligned}\quad (1.61)$$

Die Wahrscheinlichkeit 2 Bosonen am selben Ort zu finden ist also doppelt so groß wie das Produkt der Wahrscheinlichkeiten für ein Boson im Zustand  $\alpha$  und das zweite im Zustand  $\beta$ . Die Symmetrisierung wirkt also wie eine anziehende Wechselwirkung zwischen den Bosonen. Dieser Effekt führt zum sogenannten Bose-Einstein Kondensat in kalten Atomgasen.

### 1.5.1 Struktur des Helium Atoms

Welche Auswirkungen haben diese Überlegungen auf die Struktur von Atomen mit mehreren Elektronen? Als einfachsten Fall betrachten wir den Fall des Helium Atoms mit einem doppelt geladenen Atomkern (2 Protonen:  $Z=2$ ) und zwei Elektronen. In einem ersten Schritt wollen wir die Wechselwirkung zwischen den Elektronen vernachlässigen. Die Einteilchenzustände sind also charakterisiert durch die Quantenzahlen

$$|n, l, m_l, m_s\rangle \Leftrightarrow \psi_{nlm_l}(r_i)\chi_{m_s}(i), \quad (1.62)$$

mit einer Einteilchenwellenfunktion  $\psi$  und einer Spinfunktion (besser Spinvektor)  $\chi$  der Teilchen mit  $i = 1$  oder  $i = 2$ . Zur Konkretisierung unserer Überlegungen wollen wir uns außerdem auf die Konfigurationen beschränken, bei denen die Elektronen die atomaren Zustände mit den Hauptquantenzahlen  $n = 1$  und  $n = 2$  (in diesem Fall also  $l = 0$  oder  $l = 1$ ) besetzen, wobei maximal 1 Elektron in der  $n = 2$  Schale sein soll, so dass die Energien der Zustände als Summe der Einteilchenenergien also die Werte

$$E = E_0 * 2 \quad \text{oder} \quad E = E_0 * \left(1 + \frac{1}{2^2}\right) = E_0 * \frac{5}{4} \quad (1.63)$$

annehmen können, je nachdem ob zwei Elektronen in der  $n = 1$  Schale oder ein Elektron in der  $n = 1$  Schale und das zweite in der  $n = 2$  Schale konfiguriert sind. Dabei ist  $E_0$  um einen Faktor 4 größer als die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms, da die atomaren Energien mit dem Faktor  $Z^2$  skalieren

$$E_0 = Z^2 * E_{0H} = -4 * 13.6 \text{ eV}.$$

Da Elektronen Fermionen sind müssen wir bei dieser Konstruktion der möglichen Zweiteilchenzustände, man spricht auch von Konfigurationen, das Pauli Prinzip beachten. Wir unterscheiden dabei die folgenden Fälle:

**$M_S=0$ :** Die beiden Elektronen haben eine unterschiedliche Spinprojektion. Das eine den Eigenwert für  $\hat{s}_z$ , den Spinoperator in  $z$ -Richtung, von  $+1/2\hbar$  ( $m_s = +1/2$ ), das andere  $m_s = -1/2$ . In diesem Fall ist also die Summe der Spinprojektion

$$M_S = m_{s,1} + m_{s,2} = 0.$$



Da die Spinprojektionsquantenzahlen unterschiedlich sind unterscheiden sich die Einteilchenzustände also schon einmal in dieser Projektionsquantenzahl und wir brauchen bei dem Aufbau der Konfigurationen auf das Pauli Prinzip keine Rücksicht mehr nehmen. Es gibt also eine Konfiguration mit  $E = 2E_0$  und 8 Konfigurationen mit  $E = 5/4E_0$  (Elektron 1 ( $m_s = 1/2$ ) in  $n = 1$  und Elektron 2 ( $m_s = -1/2$ ) in jeweils einem der 4 Zustände mit  $n = 2$ ; darüber hinaus gibt es aber natürlich auch noch die Möglichkeit, dass Elektron 2 ( $m_s = -1/2$ ) in  $n = 1$  und Elektron 1 ( $m_s = 1/2$ ) Zustände in in der  $n = 2$  Schale besetzt). Insgesamt gibt es also 9 Konfigurationen mit  $M_S = 0$ .

$M_S=1$ : Haben beide Elektronen eine Spinprojektion von  $m_s = +1/2$  so ist die Konfiguration, bei der beide Elektronen in der  $n = 1$  Schale sitzen, wegen des Pauliprinzipes verboten. Wir haben also nur 4 mögliche Konfigurationen mit  $M_S = 1/2 + 1/2 = 1$  und alle haben die Energie  $E = 5/4E_0$ .

$M_S=-1$ : Das gleich gilt für den Fall, dass beide Elektronen eine Spinprojektion von  $m_s = -1/2$  aufweisen.

Die Produktwellenfunktionen von den zwei Einteilchenwellenfunktionen des Typs (1.62) können natürlich auch aufgefasst werden als eine Zweiteilchenfunktion vom Typ

$$\Psi(1, 2) = \psi_{\text{Ort}}(r_1, r_2)\chi_{\text{Spin}}(1, 2). \quad (1.64)$$

Sie sind also faktorisiert in einen Ortsanteil und einen Spinanteil. In dieser Darstellung kann man natürlich auch den Austauschoperator  $\hat{P}_{12}$  aufteilen in einen Operator, der nur auf den Ortsanteil, und eine zweiten, der nur auf den Spinanteil des Zustandes wirkt

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\Psi(1, 2) &= \hat{P}_{12,r}\psi_{\text{Ort}}(r_1, r_2)\hat{P}_{12,s}\chi_{\text{Spin}}(1, 2) \\ &= -\Psi(1, 2) \\ &= -\psi_{\text{Ort}}(r_1, r_2)\chi_{\text{Spin}}(1, 2). \end{aligned} \quad (1.65)$$

Die antisymmetrischen Zustände  $\Psi(1, 2)$  (Eigenzustände zu  $\hat{P}_{12}$  mit dem Eigenwert -1) sind also entweder ein Produkt aus einer symmetrischen Ortsfunktion  $\psi_{\text{Ort}}$  (Eigenfunktion zu  $\hat{P}_{12,r}$  mit Eigenwert +1) und einer antisymmetrischen Spinfunktion  $\chi_{\text{Spin}}(1, 2)$  (Eigenfunktion zu  $\hat{P}_{12,s}$  mit Eigenwert -1) oder ein Produkt aus einer antisymmetrischen Ortsfunktion und einer symmetrischen Spinfunktion.

Die Spinfunktionen mit definierter Symmetrie sind gerade die Spinfunktionen, bei denen die Spins der einzelnen Elektronen  $s_i$  zum Gesamts  $S = s_1 + s_2$  gekoppelt sind. Wir unterscheiden also zwischen den symmetrischen Spinfunktionen, bei denen die Spins parallel zueinander stehen und zum Gesamtspin  $S = 1$  addiert oder gekoppelt sind und der antisymmetrischen Spinfunktion, bei denen die Spins der beiden Elektronen antiparallel zueinander stehen und einen Gesamtspin von  $S = 0$  aufweisen. Im einzelnen gibt es also 3 symmetrische  $S = 1$  Zustände mit  $M_S = -1, 0$ , und  $+1$  nämlich

$$\chi_{S=1, M_S}(1, 2) = \begin{cases} \chi_{-1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) & M_S = -1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) + \chi_{-1/2}(1)\chi_{1/2}(2)) & M_S = 0 \\ \chi_{1/2}(1)\chi_{1/2}(2) & M_S = 1 \end{cases} \quad (1.66)$$

Die antisymmetrische Spinfunktion ist gegeben durch

$$\chi_{S=1, M_S=0}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \chi_{1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) - \chi_{-1/2}(1)\chi_{1/2}(2) \right). \quad (1.67)$$

Die Zustände des Helium Atoms bezeichnet man mit den folgenden Quantenzahlen:

$$\begin{aligned} N &= n_1 + n_2 - 1 \\ \vec{S} &= \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \\ \vec{L} &= \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \\ \vec{J} &= \vec{L} + \vec{S}. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Dabei bezeichnen  $n_i$ ,  $s_i$  und  $l_i$  Hauptquantenzahl, Spin und Bahndrehimpuls der Einteilchenniveaus die von den zwei Elektronen ( $i = 1, 2$ ) besetzt sind.  $S$  und  $L$  sind der gesamte Spin und Drehimpuls, die wiederum zu einem Gesamtdrehimpuls  $J$  gekoppelt sind. Die Bezeichnung dieser Zustände erfolgt nach dem Schema

$$N^{2S+1}X(L)_J \quad \text{mit} \quad X(L) = S, P, D, \dots \text{ f\"ur } L = 0, 1, 2, \dots \quad (1.69)$$

Der obere Index ( $2S + 1$ ) bezieht sich auf die Spin Entartung und wir unterscheiden im Fall des Helium Atoms die **Singulett** oder  $S = 0$  Zustände des **Para-Heliums** von den **Triplet** oder  $S = 1$  Zuständen des **Ortho-Heliums**. Nach unseren Überlegungen zu (1.65) besitzen die Triplet Zustände eine anti-symmetrische Ortsfunktion. Dies bedeutet, dass die Konfiguration mit beiden Elektronen in der  $n_i = 1$  Schale wegen des Pauli Prinzips verboten ist. Es verbleiben also als Zustände mit  $N \leq 2$  nur die Konfigurationen mit

1.  $N = 2, l_1 = l_2 = 0$  also  $L = 0$ , was uns nach der Nomenklatur (1.69) zum Zustand

$$2^3S_1$$

führt.

2.  $N = 2, l_1 = 0, l_2 = 1$  also  $L = 1$ , was uns nach der Nomenklatur (1.69) die Zustände

$$2^3P_0, \quad 2^3P_1, \quad \text{und} \quad 2^3P_2$$

liefert

Berücksichtigt man den Entartungsgrad ( $2 * J + 1$ ) der Zustände, so gibt es also insgesamt 12 Zustände des Ortho-Heliums mit  $N \leq 2$  (siehe auch die schematische Abb. 1.5).

Für das Para-Helium ergeben sich symmetrische Ortswellenfunktionen, da ja die Spinfunktion antisymmetrisch ist. Dies erlaubt auch einen Zustand mit  $N = 1$ , nämlich die

$$1^1S_0$$

Konfiguration. Diese Konfiguration sollte die niedrigste Energie haben, was dem Grundzustand des Heliums entspricht (da die bisher vernachlässigte Wechselwirkung zwischen

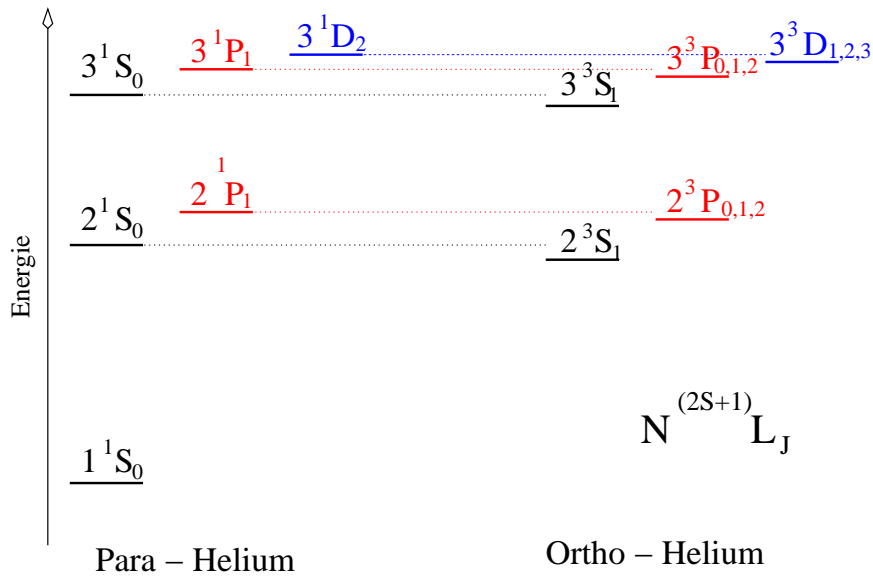


Abbildung 1.5: Schematisches Termschema des Helium Atoms

den Elektronen zu keiner völligen Umordnung der Energiezustände führt). Für  $N = 2$  ergeben sich die folgenden Konfigurationen

$$2^1S_0 \quad \text{und} \quad 2^1P_1.$$

Damit ergeben sich also für das Para-Helium 1 Zustand mit  $N = 1$  und 4 Konfigurationen mit  $N = 2$ . Insgesamt erhalten wir also 1 Zustand mit  $N = 1$  und  $4+12=16$  Zustände des Helium mit  $N = 2$ .

Im Vergleich zu der Auflistung der Konfigurationen in der Basis der reinen Produktfunktionen ohne Kopplung zu  $S$ ,  $L$  und  $J$  ist natürlich die Zahl der Zustände gleich geblieben und es ist gleichgültig in welcher Basis wir über die verschiedenen Konfigurationen der Energie entarteten Zustände Buch führen. Die gekoppelte Basis ist lediglich eine spezielle Alternative die Zustände mit gleichem  $N$  zu bezeichnen und zu klassifizieren.

Der Vorteil der gekoppelten Basis wird erst deutlich, wenn man die Effekte der Elektron-Elektron Wechselwirkung berücksichtigt. Welche Korrekturen ergeben sich also durch diese Wechselwirkung?

In einem ersten Schritt wollen wir berücksichtigen, dass ein Elektron im Helium Atom nicht nur die Attraktion durch die Kernladung mit  $Z = 2$  spürt sondern auch eine gewisse Repulsion durch das zweite Elektron. Dieses Elektron schirmt einen Teil der Kernladung ab. Nehmen wir an, dass die Ladungsverteilung des Atomkerns plus die des abschirmenden Elektrons,  $\rho(r)$ , kugelsymmetrisch um den Koordinatenursprung ist, so ergibt sich für ein Elektron im Anstand  $R$  von diesem Koordinatenursprung das Potenzial einer effektiven Ladung  $Z(R)$ , die gerade der Gesamtladung in der Kugel mit dem Radius  $R$  entspricht. Für diese Ladung erhalten wir also

$$Z(R) = \int_0^R \rho(r) r^2 dr, \tag{1.70}$$

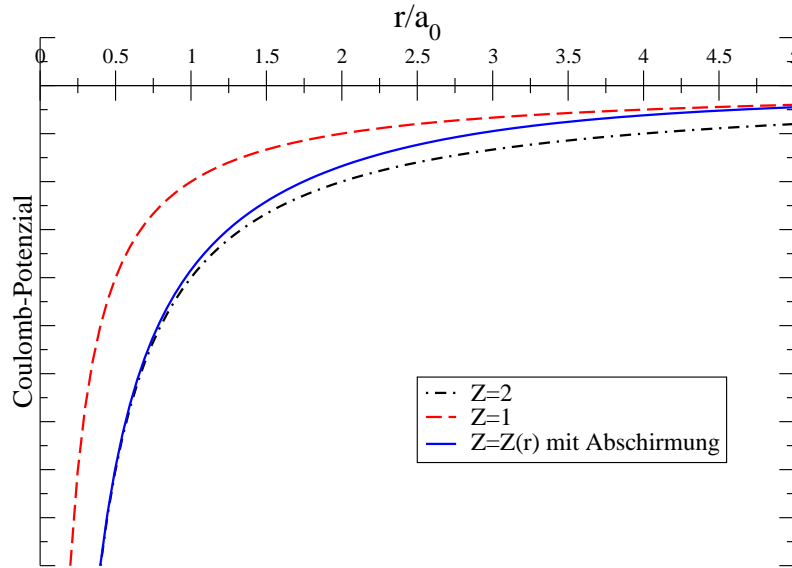


Abbildung 1.6: Vergleich des Coulomb Potentials für Kernladungszahl  $Z = 1$ ,  $Z = 2$  und für die effektive Kernladungszahl  $Z(r)$  bei der die Abschirmung durch ein Elektron berücksichtigt wird

und damit ein Potenzial der Form

$$V(R) = \frac{-Z(R)e^2}{4\pi\epsilon_0 R}.$$

Dieses Potenzial ist in Abb. 1.6 dargestellt. Es wurde berechnet unter der Annahme, dass sich  $\rho(r)$  aus der Kernladung von 2 Protonen und der Ladung eines Elektrons im  $1s$  Niveau des Wasserstoffatoms ergibt. Man sieht also, dass sich für große Abstände ( $r > a_0$  mit  $a_0$  dem Bohrschen Radius) das Potenzial an das Potenzial für  $Z = 1$  annähert, während für kleine Abstände das Potenzial der Kernladung  $Z = 2$  entspricht.

Das resultierende Potenzial ist also kein einfaches  $1/r$  Potenzial. Dies bedeutet, dass die Entartung der Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl aber unterschiedlichem Wert für den Bahndrehimpuls, die ja so charakteristisch für das Spektrum des Wasserstoffatoms ist, aufgehoben wird. Ein Elektron in einem Zustand mit niedrigem Bahndrehimpuls  $l$  hat eine größere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe des Atomkerns als ein solches mit gleicher Hauptquantenzahl aber einem größeren Wert für  $l$ . Dies ist eine Konsequenz des Zentrifugalterms in der radialen Schrödinger Gleichung für  $l \neq 0$ . In Folge wird ein Zustand mit niedrigerem  $l$  stärker gebunden sein als ein solcher mit hohem  $l$ . Qualitativ ist dies im Termschema von Abb. 1.5 berücksichtigt.

Ein zweiter Effekt beruht auf der Symmetrie der Wellenfunktion der 2 Elektronen. Wir haben bereits diskutiert, dass im Fall des Ortho-Heliums die Spinfunktion der beiden Elektronen symmetrisch ist, so dass die Ortswellenfunktion antisymmetrisch sein muss. Dies bedeutet aber nach (1.60) dass die Wahrscheinlichkeit beide Elektronen am gleichen Ort zu finden identisch null ist. Die Elektronen halten sich also mit (im Vergleich zum Para-Helium) geringerer Wahrscheinlichkeit in Positionen mit kleinem Relativabstand auf und spüren deshalb die repulsive Elektron-Elektron Wechselwirkung weniger stark als im vergleichbaren Zustand des Para-Heliums. Auch dieser Effekt ist in Abb. 1.5 skizziert.

Trotzdem ist natürlich der energetisch tiefste Zustand des Heliumatoms der  $1^1S_0$  Zustand des Para-Heliums, da der entsprechende Zustand des Ortho-Heliums durch das Pauli Prinzip verboten ist.

Der tiefste Zustand des Para-Heliums,  $2^3S_1$  ist metastabil, da er nicht durch Emission von elektromagnetischer Dipolstrahlung in den Grundzustand übergeführt werden kann.

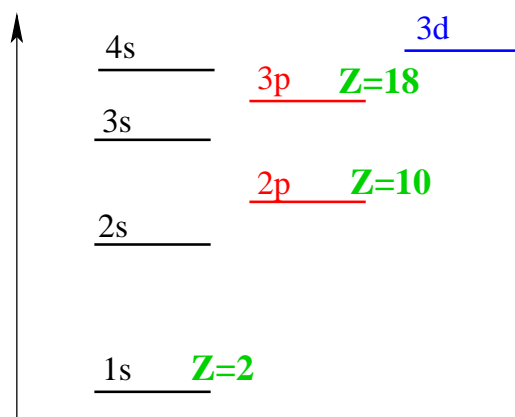


Abbildung 1.7: Schematisches Termschema zur Diskussion im Text. Die aufgeführten Werte für  $Z$  geben an, wie viele Elektronenzustände bis zum Auffüllen der jeweiligen Schale zur Verfügung stehen.

## 1.6 Periodensystem der Atome

Auf der Basis der Diskussion im vorhergehenden Abschnitt 1.5 zu den Effekten des Pauli Prinzips und zur partiellen Abschirmung der Ladung des Atomkerns durch die Elektronen können wir jetzt die Struktur der verschiedenen Atome sukzessiv entwickeln. Wir stellen uns also vor, dass wir Schritt für Schritt Atome mit zunehmender Kernladungszahl  $Z$  betrachten und mit jedem zusätzlichen Proton auch jeweils ein Elektron einfügen.

Als eine erste Näherung für die Darstellung der Konfigurationen der Elektronen betrachten wir das schematische Termschema der Abb. 1.7. Wie wir bereits am Beispiel des Helium Atoms diskutiert haben, wird durch die Abschirmung der Kernladung durch die Elektronen die  $1/r$  Abhängigkeit des Coulomb Potentials modifiziert und damit die Entartung der Niveaus einer Hauptschale aufgehoben: Zustände einer Hauptschale mit niedrigem Bahndrehimpuls  $l$  sind dadurch stärker gebunden als solche mit hohem  $l$ . Dies ist in der schematischen Darstellung von Abb. 1.7 berücksichtigt.

Für den Grundzustand des Helium Atoms werden die zwei Elektronen die Niveaus der  $N = 1$  Hauptschale füllen. Um dabei dem Pauli Prinzip zu genügen, müssen die Spins der Elektronen antiparallel orientiert sein und wir erhalten für den Grundzustand nur eine Konfiguration mit einer Spinprojektion von  $M_S = m_{s1} + m_{s2} = 0$ . Der Gesamtspin  $S$  ist damit gleich Null (Para-Helium), wie wir ja auch bei bereits im vorhergehenden Abschnitt festgestellt haben. Da die Bahndrehimpulse der  $N = 1$  Konfiguration ebenfalls gleich Null sind, tragen die beiden Elektronen in der  $1s$  Schale also nichts zum gesamten Drehimpuls, Spin und Gesamtdrehimpuls der Elektronen bei.

Wenn wir die Kernladungszahl auf  $Z = 3$  erhöhen, das bringt uns zum Element Lithium (Abkürzung  $Li$ ), muss das weitere Elektron in der zweiten Hauptschale untergebracht werden, also nach Abb. 1.7 in der  $2s$  Schale. Dieses Elektron ist offensichtlich weniger stark gebunden als die beiden Elektronen in der  $1s$  Schale und es wird deshalb weniger Energie kosten ein Lithium Atom zu ionisieren, als ein Helium Atom, bei dem ja dazu ein Elektron aus der  $1s$  Schale entfernt werden muss. Dieser Rückgang der Ionisierungsenergie wird auch experimentell beobachtet, wie aus dem linken Teilbild von 1.8 ersichtlich ist.

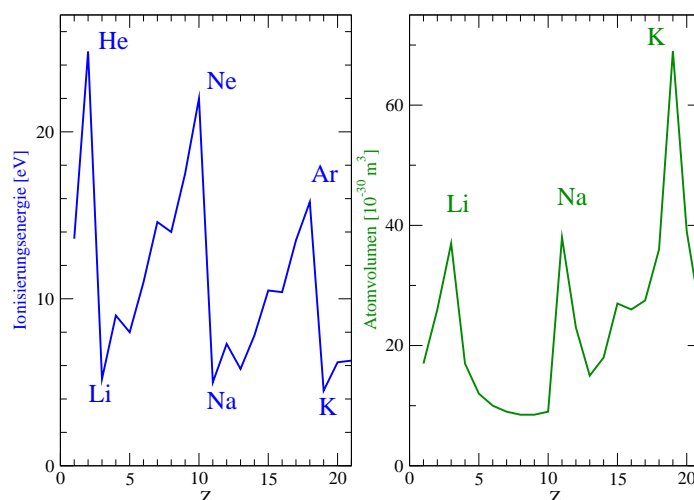


Abbildung 1.8: *Ionisierungsenergie (linkes Teilbild) und Atomvolumen von Atomen mit  $Z \leq 20$ . Die Elemente mit extremen Werten sind durch ihre Symbole dargestellt.*

Wegen dieser relativ schwachen Bindung wird das Elektron sich auch relativ weit vom Atomkern aufhalten, was zu einem großen Atomvolumen führt. Auch dies wird durch die experimentellen Daten, die im rechten Teilbild von 1.8 dargestellt sind, bestätigt.

Erhöht man die Kernladungszahl auf  $Z = 4$ , das ist das Element Beryllium, kann das vierte Elektron ebenfalls in der  $2s$  Schale untergebracht werden. Durch die zusätzliche Kernladung ist die Energie der  $2s$  Schale im Vergleich zum Lithium abgesenkt. Dies führt zu einem Anwachsen der Ionisierungsenergie und einer Reduktion des Atomvolumens (siehe Abb. 1.8). Dadurch dass alle Niveaus der  $2s$  Schale im Beryllium aufgefüllt sind tragen auch diese weiteren 2 Elektronen nichts zum gesamten Drehimpuls, Spin und Gesamtdrehimpuls der Elektronen bei.

Weitere Elektronen müssen in der  $2p$  Schale untergebracht werden. Beim Auffüllen des zweiten Elektrons in die  $2p$  Schale, das ist insgesamt das 6. Elektron und ist also für Kohlenstoff ( $C$ ) erforderlich, stellt sich die Frage: Ist es energetisch günstiger die Spins der beiden Elektronen in der  $2p$  Schale parallel zu orientieren, oder sollten die Spins der Elektronen antiparallel ausgerichtet sein?

Zur Beantwortung dieser Frage überlegen wir uns, dass bei zwei parallelen Elektronenspins die Spinwellenfunktionen dieser Elektronen symmetrisch ist. Wegen der Antisymmetrisierung der Gesamtwellenfunktion muss damit die Ortswellenfunktion antisymmetrisch sein (vergleiche auch Diskussion zu (1.65)). In diesem Fall ist aber die Wahrscheinlichkeit, dass die 2 Elektronen nahe beieinander sind und die repulsive Elektron-Elektron Wechselwirkung besonders intensiv spüren, unterdrückt. Der Zustand mit parallelen Spins ist also energetisch günstiger (vergleiche auch die Energien von entsprechenden Zuständen des Ortho- und Para-Heliums). Dies führt zur **Hundschen Regel**: Im Grundzustand koppeln die Elektronenspins der Elektronen in einer Schale  $nl$  so, dass der größtmögliche Wert des Spins entsteht ohne dass das Pauli Prinzip verletzt wird; die Elektronen versuchen die Spins parallel zu orientieren.<sup>4</sup>

<sup>4</sup>Dieser Effekt führt in der Festkörperphysik zum Ferromagnetismus

Die Niveaus der  $2p$  Schale sind aufgefüllt bei der Kernladungszahl  $Z = 10$ . Dies entspricht dem Edelgas Neon. Edelgase sind also dadurch charakterisiert, dass die Elektronen im Grundzustand die Niveaus einer Schale vollständig auffüllen. Zu den **Edelgasen** gehören Helium ( $He$ ), Neon ( $Ne$ ), Argon ( $Ar$ ,  $Z = 18$ ), Krypton ( $Kr$ ,  $Z = 36$ ) und Xenon ( $Xe$ ,  $Z = 54$ ). Die aufgefüllte Schale impliziert eine große Ionisierungsenergie, was mit einer Trägheit in Bezug auf chemische Reaktionen verbunden ist.

Ist die Kernladungszahl um eine Einheit größer als im Fall der Edelgase, so ist das zusätzliche Elektron in der nächsten Schale untergebracht und deshalb nur sehr schwach gebunden. Daraus resultiert eine niedrige Ionisierungsenergie und ein großes Atomvolumen. Beispiele für diese **Alkaliatome** sind Lithium ( $Li$ ,  $Z = 3$ ), Natrium ( $Na$ ,  $Z = 11$ ) und Kalium ( $K$ ,  $Z = 19$ ).

Die Alkaliatome haben eine besonders einfache Elektronenstruktur. Sie besteht aus abgeschlossenen Schalen und einem zusätzlichen Elektron, dem **Leuchtelektron** oder **Valenzelektron**. So sind z.B. im Fall des Alkaliatoms Natrium die  $1s$ ,  $2s$  und  $2p$  Schalen mit 10 Elektronen gefüllt mit einem Gesamtdrehimpuls von  $L = S = J = 0$ . Im Grundzustand besetzt das elfte Elektron, das Valenzelektron, ein Niveau der  $3s_{1/2}$  Schale. Viele angeregte Zustände des Natrium sind dadurch charakterisiert, dass der Rumpf der 10 Elektronen seine Struktur nicht ändert und lediglich das Valenzelektron von der  $3s_{1/2}$  Schale in ein anderes Niveau übergeführt wird. Ein bekanntes Beispiel dafür sind die Anregungen des Valenzelektrons in die  $3p_{1/2}$  Schale oder  $3p_{3/2}$  Schale. Ist ein Natrium Atom in einem solchen angeregten Zustand, so wird es unter Emission eines Photons der Wellenlänge  $\lambda_1$  von 589.6 nm vom  $3p_{1/2}$  Zustand (bzw. durch ein Photon der Wellenlänge  $\lambda_3$  von 589.0 nm vom  $3p_{3/2}$  Zustand) in den  $3s_{1/2}$  zurückversetzt. Das entsprechende Licht ist das charakteristische gelbe Licht einer Natrium Dampf Lampe. Untersucht man dieses gelbe Natrium Licht mit einem Spektrometer guter Auflösung so erkennt man das Dublett von zwei Linien, die durch die Feinstruktur Aufspaltung der  $3p_{1/2}$  und  $3p_{3/2}$  verursacht wird.

Das Natrium im Grundzustand ist also ein Atom, dessen Drehimpuls nur durch den Spin des Valenzelektrons im  $3s_{1/2}$  Zustand bewirkt wird. Das Natrium würde sich also im Stern-Gerlach Magnet wie ein neutrales Teilchen mit dem magnetischen Moment eines Elektrons mit Spin  $1/2$  verhalten. Wegen seiner hohen Reaktionsfreudigkeit ist Natrium allerdings kein besonders geeignetes Material für das Experiment. Stern und Gerlach haben deshalb das Experiment lieber mit Silberatomen durchgeführt. Auch Silber besitzt eine Elektronenstruktur mit einem Valenzelektron in einer  $s_{1/2}$  Schale.

Zum Abschluss dieses Abschnittes noch einige Bemerkungen zu theoretischen Berechnungen der elektronischen Zustände in der Atomphysik. Genau genommen muss man zur Berechnung der Zustände eines Atoms mit  $Z$  Elektronen die stationäre Schrödinger Gleichung für ein Problem mit  $Z + 1$  Teilchen ( $Z$  Elektronen plus der Atomkern) lösen. Dies ist auch mit der heute zur Verfügung stehenden Leistung von Computern nur für sehr kleine Werte von  $Z$  möglich. Besonders erschwert wird die Lösung eines solchen Vielteilchenproblems durch die erforderliche Berücksichtigung der Antisymmetrisierung der Wellenfunktion der Elektronen.

Zum Glück gibt es aber für das atomare Vielteilchenproblem eine Näherungsmethode, die **Mean Field** oder **Hartree** Näherung, die Ergebnisse liefert, die für viele Untersuchungen vollkommen ausreichend sind. Deshalb werden in der theoretischen Chemie solche Mean



Field Rechnungen häufig als mikroskopische “ab-initio” Rechnungen der atomaren Struktur bezeichnet, obwohl solche Rechnungen natürlich nur eine relativ einfache Näherung zur Lösung der Schrödinger Gleichung darstellen.

Wir wollen das Prinzip dieser Hartree Näherung hier kurz erläutern. Man kann solche Rechnungen damit beginnen, dass man einen Ansatz für das Coulomb Potenzial für die Elektronen macht etwa in der Form

$$U_0(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{Z}{r} - a \exp(-br) \right].$$

Die Parameter  $a$  und  $b$  werden dabei so gewählt, dass  $U_0$  eine erste Näherung für das Coulomb Potenzial des Atomkerns plus der Abschirmung durch die anderen Elektronen darstellt. Für dieses Potenzial löst man dann die stationäre Schrödinger Gleichung für jeweils ein Elektron der Masse  $m_e$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + U_0(r) \right\} \varphi_\alpha(\vec{r}) = \varepsilon_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r}). \quad (1.71)$$

Die  $Z$  Elektronen werden dann in die Zustände  $\alpha$  plaziert, die die niedrigsten Energien haben, so dass das Pauli Prinzip erfüllt wird. Das Elektron im Zustand  $\alpha$  bewirkt eine Ladungsverteilung der Form

$$e\rho_\alpha(\vec{r}) = e\varphi_\alpha(\vec{r})\varphi_\alpha^*(\vec{r}).$$

Damit spürt also ein Elektron in einem Zustand  $\alpha$  ein mittleres Coulomb Feld, das durch die  $Z$  Ladungen im Atomkern und durch die Ladungsverteilungen der  $Z - 1$  Elektronen in den besetzten Zuständen  $\beta \neq \alpha$  hervorgerufen wird, in der Form

$$U_\alpha(\vec{r}) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{Z}{r} - \sum_{\beta \neq \alpha} \int \frac{\rho_\beta(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' \right]. \quad (1.72)$$

Dieses  $U_\alpha$  ist offensichtlich eine bessere Näherung für das mittlere Coulomb Potenzial als unser Ansatz  $U_0$ . Man löst deshalb im nächsten Schritt die Schrödinger Gleichung (1.71) für diese verbesserte Version und erhält damit neue Einteilchenenergien  $\varepsilon_\alpha$  und Wellenfunktionen  $\varphi_\alpha$ . Mit diesen verbesserten Wellenfunktionen berechnet man das Potenzial  $U_\alpha$  in (1.72) neu, löst mit diesem neuen Potenzial wieder die Schrödinger Gleichung und führt diese Iteration fort, bis sich die Ergebnisse der Iteration stabilisieren und man eine selbstkonsistente Lösung der Gleichungen (1.71) und (1.72) erhält.

Dieses Verfahren, das man als “Mean Field” oder Hartree Näherung bezeichnet, berücksichtigt das Pauli Prinzip in dem Sinne, dass es dieses Prinzip bei der Besetzung der Zustände beachtet. Vernachlässigt wir aber noch die Antisymmetrisierung zwischen dem Nukleon im Zustand  $\alpha$ , für das  $U_\alpha$  berechnet wird, und dem Elektron im Zustand  $\beta$  mit dem die Wechselwirkung stattfindet. Diese Effekte werden in einer Verbesserung der Hartree Näherung, der sogenannten **Hartree-Fock Näherung** berücksichtigt. Diese Hartree-Fock Näherung führt zu nichtlokalen Potenzialen, was die Lösung der Schrödinger Gleichung erschwert (aus einer Differenzialgleichung wird eine Integro-Differenzialgleichung). Aber auch diese Hartree-Fock Näherung ist nur eine grobe Näherung, bei der Korrelationen zwischen den wechselwirkenden Elektronen vernachlässigt bleiben.

## 1.10 Molekülphysik

Ein einfaches Beispiel zum Verständnis der Mechanismen, die einzelne Atome zu Molekülen zusammenführen ist das Molekül des Kochsalzes,  $NaCl$ , mit jeweils einem Natrium ( $Na$ ) und einem Chlor ( $Cl$ ) Atom. Das Natrium ist ein Alkali Atom mit einer niedrigen Ionisierungsenergie für das Valenzelektron (siehe Absch.1.6). Es kostet also nur relativ wenig Energie, aus einem neutralen  $Na$  Atom ein einfach positiv geladenes Natrium Ion,  $Na^+$ , zu machen. Das Chlor Atom auf der anderen Seite besitzt ein Elektron weniger als das Edelgas Argon. Es hat also noch für genau ein weiteres Elektron Platz in der  $3p$  Schale. Man spricht auch davon, dass das Chlor ein Loch in der  $3p$  Schale aufweist. Die Energie für die Bindung eines weiteren Elektrons am Chlor Atom und damit zur Bildung eines  $Cl^-$  Ions ist also relativ niedrig. Es liegt daher nahe, dass Energie gewonnen wird, wenn ein Natrium Atom ein Elektron an ein Chlor Atom abgibt und sich diese beiden Ionen dann zu einem elektrisch neutralen Molekül zusammenbinden.

Dieser **ionische Bindungsmechanismus** wird deutlich, wenn man Kochsalz Moleküle in Wasser bringt: Die Wasser Moleküle besitzen ein elektrisches Dipolmoment, so dass Wasser ein gutes dielektrisches Medium darstellt. Dies bedeutet, dass die Ladungen der Ionen durch das Medium abgeschirmt werden, wodurch die Coulomb Anziehung zwischen den Ionen reduziert wird. Dadurch wird der Molekülverbund im Wasser gelöst und man findet die unabhängigen Ionen.

Die chemische Wertigkeit eines Elementes für die ionische Bindung ist also durch die Besetzung der Valenzschale, das ist die äusserte Schale in der Elektronen untergebracht sind, zu erklären. Sind im Vergleich zum Entartungsgrad der Valenzschale nur wenige Zustände der Valenzschale besetzt, so ist es energetisch relativ einfach diese Elektronen abzuführen, das Atom hat also die Tendenz ein positiv geladenes Ion zu bilden. Sind nur wenige Löcher in der Valenzschale, so nimmt das Atom gerne weitere Elektronen auf.

Diese ionische Bindung liefert eine einfache Erklärung für die Bindung von unterschiedlichen Atomen zu einem Molekül. Was aber bewegt zum Beispiel zwei Wasserstoff Atome ein  $H_2$  Molekül zu bilden? In diesem Fall liefert ja die Ionenbildung keine energetischen Vorteile.

Zur Beantwortung dieser Frage betrachten wir zunächst einmal ein System aus zwei Atomkernen des Wasserstoff, also zwei Protonen, und einem Elektron. Diese 3 Teilchen könnten sich also zu einem positiv geladenen  $H_2^+$  Ion verbinden. Zur Beschreibung dieses Systems müssen wir eigentlich die Schrödinger Gleichung für drei Teilchen lösen. Bevor wir uns aber blind in diese Aufgabe stürzen, überlegen wir uns, dass die sehr viel schwereren Protonen sich in der Regel sehr viel langsamer bewegen werden als das leichte Elektron. Wegen der großen Masse  $M_p$  der Protonen ist die kinetische Energie eines Protons bei etwa gleichem Impuls  $p$  sehr viel kleiner als die des Elektrons

$$\frac{p^2}{2M_p} \ll \frac{p^2}{2M_e}.$$

Es ist also doch vernünftig in einem ersten Schritt die kinetischen Energien der Protonen zu vernachlässigen, die Protonen also auf feste Positionen mit einem Abstand  $R$  zu fixieren, und die Schrödinger Gleichung für die Bewegung des Elektrons im Coulombfeld dieser beiden Protonen zu lösen. Dieser Ansatz, zunächst einmal das Problem der Elektronen in einem Feld festgehaltener Kernladungen zu lösen und dann im zweiten Schritt

die Bewegung der Atomkerne zu optimieren ist als **Born - Oppenheimer Näherung** bekannt.

Natürlich kennen wir die Lösung der Schrödinger Gleichung für ein Elektron im Feld eines einzelnen Protons an der Stelle  $\vec{r}_a$ . In diesem Fall hat der Hamiltonoperator die Form

$$H_{0a} = \frac{p^2}{2M_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_a|}, \quad (1.102)$$

und die stationäre Schrödinger Gleichung liefert

$$H_{0a}|\Phi_a\rangle = \epsilon_0|\Phi_a\rangle, \quad (1.103)$$

mit der Energie des Grundzustandes für das Wasserstoffatom  $\epsilon_0$  von -13.6 eV und der Wellenfunktion dieses Zustandes, der Lösung bezogen auf das Zentrum des Atoms an der Stelle  $\vec{r}_a$ :

$$\Phi_a(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Phi_a \rangle = \gamma e^{-|\vec{r} - \vec{r}_a|/(2a_0)}, \quad (1.104)$$

mit  $a_0$  dem Bohrschen Radius und  $\gamma$  einer Konstante zur Normierung der Wellenfunktion (Vergleiche z.B. Abschnitt 10.3 der Physik III). Eine entsprechende Lösung  $\Phi_b$  gibt es natürlich auch für den Hamiltonoperator  $H_{0b}$  mit dem Zentrum des Atomkerns bei  $\vec{r}_b$ , der Position des zweiten Protons.

Der Hamiltonoperator für Elektron im Coulombfeld der beiden Protonen hat dann die Form

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2M_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_a|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_b|} \\ &= H_{0a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_b|} \\ &= H_{0b} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_a|}. \end{aligned} \quad (1.105)$$

Die Coulomb Potentiale der einzelnen Protonen  $V_a$  und  $V_b$ , so wie das gesamte Coulomb Potenzial sind in Abb. 1.9 dargestellt.

Für die Lösung dieses Problems betrachten wir den Ansatz einer Linearkombination der beiden Lösungen

$$|\psi\rangle = c_a|\Phi_a\rangle + c_b|\Phi_b\rangle, \quad (1.106)$$

bei dem die Koeffizienten  $c_a$  und  $c_b$  noch zu bestimmen sind. Dieser Ansatz ist in der Literatur unter der Abkürzung LCAO (für Linear Combination of Atomic Orbitals) bekannt. Er enthält natürlich die beiden Grenzfälle ( $c_a = 1, c_b = 0$ ) und ( $c_a = 0, c_b = 1$ ), bei denen sich die Elektronen ausschliesslich am Atomkern  $a$  beziehungsweise  $b$  aufhalten. Die Koeffizienten werden nun durch Lösen der Schrödinger Gleichung mit diesem Ansatz bestimmt. Danach gilt:

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= c_a \left( \epsilon_0 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_b|} \right) |\Phi_a\rangle + c_b \left( \epsilon_0 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_a|} \right) |\Phi_b\rangle \\ &= E (c_a|\Phi_a\rangle + c_b|\Phi_b\rangle). \end{aligned} \quad (1.107)$$

Bei der Anwendung von  $H$  auf  $|\Phi_a\rangle$  wurde die Darstellung der zweiten Zeile von (1.105) während für die Anwendung von  $H$  auf  $|\Phi_b\rangle$  die dritte Zeile benutzt wurde. Für die weitere

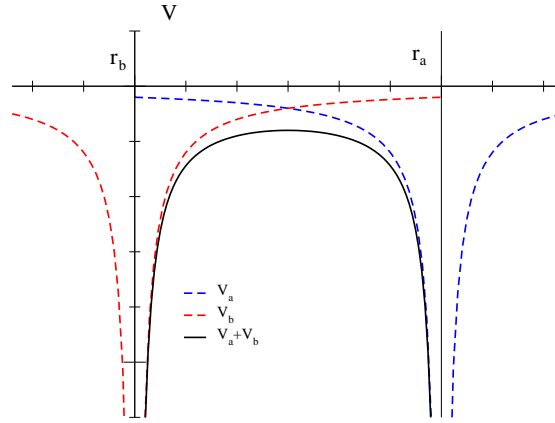


Abbildung 1.9: Coulomb Potenzial für zwei Protonen an den Stellen  $\vec{r}_a$  und  $\vec{r}_b$ .

Berechnung multiplizieren wir die Gleichung (1.107) von links mit dem Bra Zustand  $\langle \Phi_a |$  und erhalten:

$$\begin{aligned}
 & c_a \varepsilon_0 \underbrace{\langle \Phi_a | \Phi_a \rangle}_{=1} + c_a \langle \Phi_a | - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_b|} | \Phi_a \rangle + \\
 & + c_b \varepsilon_0 \langle \Phi_a | \Phi_b \rangle + c_b \langle \Phi_a | - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_a|} | \Phi_b \rangle \\
 & = E c_a \underbrace{\langle \Phi_a | \Phi_a \rangle}_{=1} + E c_b \langle \Phi_a | \Phi_b \rangle .
 \end{aligned} \tag{1.108}$$

Wir betrachten nun die verschiedenen Matrixelemente, die in dieser Gleichung auftauchen. Der Überlapp zwischen  $\Phi_a$  und  $\Phi_b$  berechnet sich zu (vergleiche (1.104))

$$X = \langle \Phi_a | \Phi_b \rangle = \gamma^2 \int d^3r e^{-|\vec{r}-\vec{r}_a|/(2a_0)} e^{-|\vec{r}-\vec{r}_b|/(2a_0)} . \tag{1.109}$$

Diese Zahl  $X$  ist positiv und kleiner als 1. Der genaue Wert hängt natürlich vom Abstand  $R = |\vec{r}_a - \vec{r}_b|$  der beiden Atomkerne ab. Genau so hängt auch der Überlapp dieser Funktionen gewichtet mit dem Coulomb Potenzial einer der beiden Atomkerne von diesem Abstand ab. Wir definieren dieses Integral

$$U = \langle \Phi_a | - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_a|} | \Phi_b \rangle , \tag{1.110}$$

und können uns leicht davon überzeugen, dass der Wert von  $U$  negativ ist. Das gleiche gilt auch für

$$D = \langle \Phi_a | - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_b|} | \Phi_a \rangle , \tag{1.111}$$

Mit diesen Abkürzungen können wir die Gleichung von (1.108) zusammenfassen zu

$$(\varepsilon_0 + D)c_a + c_b(\varepsilon_0 X + U) = E(c_a + c_b X) . \tag{1.112}$$

Eine zweite Gleichung erhalten wir dadurch, dass wir die Gleichung (1.107) von links mit dem Bra Zustand  $\langle \Phi_b |$  multiplizieren. Mit Benutzung der Abkürzungen von (1.109) bis

(1.111) ergibt sich diese zweite Gleichung zu

$$(\varepsilon_0 + D)c_b + c_a(\varepsilon_0 X + U) = E(c_b + c_a X). \quad (1.113)$$

Die beiden Gleichungen (1.112) und (1.113) lassen sich in Matrixform darstellen durch

$$\begin{pmatrix} (\varepsilon_0 + D) & (\varepsilon_0 X + U) \\ (\varepsilon_0 X + U) & (\varepsilon_0 + D) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_a \\ c_b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} 1 & X \\ X & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_a \\ c_b \end{pmatrix}. \quad (1.114)$$

Dies ist ein allgemeines Eigenwertproblem der Dimension 2. Es hat zwei Eigenwerte mit entsprechenden Eigenvektoren: Eine symmetrische Lösung mit

$$c_a = c_b \quad \text{und Energie} \quad \widetilde{E}_s = \varepsilon_0 + \frac{D + U}{1 + X} \quad (1.115)$$

und eine antisymmetrische Lösung mit

$$c_a = -c_b \quad \text{und Energie} \quad \widetilde{E}_a = \varepsilon_0 + \frac{D - U}{1 - X} \quad (1.116)$$

Man kann sich davon überzeugen, dass der symmetrische Zustand eine Energie  $\widetilde{E}_s$  besitzt die attraktiver ist als  $\varepsilon_0$ , während der antisymmetrische Zustand eine Energie aufweist, die größer ist als  $\varepsilon_0$ . Für das Elektron ist es also energetisch günstiger, wenn es einen Zustand einnimmt, der eine symmetrische Linearkombination des Atomorbital am Atomkern  $a$  und des Orbital am Atomkern  $b$  darstellt, als sich nur einem der Atomkerne zuzuordnen (siehe auch Abb. 1.10). Der genaue Wert von  $\widetilde{E}_a$  hängt natürlich noch vom Abstand  $R$  der beiden Atomkerne ab, da ja alle Größen  $X$ ,  $D$  und  $U$  von diesem Abstand abhängen. Addiert man zu diesen Energien die Coulomb Repulsion zwischen den Atomkernen also

$$E_s = \widetilde{E}_s + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}, \quad (1.117)$$

und entsprechend für  $E_a$ , so ergeben sich Werte für diese Energien als Funktion des Abstandes  $R$ , wie sie schematisch in Abb. 1.10 dargestellt sind. Man erhält ein Minimum der Energie für die symmetrische Lösung bei einem Abstand von etwa 2.5 mal dem Bohrschen Radius  $a_0$  des Wasserstoffatoms mit einer Bindungsenergie von etwa 1.76 eV. Bei kurzen Abständen überwiegt die Coulomb Repulsion der Atomkerne, so dass sowohl  $E_s$  als auch  $E_a$  positive Werte annehmen.

Es ist also für das  $H_2^+$  Ion energetisch günstiger, wenn sich die beiden Atomkerne das eine Elektron teilen und einen Abstand von etwa 2.5  $a_0$  einnehmen, als wenn das Elektron bei einem Atomkern angesiedelt wird.

Zur Bildung des  $H_2$  Moleküls wird man auch das zweite Elektron in das Orbit der symmetrischen Lösung (1.115) unterbringen. Damit dem Pauli Prinzip Rechnung getragen wird, muss der Spin dieses zweiten Elektron antiparallel zum ersten Elektron orientiert werden. Schliesslich muss auch noch die Repulsion zwischen den beiden Elektronen berücksichtigt werden. Genauere Rechnungen als die hier vorgestellte LCAO Näherung reproduzieren den experimentellen Wert von einer Bindungsenergie von 4.476 eV recht gut.<sup>5</sup>

<sup>5</sup>siehe z.B. die ausführlichere Diskussion in Demtröder: Experimentalphysik 3, Abschnitt 9.2

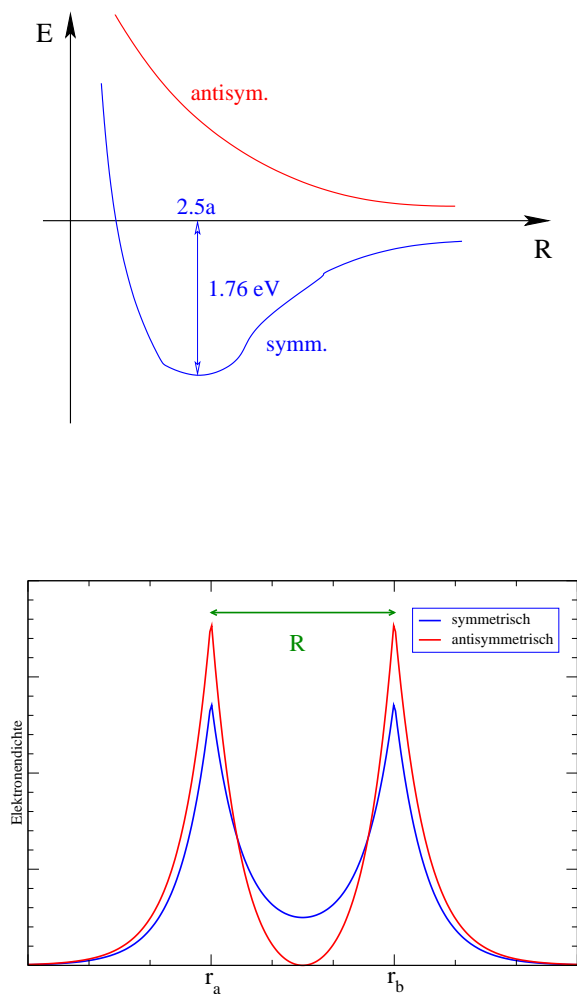


Abbildung 1.10: *Energien (oberes Bild) und Elektronendichten (unteres Bild) für die symmetrische und asymmetrische Lösung der LCAO Gleichungen als Funktion des Abstandes der Atomkerne siehe (1.115) und(1.117).*

Ein solches  $H_2$  Molekül mit 2 Atomen der Masse  $M$  in einem Abstand  $R$  voneinander, ist die einfachste Realisierung eines starren Körpers. So erwartet man natürlich auch, dass ein solcher Körper Rotationsbewegungen ausführen kann mit einer Drehachse, die senkrecht zur Verbindungslinie steht. Das klassische Trägheitsmoment für diese Drehbewegung ergibt sich zu

$$\Theta = 2M \left( \frac{R}{2} \right)^2, \quad (1.118)$$

und die Energie dieser Rotationsbewegung ist

$$E_J = \frac{\vec{J}^2}{2\Theta},$$

wobei  $\vec{J}$  den Drehimpuls bezeichnet. Beim Übergang zur Quantenmechanik müssen wir beachten, dass der Drehimpuls quantisiert ist und es ergibt sich die Energiebeziehung

$$E_J = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\Theta}, \quad (1.119)$$

wobei die Drehimpulsquantenzahl  $J$  ganze Werte annimmt. Hat man ein Atom zu solchen Rotationen angeregt, so wird es seine Drehbewegung schrittweise verlangsamen und bei jedem Übergang  $J+1 \rightarrow J$  die Energie in Form eines Photons abgeben mit der Energie

$$\begin{aligned} \Delta_{J+1 \rightarrow J} = E_{J+1} - E_J &= \frac{\hbar^2 [(J+2)(J+1) - J(J+1)]}{2\Theta} \\ &= \frac{\hbar^2 (J+1)}{\Theta}. \end{aligned}$$

Trägt man dieses Spektrum von Photonen als Funktion der Frequenzen auf, so erhält man ein Spektrum äquidistanter Linien, was typisch ist für ein **Rotationspektrum**. Aus der Analyse solcher Rotationspektren lassen sich Informationen über die Trägheitsmomente und damit über die Form von Molekülen gewinnen.

Im Rahmen der klassischen Physik kann man sich auch vorstellen, dass das Molekül eine Rotationsbewegung um die Verbindungslinie zwischen den beiden Atomen ausführt. Im Rahmen der Quantenmechanik sind aber solche Rotationen um eine Symmetrieachse nicht möglich. Man kann auch sagen, dass das Trägheitsmoment gegen Null geht und damit die Anregungsenergien unendlich groß werden.

Weitere Anregungsmoden des Moleküls werden aus der Abb. 1.10 ersichtlich. Die Energie des Systems hat ein Minimum, wenn die beiden Atome den optimalen Abstand zueinander annehmen. Das System kann aber kleine Schwingungen um diesen optimalen Abstand ausführen. Wie wir in der klassischen Mechanik gesehen haben können diese Schwingungen für kleine Amplituden sehr gut durch die Schwingungen eines Harmonischen Oszillators beschrieben werden. Bei einer quantenmechanischen Behandlung erwarten wir also für diese Vibrationszustände auch das Spektrum des Harmonischen Oszillators in der Form

$$E_{\text{Vib}} = \hbar\omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit } \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (1.120)$$

Die Frequenz dieser harmonischen Oszillatorschwingung liefert eine Aussage über die zweite Ableitung des Potentials und die Massen der beteiligten Atome. In einem komplexeren

Atome entsprechen die Schwingungen den Normalschwingungen der Klassischen Mechanik.

Die hier beschriebenen Rotationen und Vibrationen sind idealisierte Modelle für realistische kollektive Anregungsmoden von Molekülen. Natürlich ist ein Molekül kein starrer Rotator. Es ist zu erwarten, dass der optimale Abstand der beiden Atome des  $H_2$  Moleküls mit zunehmendem Drehimpuls größer wird, was zu einer Vergrößerung des Trägheitsmomentes führt. Allgemein wird man Kopplungen zwischen den Rotations- und Vibrationsanregungen der Moleküle beobachten. Darüber hinaus existieren natürlich auch noch die internen Anregungsmoden der beteiligten Atome.



# Kapitel 2

## Kern- und Teilchenphysik

### 2.1 Streuexperimente

Zu Beginn dieses Kapitels Kern- und Teilchenphysik wollen wir uns zunächst einmal die Größenverhältnisse in einem Atom vor Augen führen. Wir wissen aus der Atomphysik, dass der typische Radius eines Atoms von der Größenordnung eines Angstrom ist, also  $10^{-10}$  m. Der Radius eines Atomkerns liegt in der Größenordnung von etwa 3 fm, also  $3 \cdot 10^{-15}$  m. Um eine bessere Vorstellung von diesem Größenverhältnis zu bekommen, multiplizieren wir diese Radien mit einem Faktor von  $10^{14}$ . Bei dieser Vergrößerung entspricht der Radius des Atomkerns mit 30 cm, etwa dem eines großen Spielballs, der Radius des Atoms nimmt dann den Wert von 10 km an. Wenn wir uns also diese atomare Welt so vergrößert vorstellen, dann ist praktisch die gesamte Masse in einer kompakten Kugel mit einem Radius von 30 cm enthalten. Um diese Kugel fliegen im Abstand von einigen Kilometern eine Handvoll Elektronen, die selbst aber so klein sind, dass man sie gar nicht wahrnehmen kann. Bei dichtester Packung der Atome würde dann der nächste Nachbarkern, wiederum eine Kugel mit Radius 30 cm, in 20 Kilometer Entfernung auftauchen. Wir sehen daran, dass die atomare Welt unter den Bedingungen wie wir sie hier auf der Erde existiert doch sehr "dünn besiedelt" ist. Lediglich in sehr kompakten stellaren Objekten, wie einem Neutronenstern, wird die Materie so komprimiert, dass das Vakuum zwischen den Atomkernen aufgefüllt wird.

Woher wissen wir von dieser Verteilung der Materie? Welche Experimente haben die Physiker davon überzeugt, dass das gerade skizzierte Atommodell richtig ist und nicht etwa das Atommodell von Thomson, der annahm, dass Materie ein positiv geladenes Kontinuum ist, in dem die negativen Ladungen, die Elektronen, wie Rosinen in einem Kuchen verteilt sind?

Die Antwort auf diese Fragen wurde durch ein Experiment gegeben, das Rutherford 1910 in Zusammenarbeit mit Hans Geiger und Ernest Marsden in Manchester durchführte und deutete. In diesem **Rutherford'schen Streuexperiment** wurden  $\alpha$ -Teilchen, das sind die Atomkerne von Helium und deshalb zweifach positiv geladen, auf eine Goldfolie geschossen. Die  $\alpha$ -Teilchen kamen aus einer Radium Quelle (siehe Abschnitt Radioaktivität über  $\alpha$  Zerfall) und hatten eine maximale kinetische Energie von 7.7 MeV. Dabei beobachteten Rutherford und seine Mitarbeiter, dass die meisten der  $\alpha$ -Teilchen die Goldfolie ohne Auslenkung durchdrangen. Einige wurden aber abgelenkt und von diesen aus

der ursprünglichen Bewegungsrichtung abgelenkten Teilchen wurden einige sogar in die Rückwärtsrichtung gestreut.

Zur Deutung dieser experimentellen Ergebnisse wollen wir zunächst eine ganz klassische Abschätzung vornehmen und dazu annehmen, dass die  $\alpha$ -Teilchen mit ihrer Masse  $m_\alpha$  und einer Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$  an unbekannte, in der Goldfolie ruhende Teilchen mit einer Masse  $m_T$  (der Index  $T$  steht für Target) gestreut werden. Die Impulserhaltung liefert uns die Beziehung:

$$m_\alpha \vec{v}_0 = m_\alpha \vec{v}_\alpha + m_T \vec{v}_T, \quad (2.1)$$

wobei  $\vec{v}_\alpha$  und  $\vec{v}_T$  für die Geschwindigkeiten des  $\alpha$ -Teilchens und des Targets nach dem Stoß stehen. Diese Gleichung können wir umformen zu

$$\vec{v}_0 = \vec{v}_\alpha + \frac{m_T}{m_\alpha} \vec{v}_T. \quad (2.2)$$

Die Energieerhaltung, die Teilchen besitzen nur kinetische Energie, liefert die Beziehung

$$\frac{1}{2} m_\alpha v_0^2 = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2 + \frac{1}{2} m_T v_T^2, \quad (2.3)$$

was uns nach einfacher Umformung die folgende Beziehung liefert:

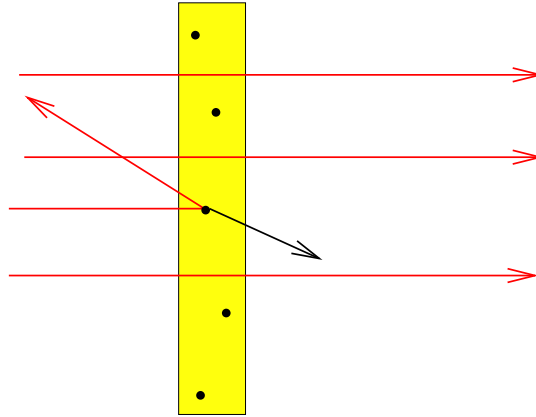
$$\begin{aligned} v_0^2 &= v_\alpha^2 + \frac{m_T}{m_\alpha} v_T^2 \\ &= v_\alpha^2 + \left( \frac{m_T}{m_\alpha} v_T \right)^2 + 2 \frac{m_T}{m_\alpha} \vec{v}_T \cdot \vec{v}_\alpha. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Die zweite dieser Gleichungen ergibt sich durch Quadrierung der Beziehung (2.2). Diese beiden Gleichungen liefern schliesslich

$$v_T^2 \left( 1 - \frac{m_T}{m_\alpha} \right) = 2 \vec{v}_T \cdot \vec{v}_\alpha. \quad (2.5)$$

Betrachten wir diese Beziehung zunächst einmal unter der Annahme, dass es sich bei den Targetteilchen um Elektronen handelt. In diesem Fall verhalten sich die Masse des Targets  $m_T$  zur Masse des  $\alpha$ -Teilchens, welches aus 4 Nukleonen besteht, wie 1 zu 8000. Die linke Seite der Beziehung (2.5) ist also eindeutig positiv. Damit müssen aber die Geschwindigkeiten des  $\alpha$ -Teilchens  $\vec{v}_\alpha$  und die des Targets  $\vec{v}_T$  nach dem Stoß eher parallel zueinander stehen. Sonst wäre ja das Skalarprodukt dieser Geschwindigkeiten auf der rechten Seite von (2.5) negativ. Wegen der Impulserhaltung muss dann aber das  $\alpha$ -Teilchen auch nach dem Stoß in Vorwärtsrichtung weiterfliegen. Diese Überlegungen bestätigen nur unsere intuitive Vorstellung, dass Teilchen wie das  $\alpha$ -Teilchen durch Streuung an erheblich leichteren und ruhenden Targetteilchen nicht wesentlich aus ihrer Bewegungsrichtung abgelenkt werden.

Die Tatsache, dass bei der Rutherfordstreuung einige  $\alpha$ -Teilchen die Goldfolie in Rückwärtsrichtung verlassen, deutet also darauf hin, dass die Teilchen, an denen die Streuung stattfindet schwerer sein müssen. In der Tat ist ja auch die Masse eines Atomkerns des Golds etwa 50 mal so groß wie die des  $\alpha$ -Teilchens. Bei diesem Verhältnis von  $m_T$  zu  $m_\alpha$  ist die linke Seite von (2.5) negativ und damit sind die Geschwindigkeiten des Targets und des  $\alpha$ -Teilchens nach dem Stoß antiparallel. Die bedeutet aber, dass das  $\alpha$ -Teilchen mit großer Wahrscheinlichkeit in Rückwärtsrichtung gestreut wird.

Abbildung 2.1: Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an den Atomkernen einer Goldfolie

Das Experiment zeigt jedoch, dass nur wenige Teilchen das Target unter Rückwärtswinkeln verlassen. Dies weist darauf hin, dass nur wenige von den  $\alpha$ -Teilchen überhaupt an den Targetteilchen gestreut werden. Die meisten verlassen die Goldfolie, ohne einen Stoß, in Vorwärtsrichtung. Mit diesen einfachen kinematischen Überlegungen können wir also bereits schliessen, dass die Targetteilchen klein aber massiv sein müssen, wie das in Abb. 2.1 dargestellt ist.

Diese kinematischen Überlegungen sind aber eine grobe Vereinfachung, die uns nur erste Hinweise über das Massenverhältnis der Stoßpartner liefern können. Für eine quantitative Analyse müssen wir die Kräfte, die zwischen den Stoßpartnern wirken, genauer berücksichtigen. Im Fall der  $\alpha$ -Streuung an den Atomkernen ist dies vor allen Dingen die Repulsion der Coulombwechselwirkung zwischen der positiven Ladung des  $\alpha$ -Teilchens,  $Z_\alpha e$ , und der des Atomkerns,  $Ze$ . Diese Wechselwirkung wird durch das Coulomb Potenzial

$$V(r) = \frac{Z Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (2.6)$$

beschrieben, mit  $r$  dem Abstand zwischen den Stoßpartnern. Die Streuung an einem solchen  $1/r$  Potenzial haben wir bereits in der Klassischen Mechanik behandelt. Dabei haben wir gesehen, dass die Trajektorien der gestreuten Teilchen durch Hyperbel Funktionen beschrieben werden. Es ergab sich ein eindeutiger Zusammenhang zwischen dem Stoßparameter  $b$  (das ist der Abstand in dem das Projektil am Streuzentrum vorbeifliegen würde, wenn keine Wechselwirkung vorhanden wäre) und dem Streuwinkel  $\theta$  (siehe auch Abb. 2.2)

$$b = \frac{Z Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2E} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (2.7)$$

Dabei ist  $E$  die Energie des gestreuten  $\alpha$ -Teilchens.

Dies bedeutet, dass alle Projektile, die mit einem Streuparameter aus dem Intervall  $[b, b + db]$  einlaufen, unter einem Streuwinkel aus dem Intervall  $[\theta, \theta + d\theta]$  gestreut werden. Also alle Projektile die in der Ringfläche der Größe  $2\pi b db$  eintreten werden in eine Ringfläche mit dem Streuwinkel  $\theta$  gestreut. Natürlich können wir diese Ringflächen auch noch bezüglich des Azimutwinkels  $\varphi$  segmentieren und erhalten die Regel, dass alle Projektile, die durch die Fläche

$$d\sigma = b db d\varphi, \quad (2.8)$$

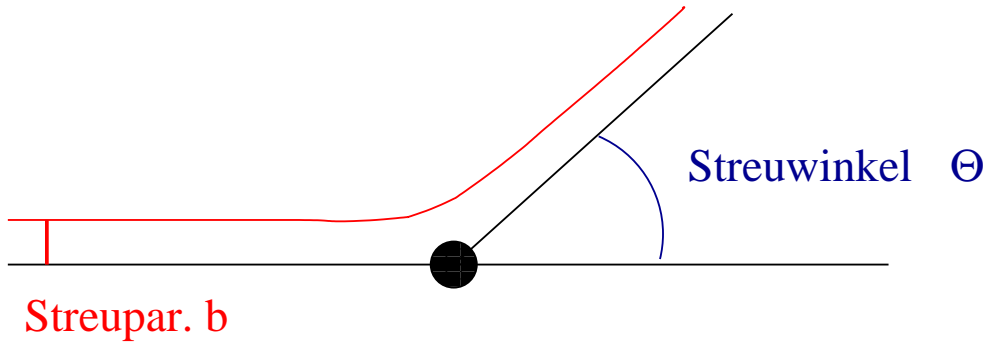


Abbildung 2.2: Trajektorie eines gestreuten Teilchens

eintreten, in das Winkelsegment

$$d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\varphi, \quad (2.9)$$

gestreut werden. Stellt man also im Abstand  $R$  einen Detektor für die gestreuten Teilchen auf, der den Winkelbereich  $[\theta_0, \theta_1]$  beziehungsweise  $[\varphi_0, \varphi_1]$  abdeckt, so hat dieser die Fläche

$$\Delta F = R^2 \int d\Omega = R^2 \int_{\varphi_0}^{\varphi_1} d\varphi \int_{\theta_0}^{\theta_1} \sin \theta \, d\theta. \quad (2.10)$$

Nimmt man an, dass die Targetfläche gleichmäßig mit Projektilen bestrahlt wird, so ist die Wahrscheinlichkeit, Projektile nach der Streuung in einem Winkelbereich  $d\Omega$  zu finden gleich der Fläche  $d\sigma$  durch die die Projektile einlaufen müssen um in diesen Winkelbereich gestreut zu werden:

$$d\sigma = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega.$$

Das Verhältnis  $d\sigma$  zu  $d\Omega$  nennt man den **differenziellen Wirkungsquerschnitt** für die Streuung in den entsprechenden Winkelbereich. Dieser differenzielle Wirkungsquerschnitt ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit einer Streuung in den bezeichneten Winkelbereich. Er hat die Dimension einer Fläche und entspricht ja auch gerade der Größe der Eintrittsfläche. Zur Berechnung bilden wir das Verhältnis aus den entsprechenden Größen in (2.8) und (2.9)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b \, db \, d\varphi}{\sin \theta \, d\theta \, d\varphi} = \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta}. \quad (2.11)$$

Für den speziellen Fall der Streuung an einem Coulomb Potenzial können wir aus der Beziehung (2.7) die entsprechende Ableitung berechnen

$$\frac{db}{d\theta} = \frac{Z Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2E} \left( -\frac{1}{\sin^2 \theta/2} \right) \frac{1}{2}. \quad (2.12)$$

Ausserdem berechnen wir aus (2.7) den Faktor

$$\frac{b}{\sin \theta} = \frac{Z Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2E} \frac{\cot(\theta/2)}{\sin \theta} \quad (2.13)$$

Ersetzen wir in diesem Ausdruck

$$\frac{\cot(\theta/2)}{\sin \theta} = \frac{\cos(\theta/2)}{\sin(\theta/2) \sin \theta} = \frac{\cos(\theta/2)}{\sin(\theta/2) 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)} = \frac{1}{2 \sin^2(\theta/2)},$$

und setzen (2.12) und (2.13) in (2.11) ein, so ergibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Rutherford Streuung im Rahmen der Klassischen Mechanik zu

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \left( \frac{Z Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2E} \right)^2 \frac{1}{4 \sin^4(\theta/2)}. \quad (2.14)$$

Dabei haben wir den Betrag des Ausdruckes betrachtet, da ja der differentielle Wirkungsquerschnitt eine Wahrscheinlichkeit darstellt und deshalb positiv definit sein muss.

Wie bestimmt man den differentiellen Wirkungsquerschnitt nun aber im Experiment? Man misst dazu die Zahl der Projektile, die in einem bestimmten Zeitintervall in den betrachteten Raumwinkel gestreut werden,  $dn$ , und die Zahl der Projektile, die insgesamt in dieser Zeiteinheit auf das Target geschossen werden,  $N_0$ . Das Verhältnis dieser beiden Zahlen ist gleich dem Verhältnis der Fläche, die getroffen werden muss, damit das Projektil in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut wird, zur gesamten bestrahlten Fläche  $F$

$$\frac{dn}{N_0} = \frac{N_T b db d\varphi}{F}, \quad (2.15)$$

dabei haben wir berücksichtigt, dass in dem Target nicht nur ein Streuzentrum vorliegt sondern  $N_T$ . Im Zähler dieses Ausdruckes steht also gerade das Produkt aus  $N_T$  und  $d\sigma$  (siehe (2.8)). Damit können wir dieses Verhältnis auch umschreiben in

$$\frac{dn}{N_0} = \frac{N_T}{F} \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| d\Omega. \quad (2.16)$$

Die Gesamtzahl der Streuzentren im bestrahlten Volumen,  $N_T$  ist gleich der Atomdichte multipliziert mit dem Volumen. Dabei ist das Volumen als Produkt aus der Targetfläche,  $F$ , multipliziert mit der Targetdicke  $t$  eingesetzt.

$$N_T = F t \rho \frac{A_0}{A}, \quad (2.17)$$

wobei  $\rho$  die Massendichte des Targetmaterials,  $A$  das Atomgewicht des Targets und  $A_0$  die Avogadrozahl bezeichnen. Setzt man diesen Ausdruck für  $N_T$  in (2.15) ein, so ergibt sich für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = t \rho \frac{A_0}{A} \frac{1}{N_0} \frac{dn}{d\Omega} \quad (2.18)$$

Das Verhältnis  $dn/d\Omega$  bezeichnet dabei die Zahl der Projektile, die in dem vorgegebenem Zeitintervall im Detektor, der den Raumwinkel  $d\Omega$  abdeckt (siehe auch (2.10)), registriert werden. Damit stehen also auf der rechten Seite nur Größen, die im Experiment bestimmt werden können, so dass mit (2.18) eine Messvorschrift zur Bestimmung des differentiellen Wirkungsquerschnittes gegeben ist.

Mit dieser Messvorschrift einerseits und dem Ausdruck für den berechneten Wirkungsquerschnitt (2.14) andererseits haben wir also die Möglichkeit die theoretische Vorhersage für den differentiellen Wirkungsquerschnitt mit experimentellen Werten zu vergleichen. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist sozusagen die Schnittstelle zum Vergleich von Theorie und Experiment bei Streuversuchen.

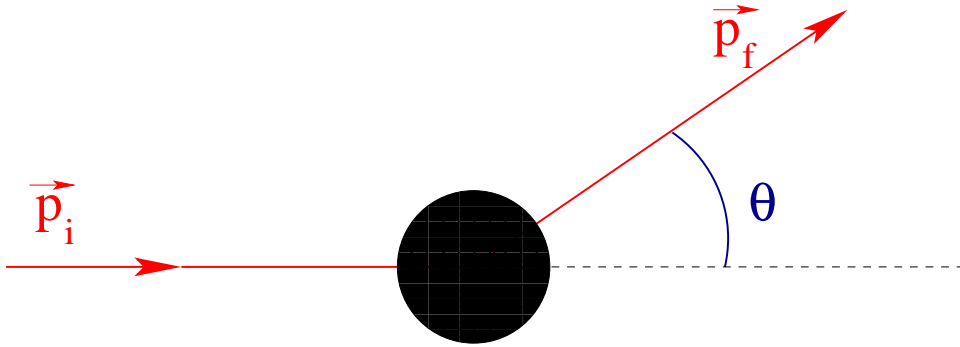


Abbildung 2.3: Impulse vor und nach einer elastischen Streuung

Bei unseren Überlegungen zur Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnittes haben wir unbewegliche Streuzentren angenommen. Zur Berücksichtigung von Rückstoßeffekten, dass also etwa durch die Streuung der  $\alpha$ -Teilchen auch die Atomkerne des Targets in Bewegung versetzt werden, transformiert man die Darstellung des Streuprozesses am geschicktesten in die Koordinaten des Schwerpunktes aus Projektil und Target und den Relativkoordinaten. Wir verzichten an dieser Stelle auf die Darstellung dieser rein kinematischen Transformation.

Außerdem haben wir bisher die Effekte der Quantenmechanik vernachlässigt, was hier nun korrigiert werden soll. Auch bei der quantenmechanischen Behandlung wollen wir Rückstoßeffekte vernachlässigen und uns auf die Behandlung der elastischen Streuung, bei der keine Energie auf das Streuzentrum übertragen wird, beschränken.

Damit ist der Betrag des Projektilimpulses vor der Streuung,  $\vec{p}_i$ , gleich dem Betrag des Impulses nach der Streuung,  $\vec{p}_f$ ,

$$|\vec{p}_i| = |\vec{p}_f| = p, \quad (2.19)$$

und die beiden Impulse unterscheiden sich nur durch die Richtung (siehe Abb. 2.3). Die Differenz dieser Impulse entspricht dem Impuls, der auf das Target übertragen wird und trägt daher auch den Namen **Impulstransfer**

$$\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f. \quad (2.20)$$

Der Betrag dieses Impulstransfers berechnet sich aus

$$\begin{aligned} q^2 &= (\vec{p}_i - \vec{p}_f)^2 \\ &= p_i^2 + p_f^2 - 2p_i p_f \cos \theta \\ &= 2p^2 (1 - \cos \theta) \\ &= 2p^2 (2 \sin^2(\theta/2)). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Dabei haben wir (2.19) ausgenutzt und die Tatsache, dass das Skalarprodukt von  $\vec{p}_i$  und  $\vec{p}_f$  durch das Produkt der Beträge und dem Cosinus des Streuwinkels  $\theta$  gegeben ist (siehe Abb. 2.3). Bei vorgegebener Energie der Projektile und damit vorgegebenem Betrag des Impulses  $p$  nimmt also der Impulstransfer  $q$  Werte an zwischen

$$0 \leq q \leq 2p \quad \text{für} \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad (2.22)$$

der maximale Impulstransfer,  $q = 2p$ , ergibt sich also für Rückwärtsstreuung bei  $\theta = \pi$ .

Für die Berechnung des Wirkungsquerschnittes betrachten wir zunächst einmal die Reaktionsrate für den Übergang  $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_f$ . Nach **Fermis Goldener Regel** ist diese Übergangsrate gegeben durch

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \rho_f(E). \quad (2.23)$$

Wir können an dieser Stelle diese Goldene Regel nicht beweisen und verweisen dazu auf die Vorlesung Quantenmechanik. Aber wir wollen diese Regel plausibel machen.

Die Übergangsrate oder Reaktionsrate  $W_{i \rightarrow f}$  ist zunächst einmal verknüpft mit der Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$M_{fi} = \langle f | \tilde{H} | i \rangle, \quad (2.24)$$

das Matrixelement des Überganges vom Anfangszustand  $|i\rangle$  unter Einfluss der Wechselwirkung  $\tilde{H}$  zum Endzustand  $|f\rangle$ . Dieses Matrixelement ist die Projektion des Zustandes  $\tilde{H}|i\rangle$  auf den Endzustand. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist dann aber proportional zum Betragsquadrat dieser Amplitude, wie das auch in (2.23) erfolgt.

Außerdem die Übergangswahrscheinlichkeit aber auch proportional zum Entartungsgrad des Endzustandes, oder allgemeiner gesagt zur Dichte der Endzustände bei der entsprechenden Energie,  $\rho_f(E)$ .

Wie sieht diese Endzustandsdichte im konkreten Fall aus? Sie ist gegeben durch den Quotienten aus der Anzahl der Phasenraumzustände  $dn(E)$  bei der Energie  $E$  und dem Energieintervall  $dE$

$$\rho_f(E) = \frac{dn(E)}{dE} = \frac{V 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3 \frac{p}{m} dp}. \quad (2.25)$$

Bei der zweiten Gleichung haben wir ausgenutzt, dass  $n(E)$  sich als das Produkt des betrachteten Volumens im Ortsraum  $V$  und der Zahl der Zustände mit der Energie  $E = p^2/2m$  im Impulsraum dividiert durch das Planksche Wirkungsquantum  $h = 2\pi\hbar$  zur dritten Potenz ergibt. Außerdem berechnen wir aus der Energie - Impulsrelation

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \rightarrow \quad dE = \frac{p}{m} dp.$$

Der differenzielle Wirkungsquerschnitt hängt mit der Reaktionsrate  $W$  zusammen über

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \frac{W_{i \rightarrow f}}{4\pi j}, \quad (2.26)$$

mit der Stromdichte  $j$  im Eingangskanal

$$j = \frac{p}{m} \frac{1}{V}.$$

All dies zusammengefasst ergibt

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \frac{V^2 m^2}{(2\pi)^2 \hbar^4} |M_{fi}|^2. \quad (2.27)$$

Wenden wir uns nun der Berechnung der Übergangsamplitude zu

$$M_{fi} = \langle f | \tilde{H} | i \rangle. \quad (2.28)$$

Die Wechselwirkung  $\tilde{H}$  ist in unserem Beispiel der Streuung von  $\alpha$  Teilchen am Coulomb Potenzial des Atomkerns gegeben durch

$$\tilde{H} = Z_\alpha e \Phi(\vec{r}), \quad (2.29)$$

mit  $\Phi(\vec{r})$  dem Coulomb Potenzial der Ladungsverteilung des Atomkerns an der Position  $\vec{r}$  des Projektils  $\alpha$ -Teilchen. Die Berechnung des Matrixelementes in (2.28) führen wir in der **Bornschen Näherung**, das ist die Störungstheorie in der ersten Ordnung, durch. Dies bedeutet, dass wir für den Anfangs- und den Endzustand die Wellenfunktion des entsprechenden freien  $\alpha$ -Teilchens (also ohne eine Störung durch das Coulomb Potenzial) annehmen. Konkret bedeutet dies für den Anfangszustand mit dem Impuls  $\vec{p}_i = \hbar\vec{k}_i$  die Wellenfunktion

$$\psi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}},$$

und entsprechend für den Endzustand mit dem Impuls  $\vec{p}_f = \hbar\vec{k}_f$ . Der Normierungsfaktor  $1/\sqrt{V}$  ist dabei so gewählt, dass die Wellenfunktionen in dem Volumen  $V$  auf eins normiert sind. Damit ergibt sich die Berechnung des Matrixelementes (2.28) in der Ortsdarstellung zu

$$\begin{aligned} M_{fi} &= \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i\vec{k}_f \vec{r}} Z_\alpha e \Phi(\vec{r}) e^{i\vec{k}_i \vec{r}} \\ &= \frac{1}{V} \int d^3r e^{i\vec{k} \vec{r}} Z_\alpha e \Phi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Dabei haben wir den Wellenzahlvektor  $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$  eingeführt, der mit dem Impulstransfer aus (2.20) über  $\vec{q} = \hbar\vec{k}$  verknüpft ist.

Zur Berechnung dieses Integrals verwenden wir die Greensche Identität

$$\int d^3r \Phi \Delta \Psi = \int d^3r \Psi \Delta \Phi, \quad (2.31)$$

die gilt, wenn das Oberflächenintegral über den Rand des  $R^3$  für die beteiligten Felder  $\Phi$  und  $\Psi$

$$\int d\vec{f} (\Phi \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Phi) = 0.$$

Wir betrachten diese Identität für den Fall, dass wir  $\Phi$  mit dem Coulomb Potenzial des Targetkerns identifizieren, so dass mit der Poisson Gleichung gilt

$$\Delta \Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad (2.32)$$

wobei  $\rho(\vec{r})$  die die Quelle des elektrischen Feldes also die Ladungsverteilung des Targetkerns ist. Für  $\Psi$  nehmen wir die Funktion

$$\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{q^2} e^{i\vec{k} \vec{r}}, \quad (2.33)$$

an. Damit gilt nämlich

$$\Delta \Psi = e^{i\vec{k} \vec{r}}.$$



Mit dieser Nomenklatur können wir (2.30) umschreiben in

$$\begin{aligned}
M_{fi} &= \frac{Z_\alpha e}{V} \int d^3r \Phi \Delta \Psi \\
&= \frac{Z_\alpha e}{V} \int d^3r \Psi \Delta \Phi \\
&= \frac{Z_\alpha e}{V} \left( -\frac{\hbar^2}{q^2} \right) \int d^3r e^{i\vec{k}\vec{r}} \left( -\frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_0} \right) \\
&= \frac{Z_\alpha Z e^2 \hbar^2}{V \varepsilon_0 q^2} \int d^3r e^{i\vec{k}\vec{r}} f(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Dabei haben wir die Funktion  $f(\vec{r})$  eingeführt über die Beziehung

$$\rho(\vec{r}) = Z e f(\vec{r});$$

diese Funktion  $f(\vec{r})$  entspricht also der Ladungsverteilung mit der Normierung, dass das Integral über  $f(\vec{r})$  auf 1 normiert ist. Außerdem führen wir den **Formfaktor** der Ladungsverteilung,  $F(\vec{q})$  ein über die Definition

$$F(\vec{q}) = \int d^3r e^{i\vec{k}\vec{r}} f(\vec{r}), \quad \text{mit } \vec{q} = \hbar \vec{k}. \tag{2.35}$$

Der Formfaktor ist also bis auf die Normierung die Fouriertransformierte der Ladungsverteilung. Speziell für eine Punktladung ist die Funktion  $f(\vec{r})$  die Diracsche Deltafunktion und es gilt

$$f(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad F(\vec{q}) = 1, \tag{2.36}$$

dass der zugehörige Formfaktor unabhängig vom Impulstransfer gerade gleich eins ist. Mit dieser Definition des Formfaktors ergibt sich für das Matrixelement

$$M_{fi} = \frac{Z_\alpha Z e^2 \hbar^2}{V \varepsilon_0 q^2} F(\vec{q}), \tag{2.37}$$

und mit (2.27) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt unter Benutzung von (2.21)

$$\begin{aligned}
\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| &= \frac{V^2 m^2}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left( \frac{Z_\alpha Z e^2 \hbar^2}{V \varepsilon_0 q^2} \right)^2 F^2(\vec{q}) \\
&= \left( \frac{Z_\alpha Z e^2 m}{4\pi \varepsilon_0 p^2} \right)^2 \frac{1}{4} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \\
&= \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Rutherford}} F^2(\vec{q}),
\end{aligned} \tag{2.38}$$

vergleiche auch (2.14) mit  $p^2/m = E$ .

Für eine Punktladung ( $F(\vec{q}) = 1$ , siehe (2.36)) ist also der differentielle Wirkungsquerschnitt der Quantenmechanik, berechnet in der Bornschen Näherung, identisch mit dem klassischen Ergebnis für die Rutherford Streuung (2.14). Für eine Ladungsverteilung, die von der Punktladung abweicht, ist die Abweichung des Wirkungsquerschnittes von diesem Rutherford'schen Wirkungsquerschnittes für eine Punktladung gegeben durch das Quadrat des Formfaktors.

Zur Ergänzung sei an dieser Stelle angeführt, dass dieses Ergebnis noch verallgemeinert werden kann. Die Rutherford Streuung gilt für die Streuung von spinlosen Teilchen an einem Coulomb Potenzial ( $\alpha$ -Teilchen haben ja auch den Spin 0). Zur Beschreibung der Streuung von Elektronen an einer Ladungsverteilung muss man neben der Coulomb Wechselwirkung auch die magnetische Wechselwirkung berücksichtigen. Dies gilt insbesondere bei hohen Geschwindigkeiten. Die Streuung von Elektronen an einer Punktladung wird durch den Wirkungsquerschnitt der **Mott-Streuung** beschrieben:

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Mott}} = \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Rutherford}} \left( 1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2) \right), \quad (2.39)$$

mit  $\beta = v/c$  und dem Streuwinkel  $\theta$ . Auch in diesem Fall gilt für die Streuung an einer ausgedehnten Ladungsverteilung

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = \left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Mott}} F^2(\vec{q}). \quad (2.40)$$

Um ein Gefühl dafür zu bekommen, wie sich die Form einer Ladungsverteilung auf den Wirkungsquerschnitt auswirkt, soll an dieser Stelle der Formfaktor für eine Ladungsverteilung berechnet werden, die sich homogen auf das Volumen einer Kugel mit dem Radius  $R$  verteilt. In diesem Fall ist die Funktion  $f(r)$  also definiert durch

$$f(r) = \begin{cases} \frac{3}{4\pi R^3} & \text{für } r \leq R \\ 0 & \text{für } r > R \end{cases}$$

Damit berechnet sich der Formfaktor  $F(q)$  nach (2.35) in Kugelkoordinaten (dabei steht  $\xi$  für  $\cos\vartheta$  und wir legen das Koordinatensystem so, dass der Impulstransfervektor  $\vec{k}$  in Richtung der  $z$ -Achse zeigt)

$$\begin{aligned} F(q = \hbar k) &= \frac{3}{4\pi R^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r^2 dr \int_{-1}^1 dx e^{iqr\xi} \\ &= \frac{6\pi}{4\pi R^3} \int_0^R r^2 dr \frac{1}{ikr} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \\ &= \frac{6\pi}{4\pi R^3} \int_0^R r^2 dr \frac{2 \sin(kr)}{kr} \\ &= 3 \frac{\sin(kR) - kR \cos(kR)}{(kR)^3}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Für kleine Wellenzahlen  $k$ , bzw Impulstransfers  $q$ , ist  $F(q) = 1$ . Signifikante Abweichungen des Formfaktors von dem einer Punktladung ergeben sich erst für große Impulstransfers. So nimmt der Formfaktor den Wert null an für

$$\frac{qR}{\hbar} \approx 4.5. \quad (2.42)$$

Je kleiner der Radius  $R$  einer solchen Ladungsverteilung ist, umso größer muss der Impulstransfer  $q$  sein, damit man eine signifikante Abweichung von der Streuung an einer Punktladung im differentiellen Wirkungsquerschnitt beobachten kann. Ist der Impuls  $p$  des Projektils und damit der maximal mögliche Impulstransfer  $q$  (siehe (2.21)) nicht groß

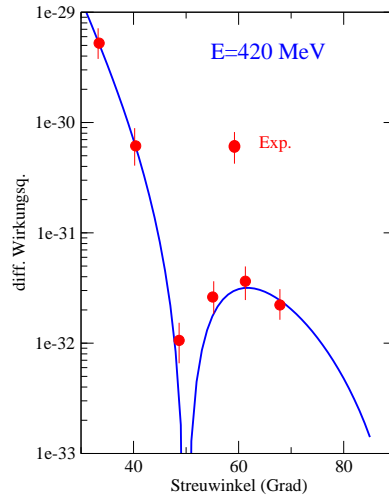


Abbildung 2.4: Differenzieller Wirkungsquerschnitt für elastische Elektronenstreuung an  $^{12}\text{C}$ . Die Energie der Elektronen ist 420 MeV, die durchgezogene Linie entspricht dem berechneten Wirkungsquerschnitt unter der Annahme, dass eine die Kernladung der einer homogen geladenen Kugel entspricht.

genug so kann man die Abweichung von der Punktladung nicht auflösen. Deshalb benötigt man zur Untersuchung von besonders kleinen Strukturen besonders große Beschleuniger um die Projektile auf die nötigen Impulse zu beschleunigen.

Als Beispiel für die elastische Streuung sind in Abb. 2.4 Daten für die elastische Streuung von Elektronen am  $^{12}\text{C}$  skizziert. Die Einschussenergie der Elektronen ist 420 MeV also wesentlich höher als die Ruheenergie der Elektronen. Dies bedeutet dass wir den Impuls der Elektronen in diesem extrem relativistischen Grenzfall unter Vernachlässigung der Ruheenergie der Elektronen direkt aus der Energie berechnen können

$$E = \sqrt{(m_e c^2)^2 + p^2 c^2} \approx pc$$

zu  $p = 420 \text{ MeV}/c$ . Die Winkelverteilung des differentiellen Wirkungsquerschnittes zeigt ein Minimum oder auch eine Nullstelle bei einem Streuwinkel von  $\theta$  gleich 50 Grad. Mit (2.21) entspricht dies einem Impulstransfer von

$$q = \sqrt{2p^2(1 - \cos \theta)},$$

von 355 MeV/c. Mit (2.42) ergibt sich also eine Abschätzung für den Radius des Atomkerns von

$$R = \frac{4.5}{q} \hbar = \frac{4.5}{355 \text{ MeV}} \hbar c = \frac{4.5}{355 \text{ MeV}} 197.3 \text{ MeV fm} = 2.497 \text{ fm}.$$

Diese Abschätzung stimmt sehr gut mit den Ergebnissen von realistischeren Rechnungen überein.

Natürlich gibt es inzwischen eine große Menge sehr präziser Daten und auch theoretische Untersuchungen, die diese Daten mit großer Genauigkeit beschreiben. Aus solchen Analysen extrahiert man Details über die Form der Ladungsverteilung von Atomkernen. Die Ergebnisse lassen sich kurz so zusammenfassen:

- Die Ladungsverteilung von mittleren und schweren Atomkernen mit einer Protonenzahl  $Z$  von 10 bis fast 100 zeigen eine Ladungsverteilung, die im Zentrum des Kerns einen konstanten Wert annimmt, der fast unabhängig vom betrachteten Atomkern ist.
- Am Rand fällt der Wert für die Ladungsdichte mit wachsendem vom Zentrum sehr rasch auf den Wert null ab. Das Modell der homogen geladenen Kugel ist also eine sehr gute Näherung.

Aus der Tatsache, dass die Dichte  $\rho$  im Zentrum der Atomkerne ziemlich unabhängig von der Zahl der Nukleonen ist, ergibt sich also, dass das Volumen  $V$  der Kerne linear mit der Nukleonenzahl  $A$  anwächst ( $\rho = A/V$ ). Da das Volumen proportional zu  $R^3$  ist ergibt sich also zwischen dem Radius  $R$  der Atomkerne und der Nukleonenzahl die Beziehung

$$R = \kappa A^{1/3} .$$

Die Analysen der Elektronenstreudaten an den verschiedenen Atomkernen liefern eine entsprechende Faustformel für die Radien mit

$$R = 1.21 A^{1/3} \text{ fm} \tag{2.43}$$

## 2.2 Massenzahl und Bindungsenergie

Ein Atomkern besteht aus Nukleonen, den positiv geladenen Protonen und den elektrisch neutralen Neutronen. Er ist also eindeutig gekennzeichnet durch die Angabe der

- Zahl der Protonen, die auch häufig Kernladungszahl genannt wird. Wir werden diese Kernladungszahl in der Regel mit  $Z$  bezeichnen.
- Zahl der Neutronen, die wir in der Regel mit  $N$  bezeichnen werden.
- Alternativ kann man natürlich die Gesamtzahl der Nukleonen

$$A = Z + N, \quad (2.44)$$

eingeführen und den Atomkern durch die Angabe von  $A$  und  $Z$  bzw. durch die Angabe von  $A$  und  $N$  charakterisieren.

Damit das Atom insgesamt elektrisch neutral ist, muss es bei einem Atomkern mit  $Z$  Protonen auch  $Z$  Elektronen besitzen. Die chemischen Eigenschaften eines Atoms sind durch die Elektronenhülle definiert. Deshalb unterscheidet man auch die verschiedenen Elemente nach der Zahl  $Z$  der Protonen beziehungsweise Elektronen.

So besitzt z.B. das Element Sauerstoff (chemische Bezeichnung  $O$ ) jeweils 8 Elektronen und hat damit auch die Kernladungszahl  $Z = 8$ . Zum Element Sauerstoff gibt es aber Atomkerne mit ganz unterschiedlicher Anzahl von Neutronen. Man unterscheidet dieses-unterschiedlichen Atomkerne des gleichen Elementes häufig dadurch, dass man die Nukleonenzahl  $A$  als einen oberen Index zur Elementbezeichnung hinzufügt. So bezeichnen etwa

$${}^{16}O, \quad {}^{17}O \quad \text{und} \quad {}^{18}O \quad (2.45)$$

die Atomkerne des Sauerstoffs mit einer Nukleonenzahl  $A$  von 16, 17 und 18, beziehungsweise einer Neutronenzahl von 8, 9 und 10.

Atomkerne des gleichen chemischen Elementes, also mit gleichem  $Z$  aber unterschiedlicher Neutronenzahl bezeichnet man als **Isotope**. Die Beispiele von (2.45) bezeichnen also unterschiedliche Isotope des Elementes Sauerstoff mit  $Z = 8$ .

Analog bezeichnet man verschiedene Atomkerne mit gleicher Zahl von Neutronen als **Isotone**. So sind z.B. die Atomkerne von

$${}^{16}O, \quad {}^{17}F \quad \text{und} \quad {}^{18}Ne \quad (2.46)$$

Isotone mit der gemeinsamen Neutronenzahl  $N = 8$ , die sich durch die jeweiligen Kernladungszahlen unterscheiden:  $Z = 8$  für Sauerstoff ( $O$ ),  $Z = 9$  für Fluor ( $F$ ) und  $Z = 10$  für Neon ( $Ne$ ).

Schließlich gibt es auch den Begriff der **Isobare**. Damit bezeichnet man verschiedene Atomkerne mit identischer Gesamtnukleonenzahl. So sind also in unseren Beispielen  ${}^{17}O$  und  ${}^{17}F$  Isobare zu  $A = 17$  und  ${}^{18}O$  und  ${}^{18}Ne$  Isobare zu  $A = 18$ .

Wir haben bereits verschiedene Methoden für die experimentelle Bestimmung der Masse eines Atoms kennengelernt. Nach der Relativitätstheorie ist diese Masse eines Atoms

$M(A, Z)$  verknüpft mit der Ruheenergie dieses Atoms über die Beziehung

$$\begin{aligned} E_{\text{Ruhe}}(A, Z) &= M(A, Z)c^2 \\ &= [Z(M_p + m_e) + (A - Z)M_n]c^2 + \Delta E(A, Z). \end{aligned} \quad (2.47)$$

In der zweiten Zeile dieser Gleichung haben wir die Gesamtenergie aufgeteilt in die Beiträge durch die Ruheenergien der Konstituenten, also der Protonen, Elektronen und Neutronen und einer Restenergie  $\Delta E(A, Z)$ .

Die Massen der Protonen  $M_p$ , der Neutronen  $M_n$  und der Elektronen  $m_e$  sind experimentell sehr genau bekannt und gegeben durch

$$\begin{aligned} M_p &= 938.272 \text{ MeV}/c^2 = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \\ M_n &= 939.565 \text{ MeV}/c^2 = 1.67492 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \\ m_e &= 0.511 \text{ MeV}/c^2 = 0.911 \cdot 10^{-30} \text{ kg}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Die Masse eines Atoms ist geringer als die Masse der Konstituenten, die Natur gewinnt Energie dadurch, dass sich die Nukleonen zu einem Atomkern verbinden. Dieser Energiegewinn wird in (2.47) durch die negative Energie  $\Delta E(A, Z)$  dargestellt.<sup>1</sup> Den Betrag dieses Energiegewinns bezeichnet man als **Bindungsenergie** des Atomkerns mit  $A$  Nukleonen und  $Z$  Protonen.

Alternativ zur Darstellung in (2.47) gibt man die Ruheenergie eines Atoms auch häufig mit Bezug auf die **atomare Masseneinheit**  $u$  an in der Form

$$E_{\text{Ruhe}}(A, Z) = A u c^2 + \delta E(A, Z), \quad (2.49)$$

an. Die atomare Masseneinheit ist ein zwölftel der Atommasse des Kohlenstoffisotops  $^{12}\text{C}$

$$u = \frac{1}{12} E_{\text{Ruhe}}(A = 12, Z = 6) = 931.481 \text{ MeV}/c^2 = 1.66043 \cdot 10^{-27} \text{ kg}. \quad (2.50)$$

Die Größe  $\delta E(A, Z)$  in (2.49) bezeichnet man als Massenüberschuss oder "Mass Excess".

### 2.2.1 Das Tröpfchenmodell der Kernphysik

Aus diesen Überlegungen sehen wir, dass man durch die Messung der atomaren Massen die Bindungsenergien oder Massenüberschüsse der Atomkerne bestimmen kann. Diese Bindungsenergien sind daher wohl bekannt. Es gibt verschiedene Versuche, diese vielen experimentellen Werte für die Bindungsenergie der Atomkerne durch eine einfache Parametrisierung darzustellen.

Eine sehr erfolgreiche Parametrisierung dieser Bindungsenergien ist durch die sogenannte **Bethe-Weizsäcker'sche** Massenformel, benannt nach den Physikern Carl Friedrich von Weizsäcker und Hanns Bethe, gegeben. Diese Formel wurde zunächst von Weizsäcker 1935 vorgeschlagen (siehe C.F.v.Weizsäcker, Zeitschrift für Physik 96 (1935) 431) und dann ein

<sup>1</sup>Genau genommen enthält dieses  $\Delta E(A, Z)$  auch den Energiegewinn durch die Bindung der Elektronen an den Atomkern. Wir werden aber sehen, dass dieser Beitrag aus der Atomphysik, der ja in der Größenordnung von einigen eV liegt, im Vergleich zu den Energiegewinnen aus der Bindungsenergie des Kerns von mehreren MeV vernachlässigbar ist.

Jahr später von Bethe aufgegriffen (H.A.Bethe und R.F.Bacher, Rev. Mod. Phys. 8 (1936) 82) und leicht modifiziert in die Form

$$\Delta E(A, Z) = -a_V A + a_O A^{2/3} + a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + a_S \frac{(A - 2Z)^2}{4A} + \delta_P \frac{1}{A^{1/2}}. \quad (2.51)$$

Diese Parametrisierung enthält 5 Parameter ( $a_V, a_O, a_C, a_S, \delta_P$ ), die an die experimentellen Daten angepasst wurden. Diese Parameter haben sich mit der zunehmenden Zahl experimenteller Daten immer wieder ein wenig verändert. Wir geben weiter unten Werte an, die aus dem Buch P.Ring und P.Schuck *The Nuclear Many-Body Problem* Springer Verlag (1980) entnommen wurden.

Der Ansatz für diese Parametrisierung ist natürlich nicht willkürlich gewählt sondern basiert auf einer Modellvorstellung, dem **Tröpfchenmodell** der Kernphysik. Wir werden im folgenden dieses Tröpfchenmodell und die Parameter der Bethe-Weizsäcker Formel diskutieren.

- **Der Volumenterm:** Im Tröpfchenmodell geht man davon aus, dass die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen eine kurze Reichweite besitzen, ganz analog zur attraktiven van der Waals Wechselwirkung, die die Moleküle einer Flüssigkeit zu einem Tropfen zusammenbindet. Hätte die Wechselwirkung eine Reichweite, die groß ist im Vergleich zur Größe des Atomkerns, so würde die Bindungsenergie proportional zu der Anzahl der wechselwirkenden Nukleonenpaare anwachsen, wäre also proportional zu  $A^2$ . Wegen der kurzen Reichweite ist aber der dominante Beitrag zur Bindungsenergie, der einzige in dieser Entwicklung mit einem negativen Vorzeichen, nur proportional zur Nukleonenzahl  $A$ . Man geht also davon aus, dass jedes der Nukleonen nur mit seinen nächsten Nachbarn wechselwirken kann. Der Fit an die experimentellen Daten liefert einen Wert von

$$a_V = 15.67 \text{ MeV}. \quad (2.52)$$

- **Der Oberflächenterm:** Die volle Bindung durch die Wechselwirkung mit den Nachbarn erfahren aber nur die Nukleonen, die in der Mitte des Atomkerns ringsherum von Nachbarnukleonen umgeben sind. Die Nukleonen an der Oberfläche haben eine reduzierte Zahl von Nachbarn und deshalb muss die Attraktion des Volumenterms reduziert werden um eine Größe die proportional zur Oberfläche und damit proportional zu  $R^2$  ist. Wegen (2.43) ist aber  $R$  proportional zu  $A^{1/3}$  womit dieser Oberflächenterm die Form

$$a_O A^{2/3} \quad \text{mit} \quad a_O = 17.23 \text{ MeV}, \quad (2.53)$$

annimmt. Der Wert für  $a_O$  ergibt sich natürlich wieder rein empirisch durch den Fit an die experimentellen Daten.

- **Der Coulombterm:** berücksichtigt die abstossende Coulombwechselwirkung zwischen den Protonen. Im Rahmen des Tröpfchenmodells sollte diese Abstossung der Energie einer homogen geladenen Kugel mit der Ladung  $Ze$  und dem Radius  $R$  entsprechen. Wiederum gilt wegen (2.43), dass  $R \sim A^{1/3}$  womit der Coulombterm die Form

$$a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad \text{mit} \quad a_C = 0.714 \text{ MeV}, \quad (2.54)$$

erfährt.

Abbildung 2.5: Beitrag des Coulomb- und des Symmetrieterms in der Bethe-Weizsäcker Formel (2.51) zur Energie der Isobare mit  $A = 100$ .

- **Der Symmetrieterm:** Wie wir noch im Laufe dieses Abschnittes sehen werden, ist es energetisch günstiger, wenn die Zahl der Protonen gleich der Zahl der Neutronen ist. Daraus ergibt sich der Symmetrieterm, der repulsiv ist für  $Z \neq N$  und proportional zu  $(N - Z)^2$ , beziehungsweise wegen (2.44) proportional zu  $(2A - Z)^2$ . Daraus ergibt sich der Symmetrieterm zu

$$a_S \frac{(2A - Z)^2}{4A} \quad \text{mit} \quad a_S = 93.15 \text{ MeV}. \quad (2.55)$$

- **Der Paarenergieterm:** Auch auf die Ursachen dieses Paarenergieterms werden wir zu einem späteren Zeitpunkt eingehen. Er liefert eine kleine Korrektur zur Bindungsenergie, die zum Ausdruck bringt, dass es energetisch günstiger ist, wenn alle Protonen zu Paaren gekoppelt werden und wenn ebenso alle Neutronen zu Paaren gekoppelt werden. In diesem Sinne ergibt sich also eine optimale Energie, wenn  $Z$  und  $N$  gerade Zahlen sind, man spricht dann von einem  $gg$  Kern. In einem  $ug$  Kern oder  $gu$  Kern gibt es jeweils ein ungepaartes Nukleon, was zu einer Reduktion der Bindungsenergie führt. In einem  $uu$  Kern sind je ein Proton und ein Neutron ungepaart, was zu einer weiteren Reduktion der Bindungsenergie, also dem Betrag von  $\Delta E(A, Z)$  führt. Dies wird zum Ausdruck gebracht durch

$$\delta_P = \begin{cases} -11.2 \text{ MeV} & \text{für } gg \text{ Kerne} \\ 0 & \text{für } ug \text{ oder } gu \text{ Kerne} \\ 11.2 \text{ MeV} & \text{für } uu \text{ Kerne.} \end{cases} \quad (2.56)$$

Für ein vorgegebenes  $A$  ist die Energie der Bethe-Weizsäcker Formel als Funktion von  $Z$  durch das Wechselspiel zwischen Coulombterm und Symmetrieterm definiert. Der Coulombterm bringt zum Ausdruck, dass es wegen der Coulombrepulsion energetisch ungünstig ist eine große Protonenzahl  $Z$  zu haben. Andererseits sorgt der Symmetrieterm dafür, dass das Verhältnis zwischen Protonen und Neutronen nicht zu sehr aus dem Gleichgewicht gebracht wird.



Abbildung 2.6: *Darstellung der Kernladungszahl  $Z$  bei der die Bethe-Weizsäcker Formel (2.51) für gegebenes  $A$  maximale Bindungsenergie ergibt.*

In Abb. 2.5 sind die Beiträge des Coulomb- und des Symmetrieterms zur Bethe-Weizsäcker Formel für verschiedene Isobare mit  $A = 100$  dargestellt. Für diese Nukleonenzahl ergibt sich also ein Minimum in der Energie bei  $Z = 43$  (das wäre das Technetium Isotop  $^{100}\text{Tc}$ ). Die Protonenzahl ist also wegen des Coulombterms deutlich kleiner als die Neutronenzahl. Wiederholt man diese Untersuchung für die verschiedenen Nukleonenzahlen, so ergibt sich eine jeweils optimale Bindungsenergie aus der Bethe-Weizsäcker Formel (unter Vernachlässigung des Paarterms) für ein  $Z$ . Dieser Wert ist in Abb. 2.6 dargestellt.

Im einem weiteren Schritt berechnen wir die Bindungsenergie pro Nukleon nach (2.51), also den Betrag von  $\Delta E$  dividiert durch die Nukleonenzahl  $A$  als Funktion von  $A$ . Dabei wird zu jeder Nukleonenzahl  $A$  die Kernladungszahl  $Z$  gewählt, für die die Energie minimal also die Bindungsenergie maximal wird. Die Ergebnisse dieser Rechnung und die Beiträge der einzelnen Terme des Tröpfchenmodells sind in Abb. 2.7 dargestellt.

Der Volumenterm würde in dieser Abbildung eine Konstante bei  $a_V = 15.67$  MeV liefern, die aber nicht aufgetragen ist. Durch den Oberflächenterm wird die Bindungsenergie vor allen Dingen bei kleinen Werten von  $A$  abgesenkt. Der Coulombterm und, da die Coulomb Repulsion dafür sorgt, dass  $N$  größer als  $Z$  wird, auch der Symmetrieterm liefern eine weitere Reduktion der Bindungsenergie, die insbesondere für große Massenzahlen wichtig wird. Als Folge davon erhält man ein Maximum der Bindungsenergie pro Nukleon zwischen  $A = 50$  und  $A = 60$ . In diesem Bereich ergibt sich eine Bindungsenergie von etwa 8.7 MeV pro Nukleon, also ein Wert der deutlich größer ist als die typischen Bindungsenergien der Elektronen in der Hülle.

Wir sehen an diesem Ergebnis aber auch, dass man offensichtlich Energie dadurch gewinnen kann, dass man leichte Atomkerne zu den mittelschweren Kernen im Bereich  $A = 60$  fusioniert. Andererseits ergibt sich auch ein Energiegewinn dadurch, dass man schwere Atomkerne in leichte Fragmente spaltet. Wir werden auf diese Aspekte der Kernfusion und Kernspaltung zurückkommen.

Atomkerne mit Massenzahlen von  $A$  oberhalb von 240 werden in der Natur nicht beob-

Abbildung 2.7: *Bindungsenergie pro Nukleon aus der Bethe-Weizsäcker Formel (2.51) als Funktion der Nukleonenzahl  $A$*

achtet; sie sind offensichtlich instabil gegenüber einem Zerfall in leichtere Fragmente.

Die in der Natur existierenden Atomkerne und solche, die man inzwischen künstlich erzeugt hat, sind in der Übersicht einer Nuklidkarte in Abb. 2.8 dargestellt. In dieser Nuklidkarte sind Atomkerne aufgetragen mit anwachsender Neutronenzahl  $N$  in horizontaler und anwachsender Protonenzahl  $Z$  in vertikaler Richtung. Jedes Isotop ist durch ein Kästchen dargestellt, wobei die Farbe des Kästchens ein Maß für die Stabilität beziehungsweise die mittlere Lebensdauer des Isotops darstellt. Dabei bezeichnen schwarze Kästchen Isotope mit einer Lebensdauer, die größer ist als etwa 30 Millionen Jahre, das sind also stabile Isotope. Über die Farben dunkelblau, hellblau zu dunkelgrün verringert sich diese Lebensdauer auf etwa 1 Sekunde. Isotope, die in hellgrün, gelb oder rosa Farben dargestellt sind haben eine kürzere Lebensdauer bis hinunter auf  $10^{-15}$  Sekunden<sup>2</sup>.

Man sieht an dieser Darstellung, dass die stabilen Isotope ein Verhältnis von  $Z$  zu  $N$  besitzen, das dem der Isotope mit maximaler Bindungsenergie bei vorgegebener Nukleonenzahl entspricht, wie wir es aus der Analyse der Bethe-Weizsäcker Formel in Abb. 2.6 extrahiert haben. Man spricht vom Tal der stabilen Isotope.

Die Nuklidkarte enthält für jedes Isotop neben der Information über die Lebensdauer auch die Angabe des “Mass Excess” (siehe  $\delta E(A, Z)$  in (2.49)) und die Häufigkeit mit der ein stabiles Isotop aufgefunden wird (“**Abundance**”). Diese Häufigkeit bezeichnet den prozentualen Anteil des spezifischen Isotops an dem gesamten Vorkommen von den verschiedenen Isotopen eines chemischen Elementes. Auf weitere Angaben, die sich in dieser Nuklidkarte finden, werden wir später eingehen.

Zur Klärung der Begriffe wollen wir an dieser Stelle einige Bemerkungen zum radioaktiven Zerfallsgesetz und zu Lebensdauern, Halbwertszeiten etc. machen. Wenn man eine Zahl von Atomkernen vorliegen hat, die mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ihre Ei-

---

<sup>2</sup>Diese Nuklidkarte und ihre Farbkodierung findet sich im Internet unter der Adresse [www.nndc.bnl.gov/nudat2/index.jsp](http://www.nndc.bnl.gov/nudat2/index.jsp). Sie kann interaktiv vergrößert werden und liefert auch Zahlenwerte zu den Eigenschaften der Isotope. Dies ist ein Service des “National Nuclear Data Centers” des Forschungszentrums in Brookhaven, Long Island, New York, USA

Abbildung 2.8: Nuklidkarte in der Übersicht. Die Isotope sind in einem Farbcode dargestellt, der sich an der Lebensdauer der Isotope orientiert (siehe Text)

enschaften ändern, so spricht man vom radioaktiven Zerfall dieser Isotope. Wir werden die verschiedenen Formen des radioaktiven Zerfalls noch besprechen. Es werden dabei mit der Zeit immer weniger Atomkerne von diesem Typ übrigbleiben. Bezeichnen wir die Zahl der Atomkerne, die zur Zeit  $t$  vorliegen, mit  $\mathcal{N}(t)$ , so ergibt sich für die Änderung dieser Zahl mit der Zeit  $t$  der folgende Ausdruck

$$\frac{d\mathcal{N}}{dt} = -\lambda\mathcal{N}(t); \quad (2.57)$$

die Zahl der Atomkerne, die in einem Zeitintervall zerfallen ist proportional zu der Zahl der vorhandene Atomkerne multipliziert mit einer Konstanten  $\lambda$ , die charakteristisch ist für diesen spezifischen Zerfall. Man nennt diese Konstante deshalb auch **Zerfallskonstante**. Die Lösung der Differenzialgleichung (2.57) ist sehr einfach und liefert

$$\mathcal{N}(t) = \mathcal{N}_0 e^{-\lambda t} \quad \text{mit} \quad \mathcal{N}_0 = \mathcal{N}(t=0). \quad (2.58)$$

Die Inverse dieser Zerfallskonstante bezeichnet man als Lebensdauer des Isotopes bezüglich des entsprechenden Zerfallprozesses

$$\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (2.59)$$

Betrachtet man also zur Zeit  $t=0$  eine Anfangszahl von Atomkernen eines bestimmten Isotopes und wartet dann die Lebensdauer dieses Isotopes so sind zu diesem Zeitpunkt im statistischen Mittel nur noch

$$\mathcal{N}(\tau) = \mathcal{N}_0 e^{-\lambda\tau} = \mathcal{N}_0 e^{-1} = \frac{\mathcal{N}_0}{2.71828\dots},$$

dieser Kerne intakt. Als **Halbwertszeit** dieses Zerfalls bezeichnet man die Zeit  $T_{1/2}$ , nach der nur noch die Hälfte der ursprünglichen Atomkerne intakt sind es gilt also

$$\frac{\mathcal{N}(T_{1/2})}{\mathcal{N}_0} = e^{-\lambda T_{1/2}} = \frac{1}{2}, \quad (2.60)$$

was wiederum bedeutet, dass

$$\ln \frac{1}{2} = -\ln 2 = -\lambda T_{1/2} \quad \rightarrow \quad T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 0.693... \times \tau. \quad (2.61)$$

Durch eine wiederholte Messung der Anzahl der vorhandenen Isotope oder durch eine Bestimmung der **Aktivität der Probe**, also der Zahl der Zerfälle pro Zeiteinheit

$$\mathcal{A} = -\frac{d\mathcal{N}}{dt} = -\lambda \mathcal{N}(t), \quad (2.62)$$

kann man die Zerfallskonstante  $\lambda$  und daraus dann die Lebensdauer  $\tau$  und die Halbwertszeit  $T_{1/2}$  experimentell bestimmen.

## 2.2.2 Das Schalenmodell der Atomkerne

Die Massenformel von Bethe und Weizsäcker reproduziert die experimentellen Daten für die Bindungsenergien der Atomkerne recht gut und liefert einen ersten Überblick über die Abhängigkeit dieser Bindungsenergien von der Zahl der Protonen und der Neutronen. Eine genauere Analyse zeigt aber doch im Detail signifikante Unterschiede. So gibt es bestimmte Werte für die Protonen- und Neutronenzahlen, bei denen die Bindungsenergien signifikant über dem Ergebnis der Bethe-Weizsäcker Formel liegen. Diese **Magischen Zahlen** sind

$$2, \quad 8, \quad 20, \quad 28, \quad 50, \quad 82 \quad \text{und} \quad 126. \quad (2.63)$$

Sie sind in der Nuklidkarte der Abb. 2.8 besonders gekennzeichnet. Als Folge dieser besonders starken Bindungsenergie etwa bei  $Z = 50$  findet man relativ viele stabile Isotope des Elementes der Kernladungszahl 50, dem Zinn, und zwar von  $^{112}\text{Sn}$  bis  $^{124}\text{Sn}$ . Besonders stark gebunden sind natürlich die doppelt magischen Kerne, bei denen sowohl die Kernladungszahl als auch die Neutronenzahl magisch sind, wie z.B.

$$\begin{aligned} &^4\text{He} \quad \text{mit } Z = 2 \quad \text{und } N = 2 \\ &^{16}\text{O} \quad \text{mit } Z = 8 \quad \text{und } N = 8 \\ &^{40}\text{Ca} \quad \text{mit } Z = 20 \quad \text{und } N = 20 \\ &^{48}\text{Ca} \quad \text{mit } Z = 20 \quad \text{und } N = 28 \\ &^{208}\text{Pb} \quad \text{mit } Z = 82 \quad \text{und } N = 126. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Diese ausgeprägte Bindung bei speziellen Zahlen erinnert natürlich an die Schalenstruktur der Atomphysik, die ja zu besonders starker Bindung bei den Edelgasen führt. Die Kerne mit magischer Nukleonenzahl sollten danach den Edelgasen in der Atomphysik entsprechen.

In der Atomphysik entsteht die Schalenstruktur durch die quantenmechanische Beschreibung der Bewegung der Elektronen im Zentralfeld des Atomkerns. In der Kernphysik ist ein solches Zentralfeld nicht vorgegeben. Es muss vielmehr durch die Wechselwirkung eines einzelnen Nukleons mit allen anderen erzeugt werden. In Anlehnung an die Überlegungen zum Hartree-Fock Feld in der Atomphysik im Abschnitt 1.6 können wir uns auch hier vorstellen, dass ein Nukleon an der Stelle  $\vec{r}$  ein Potenzial spürt der Form

$$U(\vec{r}) = \sum_j \langle \vec{r} \Phi_j | V_{NN} | \vec{r} \Phi_j \rangle, \quad (2.65)$$

wobei  $\langle \vec{r}\Phi_j | V_{NN} | \vec{r}\Phi_j \rangle$  das Matrixelement der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung eines Nukleons am Ort  $\vec{r}$  mit dem Nukleon, das durch die Einteilchenwellenfunktion  $\Phi_j$  beschrieben wird, bezeichnet. Summiert wird über alle Nukleonen  $j$ . Natürlich haben wir auch hier wieder das übliche Selbstkonsistenzproblem zu lösen: Um die Wellenfunktionen  $\Phi_j$  zu bestimmen, muss man die Schrödinger Gleichung für die Nukleonen im Potenzial  $U$  lösen, benötigt dazu natürlich dieses Potenzial  $U(\vec{r})$ . Andererseits benötigt man aber die  $\Phi_j$  um mit (2.65) das Potenzial zu bestimmen.

Im Vergleich zur Atomphysik kommt noch erschwerend hinzu, dass die Struktur der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung  $V_{NN}$  sehr viel komplexer ist als die Coulomb Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen. Außerdem ist die Wechselwirkung bei kurzen Reichweiten so stark, dass man Korrelationen berücksichtigen muss, die über die Hartree-Fock Näherung hinausgehen. So ist auch heute noch die Beschreibung der Struktur der Atomkerne auf der Basis einer realistischen Nukleon-Nukleon Wechselwirkung ein sehr aktives Forschungsgebiet.

Da die Nukleon-Nukleon Wechselwirkung eine kurze Reichweite hat und nicht dieses  $1/r$  Verhalten des Coulomb Potenzials, hat das resultierende Potenzial  $U(\vec{r})$  auch eine andere Form als in der Atomphysik. Als einen ersten Ansatz nehmen wir die Form eines sphärischen harmonischen Oszillators in 3 Raumdimensionen an

$$\begin{aligned} U_{HO}(\vec{r}) &= \frac{M\omega^2}{2} r^2 \\ &= \frac{M\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2), \end{aligned} \quad (2.66)$$

wobei  $x, y, z$  die kartesischen Koordinaten des Nukleons an der Stelle  $\vec{r}$  bezeichnen und die Oszillatorfrequenz  $\omega$  ein Parameter ist, der anzupassen wäre. Mit diesem Potenzial ergibt sich der Hamiltonoperator für ein Nukleon mit der Masse  $M$

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^2}{2M} + U_{HO}(\vec{r}) \\ &= \underbrace{\frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} x^2}_{=H_x} + \underbrace{\frac{p_y^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} y^2}_{=H_y} + \underbrace{\frac{p_z^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2} z^2}_{=H_z}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Der Hamiltonoperator ist also eine Summe aus 3 Termen  $H_x$ ,  $H_y$  und  $H_z$  wobei jeder dieser Operatoren nur auf die entsprechende kartesische Koordinate wirkt. In diesem Fall wissen wir, dass die Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung Wellenfunktionen liefern, die das Produkt der Wellenfunktionen für den Harmonischen Oszillator in den kartesischen Richtungen ist

$$\Phi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \varphi_{n_x}(x) \varphi_{n_y}(y) \varphi_{n_z}(z),$$

mit einem Energieeigenwert, der sich als Summe der Energien aus den 3 kartesischen Raumrichtungen darstellt

$$\begin{aligned} E_\nu &= \hbar\omega \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left( n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar\omega \left( \nu + \frac{3}{2} \right) \quad \text{mit} \quad \nu = n_x + n_y + n_z, \end{aligned} \quad (2.68)$$

$\nu$	$n_x$	$n_y$	$n_z$	Entartung
1	1	0	0	3
	0	1	0	
	0	0	1	
2	2	0	0	6
	0	2	0	
	0	0	2	
	1	1	0	
	1	0	1	
	0	1	1	
3	3	0	0	10
	0	3	0	
	0	0	3	
	2	1	0	
	1	2	0	
	2	0	1	
	1	0	2	
	0	2	1	
	0	1	2	
	1	1	1	

Tabelle 2.1: *Kombinationen für die Energiequantenzahlen des dreidimensionalen Harmonischen Oszillators*

wobei  $n_x$ ,  $n_y$  und  $n_z$  die Werte 0, 1, 2, ... annehmen können. Die niedrigste Energie ergibt sich für

$$\nu = 0 \quad \Leftrightarrow \quad n_x = n_y = n_z = 0,$$

dieser Zustand ist also nur einfach entartet. Berücksichtigt man die Tatsache, dass die Nukleonen Fermionen mit einem Spin von  $1/2$  sind, so besitzen sie 2 Möglichkeiten für die Spinprojektion  $m = \pm 1/2$ , so dass insgesamt 2 Nukleonen in die Schale mit  $\nu = 0$  untergebracht werden können, ohne dass das Pauli Prinzip verletzt wird.

Die möglichen Kombinationen für  $\nu = 1$ ,  $\nu = 2$  und  $\nu = 3$  sind in der Tabelle 2.1 aufgelistet, ebenfalls die entsprechende Entartung dieser Energieschalen. Berücksichtigt man wieder die Entartung durch den Spin, so ergeben sich maximale Besetzungszahlen von 6, 12 und 20 für diese Schalen. Addiert man diese Besetzungszahlen auf, so liefert das Modell des Harmonischen Oszillators Schalenabschlüsse bei  $Z$  oder  $N$  von 2, 8, 20, 40, etc. Die Zahlen 2, 8 und 20 stimmen mit den magischen Zahlen von (2.63) überein. Für diese leichten Atomkerne funktioniert als das Oszillatormodell. Bei den schwereren Atomkernen versagt dieses einfache Modell jedoch.

Man kann nach anderen Potenzialformen schauen. Ein Beispiel dafür ist das sogenannte Woods Saxon Potenzial in der Form

$$U_{WS}(r) = \frac{-U_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}, \quad (2.69)$$

mit den Parametern  $U_0$ ,  $R$  und  $a$ , die die Tiefe des Potenzialtopfes, seinen Radius und

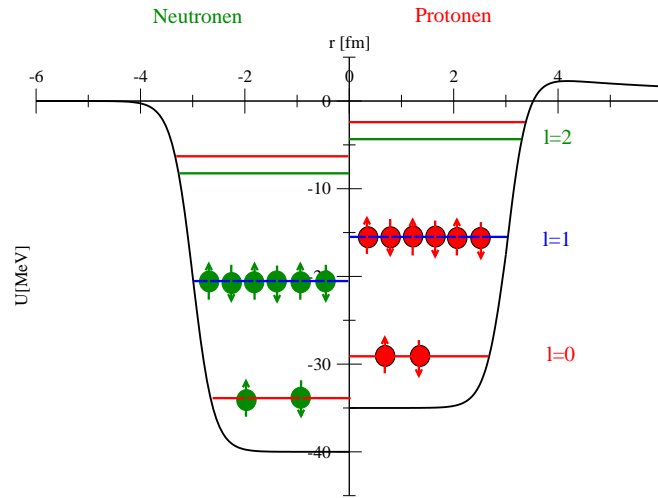


Abbildung 2.9: Woods Saxon Potenzial für Neutronen (linke Hälfte) und Protonen (rechte Hälfte). Bei den Protonen ist das Coulomb Potenzial hinzuaddiert. Aufgetragen sind die Einteilchenenergien für Schalen mit verschiedenen  $l$  und eine Besetzung dieser Niveaus für den Kern  $^{16}\text{O}$ . Die Darstellung ist nur qualitativer Art.

die Breite der Oberfläche kontrollieren. Die Werte für diese Parameter hängen natürlich von dem betrachteten Atomkern ab. Ein Beispiel für ein solches Woods Saxon Potenzial ist in der Abb. 2.9 dargestellt. Im rechten Teil der Abbildung ist dabei noch der Beitrag des Coulomb Potenzials für die Protonen hinzuaddiert. Diese Potenzialform erscheint viel realistischer als das einfache Modell des Harmonischen Oszillators. Insbesondere wird es auch für  $r \rightarrow \infty$  nicht unendlich groß, sondern nimmt den Wert null an.

Die Energieeigenwerte des Woods Saxon Potenzials liefern eine ähnliche Schalenstruktur wie die des Harmonischen Oszillators. Die Entartung der Zustände ist zum Teil aufgehoben. Auch das Woods Saxon Potenzial liefert die richtigen magischen Zahlen bis 20 und versagt bei den höheren Werten.

Die Lösung des Problems, die Schalenstruktur und damit auch die magischen Zahlen für die schweren Atomkerne zu erklären, stammt aus dem Jahr 1949 und wurde von Maria Goeppert-Mayer und H. Jensen entwickelt. In Analogie zur Atomphysik nahmen sie an, dass es neben dem zentralen Anteil des Potenzials auch in der Kernphysik einen Spin-Bahn Term gibt, so dass das Einteilchenpotenzial der Nukleonen insgesamt die Form

$$\hat{U} = U_{\text{zent}}(\vec{r}) + U_{ls}(r) \frac{\vec{l} \cdot \vec{s}}{\hbar^2}, \quad (2.70)$$

annimmt. Dabei kann der Zentralanteil die Form des Woods Saxon Potenzials annehmen.  $\vec{l}$  und  $\vec{s}$  sind die Operatoren für den Bahndrehimpuls und den Spins des Nukleons. Auch wenn der Spin-Bahn Term formal die gleiche Struktur hat wie in der Atomphysik, so basiert er doch nicht auf der elektromagnetischen Wechselwirkungen; diese Effekte wären auch viel zu klein. Die Ursache dieser Spin-Bahn Wechselwirkung liegt in der Struktur der Nukleon-Nukleon Wechselwirkung. Sie ergibt sich, wenn man Effekte der Relativitätstheorie bei der Lösung des Vielteilchenproblems berücksichtigt<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Details und den Stand der Forschung finden Sie z.B. in dem Übersichtsartikel: H. Müther and A.

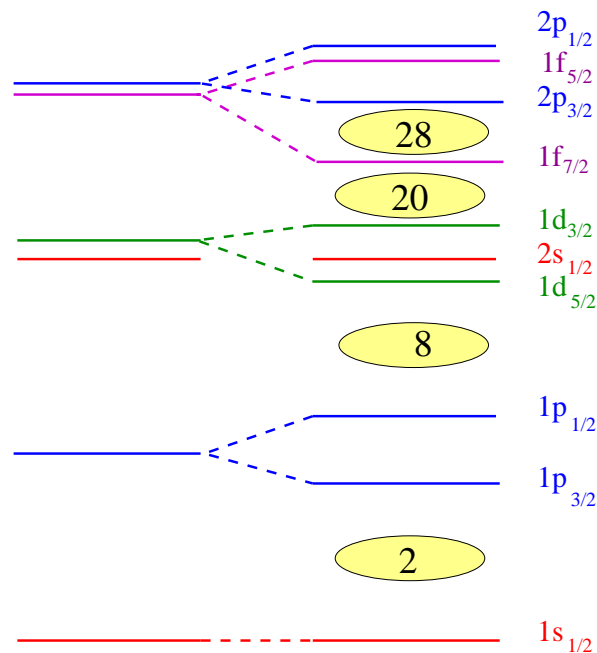


Abbildung 2.10: Einteilchenenergien ohne (linker Teil) und mit Berücksichtigung der Spin-Bahn Wechselwirkung (siehe Diskussion im Text)

Zur Berücksichtigung eines Spin-Bahn Terms im Potentials geht man wie in der Atomphysik über in die Basis, in der Spin und Bahndrehimpuls zu einem Gesamtdrehimpuls  $j$  gekoppelt sind. In dieser Basis kann der Operator durch die Eigenwerte zu  $l^2$ ,  $s^2$  und  $j^2$  beschrieben werden

$$2\frac{\vec{l} \cdot \vec{s}}{\hbar^2} = j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}.$$

Die Aufspaltung der Schalen verläuft analog zur Atomphysik, nur dass in der Kernphysik die Zustände mit  $j = l + 1/2$  eine niedrigere Energie zeigen als die mit  $j = l - 1/2$ . Die Wirkung dieser Spin-Bahn Aufspaltung ist qualitativ in der Abb. 2.10 dargestellt. Die Einteilchenzustände auf der rechten Seite (mit Berücksichtigung des Spin-Bahn Terms) sind durch die zugehörigen Quantenzahlen  $n$ ,  $l$  und  $j$  in der Form gekennzeichnet, dass der Bahndrehimpuls  $l$  wie üblich durch die Buchstaben  $s$ ,  $p$ ,  $d$ , etc. bezeichnet wird, der Gesamtdrehimpuls  $j$  als unterer Index angezeigt wird und die Zahl  $n$ , die angibt der wievielte Zustand von diesem Typ angezeigt wird, als Zahl vor dem Bahndrehimpuls erscheint. der  $2p_{3/2}$  Zustand ist also von unten gezählt der zweite Zustand mit  $l = 1$  und  $j = 3/2$ .

Wir sehen aus der Darstellung von Abb. 2.10 auch, dass die Energien der Einteilchenzustände mit der Spin-Bahn Aufspaltung so getrimmt werden können, dass auch eine signifikante Energielücke zwischen der  $1f_{7/2}$  und der  $2p_{3/2}$  Schale entsteht, so dass die magische Zahl 28 erklärt wird. Der Spin-Bahn Term erklärt darüber hinaus aber auch die höheren magischen Zahlen.

Der Spin-Bahn Term kann aber nicht nur die magischen Zahlen erklären. Wenn man etwa

Polls: "Two-Body Correlations in Nuclear Systems", Prog. Part. and Nucl. Phys. 45 (2000) 243; Er ist auch einsehbar unter <http://de.arxiv.org/abs/nucl-th/0001007>



den Atomkern  $^{17}\text{O}$  heranzieht mit 8 Protonen und 9 Neutronen, so besagt das Schalenmodell mit diesem Spin-Bahn Term, dass 8 Protonen und 8 Neutronen jeweils die  $1s$  und  $1p$  Schalen vollständig besetzen, was zu einem Gesamtdrehimpuls dieser Nukleonen in den abgeschlossenen Schalen von  $J = 0$  führt. Das zusätzliche Neutron von  $^{17}\text{O}$  im Vergleich zu  $^{16}\text{O}$  wird dann in die  $1d_{5/2}$  Schale gesetzt. Der Spin des gesamten Atomkerns entspricht dem Einteilchendrehimpuls dieses zusätzlichen Neutrons, man spricht wie in der Atomphysik von einem Valenznukleon. Der Atomkern  $^{17}\text{O}$  sollte also den Spin  $J = 5/2$  besitzen, wenn er sich im Grundzustand befindet, also nicht angeregt ist. Dies wird durch das Experiment bestätigt.

Außerdem legt uns das Schalenmodell nahe, dass der Atomkern  $^{17}\text{O}$  Anregungszustände mit niedriger Anregungsenergie besitzen sollte, bei denen das Valenznukleon nicht in der  $1d_{5/2}$  Schale sondern in der  $2s_{1/2}$  oder  $1d_{3/2}$  Schale untergebracht wird. In der Tat findet man solche Zustände mit  $J = 1/2$  bei einer Anregungsenergie von 0.87 MeV und einen mit  $J = 3/2$  bei 5.08 MeV. Natürlich gilt Ähnliches auch für andere Atomkerne mit abgeschlossenen Schalen plus einem Valenznukleon.

Für solche Atomkerne mit einem Valenznukleon kann man auch einfache Abschätzungen für das magnetische Moment des Atomkerns machen. Dieses magnetische Moment ist eine wichtige Kenngröße für die Hyperfein Aufspaltung des atomaren Spektrums. Das heisst, man kann es auch experimentell aus der Analyse von den Hyperfeinspektren extrahieren und so die experimentellen Daten mit diesen Modellvorhersagen vergleichen.

Das magnetische Moment des Atomkerns ist ein Vektor der Form

$$\vec{\mu}_{op} = \frac{\mu_K}{\hbar} \sum_{i=1}^A (g_l \vec{l}_i + g_s \vec{s}_i) . \quad (2.71)$$

Dabei steht  $\mu_K$  für das Kernmagneton

$$\mu_K = \frac{e\hbar}{2M} , \quad (2.72)$$

mit  $M$  der Masse eines Nukleons. Es ist also um fast eine Faktor 2000 kleiner als das Bohrsche Magneton aus (1.5).  $\vec{l}_i$  und  $\vec{s}_i$  bezeichnen den Bahndrehimpuls und den Spin des Nukleons  $i$  und es wird über alle Nukleonen des Kerns summiert. Die  $g$ -Faktoren für den Bahndrehimpuls  $g_l$  sind 1 für das Proton und  $g_l = 0$  im Falle eines Neutrons. Das Neutron ist ja elektrisch neutral und deshalb erzeugt eine Kreisbewegung des Neutrons keinen elektrischen Kreisstrom mit entsprechendem magnetischen Moment. Die  $g$ -Faktoren für den Spin lauten

$$g_s = \begin{cases} 5.58 & \text{für ein Proton} \\ -3.82 & \text{für ein Neutron} \end{cases} . \quad (2.73)$$

In einem Atomkern mit einem Valenznukleon kompensieren sich die Beiträge der anderen Nukleonen in den abgeschlossenen Schalen und die Summe in (2.71) kann auf das Valenznukleon beschränkt werden.

Bei der Messung des magnetischen Momentes bestimmt man nicht den Vektor  $\vec{\mu}_{op}$  sondern die Projektion dieses Vektors in Richtung auf den Gesamtdrehimpuls des Kerns  $\vec{j}$ . Dieses magnetische Moment hat also die Form

$$\vec{\mu} = \frac{\vec{\mu}_{op} \cdot \vec{j}}{|\vec{j}|} \frac{\vec{j}}{|\vec{j}|}$$

$$= \frac{\mu_K}{\hbar} \frac{(g_l \vec{l} \cdot \vec{j} + g_s \vec{s} \cdot \vec{j})}{|\vec{j}|^2}. \quad (2.74)$$

Diesen Ausdruck kann man leicht auswerten wenn man die Operatoren durch die zugehörigen Eigenwerte ersetzt mit

$$\begin{aligned} |\vec{j}|^2 &= \hbar^2 j(j+1) \\ \vec{l} \cdot \vec{j} &= \frac{1}{2} (\vec{l}^2 + \vec{j}^2 - \vec{s}^2) = \frac{\hbar^2}{2} \left( l(l+1) + j(j+1) - \frac{3}{4} \right) \\ \vec{s} \cdot \vec{j} &= \frac{1}{2} (\vec{s}^2 + \vec{j}^2 - \vec{l}^2) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{3}{4} + j(j+1) - l(l+1) \right) \end{aligned} \quad (2.75)$$

Entsprechende Abschätzungen erhält man auch für Atomkerne mit einem fehlenden Nukleon in ansonsten abgeschlossenen Schalen. Die experimentellen Werte entsprechen diesen sogenannten Schmidt Werten recht gut. Sie sind in der Regel ein wenig kleiner, was man durch eine Polarisation des Restkerns erklären kann.

Ein Zustand, also insbesondere der Grundzustand eines Atomkerns, wird neben dem Spin auch noch durch die Parität charakterisiert. Der Paritätsoperator angewandt auf eine Vielteilchenfunktion, ergibt diese Funktion an der Stelle, an der alle Argumente, also Ortsvektoren der Teilchen, durch das gespiegelte Argument ersetzt werden

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_A) = \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2 \dots -\vec{r}_A). \quad (2.76)$$

Da der Hamilton Operator des Atomkerns mit dem Paritätsoperator kommutiert, sind die Eigenfunktionen des Hamilton Operators, also die Lösungen der stationären Schrödinger Gleichung, auch Eigenfunktionen zum Paritätsoperator. Da das Quadrat des Paritäts Operators gleich dem Einsoperator ist,  $\hat{P}^2 = 1$ , sind die Eigenwerte des Paritätsoperators plus 1 oder minus 1

$$\begin{aligned} \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2 \dots -\vec{r}_A) &= \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_A) \quad \text{positive Parität} \\ \Psi(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2 \dots -\vec{r}_A) &= -\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_A) \quad \text{negative Parität} \end{aligned} \quad (2.77)$$

Experimentell ist es nicht einfach die Parität eines Zustandes zu bestimmen. Bei einem Erwartungswert eines Operators tritt die Wellenfunktion quadratisch auf und man kann deshalb die Parität aus solchen Erwartungswerten nicht extrahieren. Anders ist es bei Operatoren, die Übergänge beschreiben, wie z.B. die Emission von elektromagnetischer Strahlung. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für solche Übergänge ist proportional zum Matrixelement

$$\langle \Psi_f | O | \Psi_i \rangle.$$

Besitzt der Operator  $O$  positive Parität, so muss die Parität des Anfangszustandes  $\Psi_i$  gleich der Parität des Endzustandes sein. Wäre das nicht der Fall, so würde bei dem Integral zur Berechnung des Matrixelementes der Integrand das Vorzeichen wechseln bei  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ , das Integral wäre also identisch null; der Übergang hätte die Wahrscheinlichkeit Null und ist wegen der Paritätsauswahlregel verboten. Durch die Beobachtung solcher Übergänge kann man die Parität von Zuständen relativ zueinander bestimmen.

Das Schalenmodell liefert eine einfache Möglichkeit zur Berechnung der Parität. Im Schalenmodell ist ja die Gesamtwellenfunktion das Produkt der Einteilchenwellenfunktion für die Zustände, die besetzt sind. Die Parität des Gesamtzustandes ist damit das Produkt der Paritäten der einzelnen Zustände, die wiederum gegeben ist durch  $(-1)^l$  zur Potenz  $l$ , dem Bahndrehimpuls dieses Einteilchenzustandes (siehe Vorlesung Physik 3). Damit ergibt sich für die Gesamtparität der Wert

$$\prod_{i=1}^A (-1)^{l_i} .$$

Die Entartung einer Schale ist stets eine gerade Zahl. Deshalb haben Atomkerne mit voll besetzten Schalen für Protonen und Neutronen einen Grundzustand mit positiver Parität. Bei Atomkernen mit abgeschlossenen Schalen plus einem Valenznukleon, ist die Parität durch den Bahndrehimpuls dieser Valenzschale festgelegt.

Zum Abschluss dieses Abschnittes wollen wir noch einige Aspekte des Tröpfchenmodells (2.51) aus der Sicht des Schalenmodells erklären.

In der Bethe-Weizsäcker Formel begegnete uns der Symmetrieterm, der besagt, dass die Bindungsenergie eines Atomkerns kleiner wird, wenn sich die Zahl für Protonen und Neutronen unterscheiden (2.55). Dieser Term leuchtet aus der Sicht des Schalenmodells sofort ein. In einem Atomkern, der sehr viel mehr Neutronen als Protonen besitzt, müssen die Neutronen wegen des Pauli Prinzips Schalen mit sehr viel höherer Energie besetzen als die Protonen. Man könnte also Energie dadurch gewinnen, dass man ein Neutron durch ein Proton ersetzt, da man dieses in eine energetisch günstigere Schale unterbringen kann.

Dieser Trend wird natürlich teilweise dadurch kompensiert, dass die Einteilchenenergien für die Zustände der Protonen wegen der Coulombrepulsion etwas weniger gebunden sind als die vergleichbaren Zustände für die Neutronen (siehe Abb. 2.9). Dieses Zusammenspiel zwischen Coulomb Energie und dem Symmetrieterm haben wir im Abschnitt zum Tröpfchenmodell ausführlich diskutiert.

Außerdem wollen wir an dieser Stelle auch noch auf den Paarenergieterm (2.56) eingehen. Bei der Besetzung der Schalen für die Elektronen in der Atomphysik haben wir die Hund'sche Regel kennen gelernt. Danach wird ein zweites Elektron in einer Schale bevorzugt mit dem Spin parallel zum ersten Elektron (so weit das wegen der Entartung der Schale möglich ist) plaziert. Der Grund hierfür basiert auf der repulsiven Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Sind ihre Spins parallel so wird wegen die Wahrscheinlichkeit, dass die Elektronen nahe zusammen kommen wegen der Antisymmetrisierung der Ortswellenfunktion unterdrückt. Dies ist günstiger als wenn die beiden Elektronen eine antisymmetrische Spinfunktion haben.

Die Wechselwirkung zwischen zwei Protonen oder zwei Neutronen ist attraktiv. Deshalb ist es energetisch günstiger, wenn etwa zwei Neutronen in der Valenzschale ihre Spins antiparallel orientieren. Dies hat eine symmetrische Ortswellenfunktion zur Folge: Die beiden Neutronen sind mit vergrößerter Wahrscheinlichkeit nahe zusammen und spüren die attraktive kurzreichweitige Wechselwirkung. Als Folge bilden jeweils zwei Neutronen oder auch zwei Protonen in einer Valenzschale ein Paar mit einem Gesamtdrehimpuls  $J = 0$ . Damit ergibt sich für die  $gg$ -Kerne, also die Isotope mit gerader Anzahl von Protonen und Neutronen, dass sie im Grundzustand einen Gesamtdrehimpuls von  $J = 0$  besitzen. Diese Regel wird durch die experimentellen Daten ausnahmslos bestätigt.

Außerdem sehen wir natürlich auch, dass es energetisch ungünstiger ist wenn ein Proton oder auch ein Neutron keinen Partner hat, mit dem es zu einem  $J = 0$  Paar verkoppelt werden kann. Dies wird im Paarenergieterm von (2.56) zum Ausdruck gebracht.

## 2.3 Beta Zerfall

Schon bei der ersten Diskussion der Massen von Protonen, Neutronen und Elektronen im vorhergehenden Abschnitt haben wir festgestellt, dass die Masse eines Neutrons und damit seine Ruhenergie größer ist als die Summen der Massen eines Protons und eines Elektrons. Daraus ersieht man, dass ein einzelnes Neutron zerfallen kann in ein Proton und ein Elektron unter Erhaltung der Gesamtenergie und der Ladung. In der Tat beobachtet man, dass freie Neutronen, also solche, die nicht in einen Atomkern eingebunden sind, nur eine mittlere Lebensdauer von etwa 15 Minuten haben. Diese Lebensdauer  $\tau$  entspricht nach (2.61) einer Halbwertszeit  $T_{1/2}$  von 10.4 Minuten. Mit dieser Halbwertszeit beobachtet man einen Zerfall des Neutrons, wobei ein Proton und ein Elektron emittiert werden. Man bezeichnet diese Reaktion als den  **$\beta$ -Zerfall** des freien Neutrons.

Der **Q-Wert** dieser Reaktion, das ist die Differenz der Ruheenergien der Teilchen vor und nach der Umwandlung beträgt

$$[M_n - (M_p + m_e)] c^2 = 0.78 \text{ MeV} .$$

Diese Energie kann in Form von kinetischer Energie für das Proton und Elektron umgesetzt werden. Betrachtet man den Zerfall eines ruhenden Neutrons etwas genauer, so müsste aus Gründen der Impulserhaltung, die Summe aus dem Impuls des erzeugten Protons und des Elektrons gleich dem Impuls des Neutrons vor dem Zerfall, also identisch Null sein. Dies bedeutet aber, dass die Impulse von Proton und Elektron vom Betrag her gleich sind,  $|\vec{p}_p| = |\vec{p}_e| = p$ , aber in entgegengesetzte Richtungen weisen. Die Energieerhaltung andererseits bestimmt diesen Betrag  $p$  durch die Gleichung für die relativistischen Energien der Teilchen vor und nach dem  $\beta$ -Zerfall

$$M_n c^2 = \sqrt{M_p^2 c^4 + p^2 c^2} + \sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} .$$

Aus diesen Überlegungen ergibt sich also, dass die Elektronen, die bei dem Zerfall von ruhenden Neutronen entstehen, alle die gleiche Energie haben müssten. Die Experimente liefern aber Elektronen mit verschiedenen Energien, so dass zunächst vermutet wurde, dass beim  $\beta$ -Zerfall der Satz von der Erhaltung der Energie verletzt sein könnte.

Darüber hinaus ergaben sich auch noch Probleme mit der Erhaltung des Gesamtdrehimpulses: Das Neutron ist ein Fermion mit einem Spin von  $1/2$ . Wenn wir davon ausgehen, dass es ruht, so ist sein Bahndrehimpuls gleich Null und der gesamte Drehimpuls ist gleich dem Spin, hat also den Betrag  $1/2$ . Nach dem Zerfall erhalten wir ein Elektron und ein Proton mit jeweils einem Spin von  $1/2$  plus einem möglichen Bahndrehimpuls für die Relativbewegung. Dieser Bahndrehimpuls ist ganzzahlig, zusammen mit den halbzahligem Spins des Elektrons und des Protons ergibt sich ein ganzzahliger Drehimpuls für den Endzustand des Gesamtsystems, also in jedem Fall ein anderer Drehimpuls als im Anfangszustand.

In einem Brief an eine Fachtagung in Tübingen im Jahre 1930 zeigte Wolfgang Pauli einen Ausweg aus diesem Dilemma auf. Er postulierte, dass beim Zerfall des Neutrons, neben dem Proton und dem Elektron noch ein weiteres Teilchen emittiert wird: ein Neutrino. Bei diesem Zerfall des Neutrons in drei Teilchen kann ein Teil der Energie vom Neutrino übernommen werden, was das kontinuierliche Elektronenspektrum erklären würde. Besitzt

das Neutrino außerdem noch einen halbzahligen Spin, was ja bedeutet, dass es sich um ein Fermion handelt, so kann es auch die Erhaltung des Drehimpulses gewährleisten.

Aus der Tatsache, dass man das Neutrino nicht direkt beobachtet, kann man schliessen, dass es keine elektromagnetische und keine starke Wechselwirkung mit seiner Umgebung hat. Außerdem muss seine Masse sehr klein sein. Masselose, neutrale Teilchen, die nur schwach wechselwirken, sind naturgemäß nur sehr schwer zu beobachten. Erst in jüngster Zeit hat man gelernt Detektoren zu bauen, mit denen man Neutrinos nachweisen kann. Wir werden später noch darauf zurückkommen. Trotzdem sind auch heute noch viele Geheimnisse der Neutrinos nicht endgültig geklärt. So weiss man zwar, dass es 3 Typen von Neutrinos gibt (siehe Abschnitt 2.10), aber selbst über die Masse der Neutrinos gibt es keine endgültige Aussage.

Der Hypothese von W. Pauli folgend nimmt also der  $\beta$ -Zerfall des Neutrons die folgende Gestalt an:

$$n \implies p + e + \bar{\nu}_e. \quad (2.78)$$

Die Bezeichnung  $\bar{\nu}_e$  soll dabei andeuten, dass es sich bei diesem Teilchen um das zum Elektron gehörende Anti-Neutrino handelt. Zur Erklärung dieser Bezeichnung machen wir an dieser Stelle einige Bemerkungen zum Begriff des Antiteilchens.

Der Versuch, die Quantenmechanik so zu erweitern, dass auch die Kinematik der Speziellen Relativitätstheorie berücksichtigt wird, führte P. Dirac auf die nach ihm benannte Dirac Gleichung. Für ein freies Teilchen, das sei ein Teilchen der Masse  $m$  mit dem Impuls  $p$ , das nur kinetische Energie besitzt, liefert die Dirac Gleichung stationäre Zustände mit Energien

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4},$$

also insbesondere auch Lösungen mit negativer Energie. Nach der Vorstellung von P. Dirac sind im Falle des Vakuums alle Zustände mit negativer Energie besetzt. Man bezeichnet diese besetzten Zustände mit Energie kleiner als  $-mc^2$  auch als den Dirac See (siehe Abb. 2.11). Steht ein Energiequantum zur Verfügung mit einer Energie, die größer ist als  $2mc^2$ , so kann man sich vorstellen, dass diese Energie genutzt werden kann, um ein Partikel aus einem Zustand negativer Energie anzuheben in einen Zustand mit der Energie oberhalb  $mc^2$ . Man hat ein Teilchen und ein Loch im Dirac See erzeugt. Dieses Teilchen und dieses Loch können sich voneinander fortbewegen. Das Loch im Diracsee entspricht dabei einem Antiteilchen.

Solch eine Erzeugung von Teilchen-Antiteilchen Paaren aus Energie wird experimentell in großer Vielfalt beobachtet. So können z.B. Paare von Elektronen und Anti-Elektronen entstehen. Die Anti-Elektronen sind dabei Löcher im Dirac See der Elektronen. Relativ zum Vakuum fehlt also dem Dirac See für jedes Anti-Elektron eine negative Ladung. Das Anti-Elektron, das Positron, ist also positiv geladen. Ansonsten hat es die gleichen Eigenschaften (Masse, Spin) wie das Elektron.

Beim  $\beta$ -Zerfall des Neutrons sorgt die schwache Wechselwirkung dafür, dass aus dem Teilchen Neutron ein Proton wird. Beide Teilchen bezeichnet man als Baryonen: die Zahl der Baryonen bleibt bei dem Prozess erhalten. Parallel zu dieser Umwandlung des Baryons Neutron in das Baryon Proton erzeugen wir ein Teilchen, das Elektron, wir werden es der Familie der Leptonen zuordnen, und ein Antiteilchen (ein Anti-Lepton), das Anti-Neutrino. Die Leptonenzahl ist dabei vor dem Zerfall gleich Null aber auch nach dem

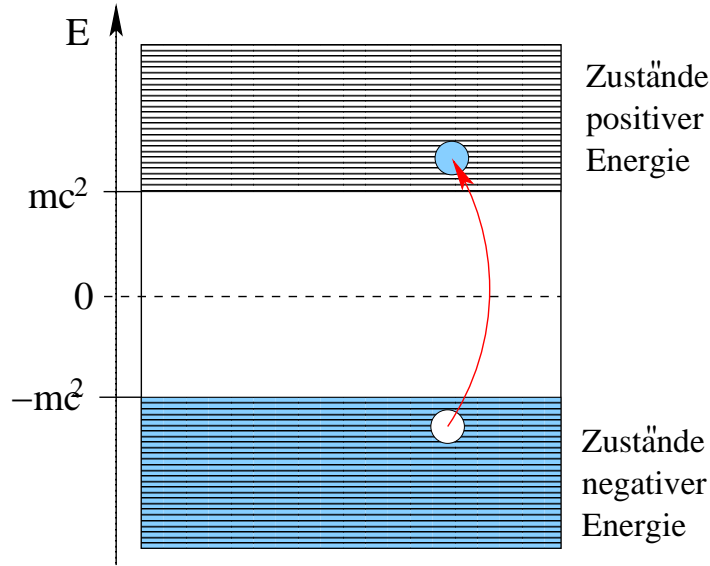


Abbildung 2.11: Erzeugung von einem Teilchen- Anti-Teilchen Paar

Zerfall, da das Elektron die Leptonenzahl 1 besitzt und das Anti-Lepton als Loch im Dirac See die Leptonenzahl -1. Durch die Identifikation nach (2.78) bleiben also Baryonenzahl und Leptonenzahl bei dem Prozess erhalten.

Mit Hilfe von Fermis Goldener Regel (2.23) berechnet sich die Reaktionsrate für den Zerfall des Neutrons in Proton, Elektron und Antineutrino mit einem Elektron der Energie  $E_e$  nach

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle p, e, \bar{\nu}_e | \Delta V | n \rangle|^2 \frac{d\rho_f(E_e)}{dE_e} dE_e. \quad (2.79)$$

Dabei bezeichnet  $\rho_f(E_e)$  die Phasenraumdichte der Endzustände mit Elektronen der Energie  $E_e$ , auf die wir weiter unten noch eingehen werden. Für das Matrixelement der schwachen Wechselwirkung  $\Delta V$  macht man den Ansatz, dass dieses Matrixelement faktorisiert in einen Anteil für die beteiligten Baryonen und einen für die Leptonen

$$\langle p, e, \bar{\nu}_e | \Delta V | n \rangle = \langle p | \hat{O}_B | n \rangle \langle e, \bar{\nu}_e | \hat{O}_L | 0 \rangle. \quad (2.80)$$

Bei den Operatoren unterscheidet man die Fermi Übergänge, das sind solche die unabhängig von den Spins der beteiligten Fermionen sind, und die Gamow-Teller Übergänge, bei denen sich z.B. die Spinorientierung von Baryonen und Leptonen ändern. Ist das zerfallende Neutron in einem Einteilchenzustand  $\Phi_n$  und das erzeugte Proton im Zustand  $\Phi_p$  so ergibt das Matrixelement für die Baryonen aus

$$\begin{aligned} \langle p | \hat{O}_B | n \rangle &= g_V \langle \Phi_p | 1 | \Phi_n \rangle && \text{für den Fermi,} \\ \langle p | \hat{O}_B | n \rangle &= g_A \langle \Phi_p | \vec{\sigma} | \Phi_n \rangle && \text{für den Gamow-Teller} \end{aligned} \quad (2.81)$$

Übergang. Dabei steht  $\sigma$  für den Vektor aus den Pauli-Spin Matrizen, die auf die Spinfunktion der Zustände wirkt. Außerdem macht man die Annahme einer Kontaktwechselwirkung, d.h. die Erzeugung des Lepton-Antileptonpaares geschieht an der gleichen Stelle wie die Umwandlung des Baryons.<sup>4</sup>

<sup>4</sup>Weiter unten werden wir diese Schwache Wechselwirkung durch den Austausch von  $W$  und  $Z$ -Bosonen

Dies führt bei der Berechnung der Matrixelemente für das freie Neutron zu dem folgenden Ergebnis

$$|\langle p, e, \bar{\nu}_e | \Delta V | n \rangle|^2 = \frac{g_V^2 + 3g_A^2}{V^2}, \quad (2.82)$$

wobei  $g_V$  und  $g_A$  die Kopplungskonstanten für die Fermi Übergänge bzw. Gamow-Teller Übergänge sind. Die Größe  $V$  bezieht sich auf das Volumen, in dem die Wellenfunktionen der beteiligten Teilchen normiert sind.

Die Zahl der Phasenraumzustände für die Leptonen mit einer Gesamtenergie  $E_0$  und Energie  $E_e$  für Elektronen so wie  $E_\nu$  für das Antineutrino ergibt sich aus dem Produkt der Normierungsvolumina  $V$  und der Kugelschale im Impulsraum

$$d\rho(E_0, E_e) = \frac{V^2}{(2\pi\hbar)^6} 4\pi p_e^2 dp_e 4\pi p_\nu^2 dp_\nu \delta(E_0 - E_e - E_\nu). \quad (2.83)$$

Für die weitere Rechnung betrachten wir die Energie-Impulsbeziehung für das Elektron

$$p_e^2 = \frac{E_e^2}{c^2} - m_e^2 c^2. \quad (2.84)$$

Aus dieser Beziehung erhalten wir die folgende Beziehung zwischen den Differenzialformen

$$2p_e dp_e = \frac{1}{c^2} 2E_e dE_e. \quad (2.85)$$

Damit können wir umformen

$$\begin{aligned} p_e^2 dp_e &= \frac{1}{c^2} p_e E_e dE_e \\ &= \frac{1}{c^3} \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e dE_e. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Die entsprechende Beziehung ergibt sich auch für das Neutrino. Mit der Annahme, dass die Neutronenmasse gleich Null ist, erhalten wir also

$$p_\nu^2 dp_\nu = \frac{1}{c^3} E_\nu^2 dE_\nu. \quad (2.87)$$

Die Beziehungen (2.86) und (2.87) setzen wir in (2.83) ein und integrieren, da ja das Neutrino nicht beobachtet wird über alle Energien des Neutrinos  $E_\nu$ . Dies liefert für die Zahl der Phasenraumzustände

$$\begin{aligned} d\rho(E_0, E_e) &= \frac{V^2}{(2\pi\hbar)^6} (4\pi)^2 \frac{1}{c^3} \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e dE_e \int \frac{1}{c^3} E_\nu^2 \delta(E_0 - E_e - E_\nu) dE_\nu \\ &= \frac{V^2 (4\pi)^2}{(2\pi\hbar c)^6} \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e (E_0 - E_e)^2 dE_e. \end{aligned} \quad (2.88)$$

Die Reaktionsrate  $dW$  aus (2.79) gibt die Wahrscheinlichkeit der  $\beta$ -Zerfall Prozesse des Neutrons an, bei denen das Elektron den Anteil  $E_e$  der Energie  $E_0$  davonträgt, die für die

---

beschreiben, was auch der modernen Vorstellung (seit etwa 1980) entspricht. Da die Masse dieser Bosonen sehr groß ist, ist die Reichweite der schwachen Wechselwirkung sehr klein, so dass das Modell der Kontaktwechselwirkung eine sehr gute Näherung darstellt.



Leptonen zur Verfügung steht. Die Zerfallskonstante  $\lambda$  für den  $\beta$ -Zerfall insgesamt ergibt sich also aus der Reaktionsrate  $dW$  integriert über alle möglichen Energien des Elektrons  $E_e$

$$\lambda = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{m_e c^2}^{E_0} |\langle p, e, \bar{\nu}_e | \Delta V | n \rangle|^2 \frac{d\rho(E_0, E_e)}{dE_e} dE_e. \quad (2.89)$$

Setzt man die Ergebnisse von (2.82) und (2.88) in diesen Ausdruck ein, so erhält man

$$\lambda = \frac{g_V^2 + 3g_A^2}{2\pi^3 \hbar^7 c^6} \int_{m_e c^2}^{E_0} dE_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e (E_0 - E_e)^2. \quad (2.90)$$

Aus dem  $\beta$ -Zerfall des freien Neutrons erhält man nur die Information über die Summe der Kopplungskonstanten ( $g_V^2 + 3g_A^2$ ) für den Fermi- und den Gamow Teller Übergang. Genauere Informationen über die Einzelanteile ergeben sich aus der Analyse der entsprechenden Matrixelemente für den  $\beta$ -Zerfall des Neutrons in einem Atomkern (siehe (2.81)). In diesem Fall hängen die Matrixelemente der schwachen Wechselwirkung von den Spinorientierungen des Neutrons im Ausgangskern und des Protons im Endkern ab und es gibt für die verschiedenen Atomkerne unterschiedliche Matrixelemente. Daraus ergeben sich die Werte

$$\begin{aligned} g_V &= 0.88 \cdot 10^{-4} \text{ MeV fm}^3, \\ g_A/g_V &= -1.253 \pm 0.007. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Die Zerfallskonstante  $\lambda$  für den  $\beta$ -Zerfall des Neutrons in einem Atomkern wird also einmal durch die Matrixelemente des Operators der schwachen Wechselwirkung bestimmt (siehe (2.81)). Die Gleichung (2.90) zeigt aber auch, dass diese Zerfallskonstante entscheidend durch die bei diesem Zerfall freigesetzte Energie  $E_0$  bestimmt wird. Der Ausdruck in (2.90) wächst ja etwa proportional zur fünften Potenz von  $E_0$  an. Beim Zerfall des freien Neutrons ist die Energiedifferenz zwischen der Energie des ruhenden Neutrons und der Summe der Ruheenergien von Proton und Neutron gleich 0.782 MeV. Beim  $\beta$ -Zerfall des Neutrons in einem Atomkern ist die freigesetzte Energie gleich der Massendifferenz des Atoms mit  $Z$  Protonen und  $N$  Neutronen zu dem mit  $Z + 1$  Protonen und  $N - 1$  Neutronen, also

$$\begin{aligned} E_0 &= M(A, Z)c^2 - M(A, Z + 1)c^2 \\ &= \delta E(A, Z) - \delta E(A, Z + 1), \end{aligned} \quad (2.92)$$

und kann also direkt aus den Massenüberschüssen  $\delta E(A, Z)$  des Mutter- und des Tochterkerns bei diesem Übergang (vergleiche (2.49)) berechnet werden.

Diese Massenüberschüsse sind für das Beispiel der Isobare mit  $A = 101$  in Abb. 2.12 als Funktion von der Kernladungszahl  $Z$  aufgetragen. Das Isotop  $^{101}\text{Mo}$  hat gegenüber dem  $^{101}\text{Tc}$  einen Massenüberschuss von fast 3 MeV. Es ist daher instabil gegenüber dem  $\beta$ -Zerfall und zerfällt mit einer Halbwertszeit etwa 14 Minuten. Dabei wird ein Elektron mit hoher Energie freigesetzt. Die Ladung dieses emittierten Teilchens gibt diesem  $\beta$ -Zerfall, bei dem ein Neutron in ein Proton umgewandelt wird den Namen  $\beta^-$  Zerfall.

Auch das  $^{101}\text{Tc}$  Isotop hat gegenüber dem Nachbarisotop einen Massenüberschuss und zerfällt ebenfalls durch  $\beta^-$  Zerfall in das stabile Isotop  $^{101}\text{Ru}$ .

Für  $Z > 44$  wachsen die Massen der Isobare mit  $A = 101$  wieder an. Deshalb ist  $^{101}\text{Ru}$  auch stabil gegenüber  $\beta^-$  Zerfall. Andererseits ist aber die Masse des  $^{101}\text{Rh}$  größer als die

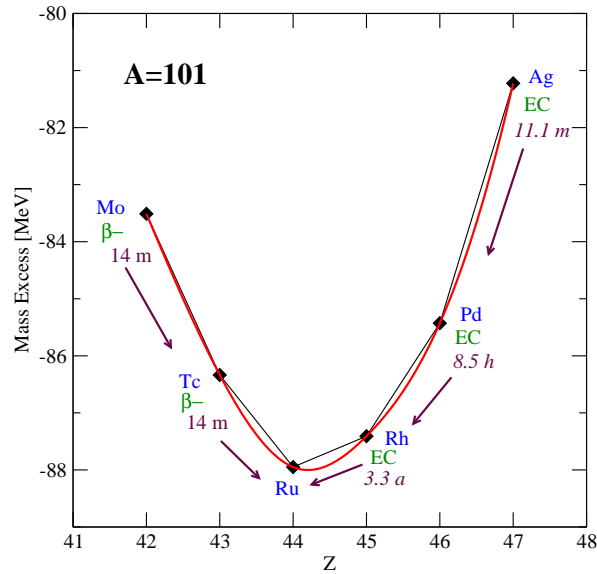


Abbildung 2.12:  $\beta$ -Zerfall und Elektronen Einfang (EC) für Atomkerne mit der Massenzahl  $A = 101$ . Aufgetragen ist der Massenüberschuss (Mass Excess) der verschiedenen Atomkerne, die chemischen Symbole und die Halbwertszeiten.

Masse des  $^{101}\text{Ru}$ . Man könnte sich also vorstellen, dass in diesem Fall unter Gewinn von Energie ein Proton in ein Neutron umgewandelt wird, etwa durch die Reaktion



Dabei steht  $e^+$  für das Positron, also das Antiteilchen des Elektrons und  $\nu_e$  für das zugehörige Neutrino. Dadurch stehen auf der rechten Seite des Reaktionspfeils wieder ein Lepton und ein Anti-Lepton, so dass die Leptonenzahl erhalten bleibt. Diese Reaktion ist für das freie Proton nicht möglich, da die Energiebilanz, der Q-Wert, negativ ist. Für ein Proton in einem Atomkern ist dieser sogenannte  $\beta^+$  Zerfall aber durchaus denkbar. Er ist allerdings in dieser Form häufig unterdrückt, da ja dabei ein Antiteilchen erzeugt werden muss, also die Energie  $2m_e c^2$  aufgebracht werden muss. In der Tat ist diese Reaktion aus Energiegründen nur möglich wenn

$$M(A, Z) > M(A, Z - 1) + 2m_e c^2.$$

In Konkurrenz zu diesem  $\beta^+$  Zerfall steht der **Elektroneneinfang** (EC; Electron Capture):



bei dem ein Elektron aus der Atomhülle eingefangen wird. Die Energiebilanz ist also um  $2m_e c^2$  günstiger als für den  $\beta^+$ -Zerfall, was natürlich wegen der starken Abhängigkeit der Zerfallskonstante von der freiwerdenden Energie diesen Prozess deutlich bevorzugt.

So sind die Isobare der  $A = 101$  Kette mit  $Z > 44$  auch alle instabil gegenüber Elektroneneinfang. Die Halbwertszeiten werden kürzer je größer der Energiegewinn  $E_0$  bei diesen Übergängen (siehe Abb. 2.12).

Die Massen der Isobare mit einer ungeraden Massenzahl  $A$  zeigen ein recht einfaches Verhalten. Es handelt sich ja dabei entweder um  $ug$  oder um  $gu$  Kerne, so dass der Beitrag

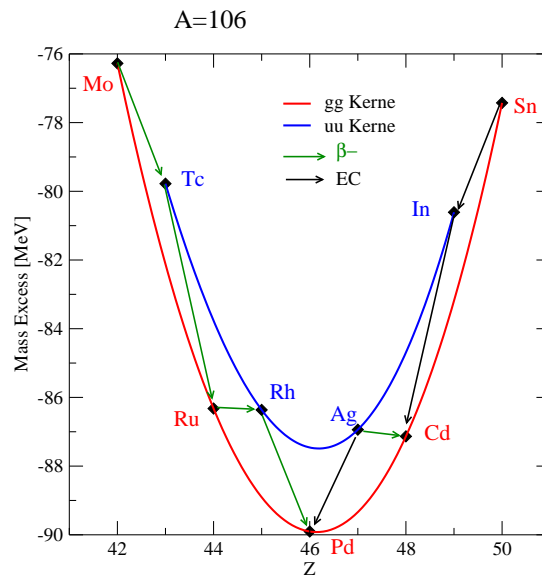


Abbildung 2.13:  $\beta^-$ -Zerfall und Elektronen Einfang (EC) für Atomkerne mit der Massenzahl  $A = 106$ .

der Paarungsenergie in der Bethe-Weizsäcker Massenformel in diesem Fall für all diese Atomkerne identisch Null ist. Daher werden die Energien beziehungsweise die Massen dieser Isobare als Funktion von der Kernladungszahl  $Z$  in der Bethe-Weizsäcker Formel durch eine einfache quadratische Funktion beschrieben, was auch durch die experimentellen Daten sehr gut bestätigt wird. So hat diese Funktion  $M(Z)$  auch nur ein Minimum und es gibt deshalb in der Regel auch nur ein stabiles Nuklid für jedes ungerade  $A$ .

Etwas komplizierter ist die Situation bei den Isobaren mit einer geraden Massenzahl  $A$ . In diesem Fall müssen wir unterscheiden zwischen  $gg$ -Kernen und  $uu$ -Kernen. Wegen des Paarenergietrms in der Bethe-Weizsäcker Formel sollten die Massen der Isobare als Funktion von  $Z$  in diesem Fall durch 2 Parabeln dargestellt werden: Eine für die  $gg$ -Kerne und eine zweite um die doppelte Paarungsenergie nach oben verschobene für die  $uu$ -Kerne. Auch diese Vorhersage der Massenformel wird durch die Daten sehr gut bestätigt, wie man an dem Beispiel der Isobaren Kette für  $A = 106$  in 2.13 sehen kann.

In diesem Fall gibt es zwei verschiedene stabile Nuklide, die nicht durch  $\beta^-$  oder Elektroneneinfang zerfallen können:  $^{106}\text{Pd}$  und  $^{106}\text{Cd}$ . Dafür bieten sich dem  $^{106}\text{Ag}$  zwei alternative Zerfallsprozesse an: Es kann durch  $\beta^-$  Zerfall in  $^{106}\text{Cd}$  oder durch Elektroneneinfang in  $^{106}\text{Pd}$  zerfallen. Insbesondere wegen des größeren Energiegewinns ist der Elektroneneinfang bevorzugt. Etwa 99.5 Prozent der  $^{106}\text{Ag}$  Atome zerfallen mit einer Halbwertszeit von etwa 24 Minuten über Elektroneneinfang in  $^{106}\text{Pd}$ . Der Rest zerfällt durch  $\beta^-$  Zerfall in  $^{106}\text{Cd}$ .

Von besonderem Interesse sind Fälle, bei denen man stabile Isotope vorliegen hat, die durch einen doppelten  $\beta$  Zerfall gleichzeitig 2 Neutronen in Protonen umwandeln. Entsprechende Untersuchungen werden mit großem Aufwand durchgeführt. Insbesondere interessiert man sich für Prozesse, bei denen dieser doppelte  $\beta$ -Zerfall ohne die Emission von Anti-Neutrinos stattfindet, der neutrinolose doppelte Beta Zerfall, da solche Ereignisse fundamentale Aussagen über die Natur der Neutrinos liefern würde.

## 2.4 Radioaktivität

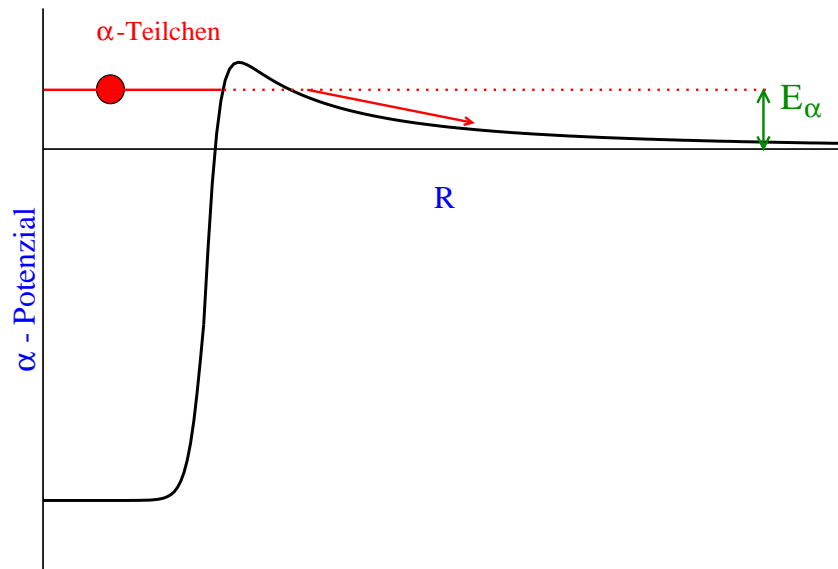
Unter dem Begriff **Radioaktivität** oder **radioaktive Strahlung** sammelt man verschiedene Prozesse, bei denen Energie in hochenergetischen Paketen oder Energiequanten abgegeben wird. Wegen der hohen Energie haben die Prozesse, die diese Energiequanten erzeugen, ihren Ursprung in der Regel im Bereich der nuklearen Physik und entstehen bei Umwandlungen von Atomkernen. Als typische Beispiele haben wir den  $\beta$ -Zerfall im vorhergehenden Abschnitt kennengelernt. Die Atomkerne, die instabil gegenüber  $\beta$ -Zerfall sind, sind die sogenannten  $\beta$ -Strahler. Die freiwerdende Energie wird vor allen Dingen in Form von kinetischer Energie der freigesetzten Elektronen und Anti-Neutrinos freigesetzt. Dabei muss uns die Energie der Neutrinos wenig kümmern. Wegen ihrer schwachen Wechselwirkung werden die Neutrinos in der Regel unser Umfeld ohne eine weitere Wechselwirkung verlassen. Die hochenergetischen Elektronen hingegen können zu Ionisationen von Molekülen führen, insbesondere auch von wichtigen Bio-Molekülen in unseren Zellen und sind daher potenziell schädlich.

Neben dem bereits besprochenen  $\beta$ -Zerfall kann man sich vorstellen, dass instabile Atomkerne dadurch zerfallen, dass sie einzelne Protonen oder auch Neutronen abgeben. Nuklide, die instabil gegenüber Proton- oder Neutron-Emission sind, haben sehr kurze Lebensdauern, bzw. Halbwertszeiten.

Ein besonderer Fall der Instabilität gegenüber Teilchen-Emission ist der sogenannte  **$\alpha$ -Zerfall**, bei dem der Mutterkern mit  $Z$  Protonen und  $N$  Neutronen ein  $\alpha$ -Teilchen, das ist der Atomkern des  ${}^4\text{He}$  Isotops, abgibt und so in den Tochterkern mit  $Z - 2$  Protonen und  $N - 2$  Neutronen umgewandelt wird. Kandidaten für den  $\alpha$  Zerfall sind alle Atomkerne, bei denen die Masse des Mutterkerns größer ist als die Masse des Tochterkerns plus die Masse des  $\alpha$ -Teilchens.

Wie können wir uns aber erstens vorstellen, dass der Mutterkern überhaupt eine gewisse Zeit existiert, und wie können wir zweitens verstehen, dass der Mutterkern dann schliesslich doch noch zerfällt? Die Antwort wollen wir mit Hilfe der Skizze von Abb. 2.14 diskutieren. In dieser Skizze ist das Potenzial eines  $\alpha$ -Teilchens im Feld des Tochterkerns dargestellt. Sind das  $\alpha$ -Teilchen und der Tochterkern weit auseinander, so spüren sie nur die gegenseitige Coulomb Abstoßung der positiven Kernladungen. Für große Werte des Abstandes  $R$  entspricht das Potenzial also dem Coulomb Potenzial. Die attraktiven Nukleon-Nukleon Kräfte werden erst bei kleinen Abständen  $R$  wirksam und führen dort zu einem attraktiven Potenzial. Dieser Potenzialverlauf ermöglicht es nun, das  $\alpha$ -Teilchen mit einer positiven Energie  $E_\alpha$  an den Tochterkern anzubinden, ohne dass dieser Gesamtkern zerfallen kann. Die Quantenmechanik bietet dann aber die Möglichkeit, dass das  $\alpha$ -Teilchen durch den "Coulomb Berg" hindurchtunnelt, auch wenn die Spitze dieses Coulomb Berges höher ist als  $E_\alpha$ . Ist ein solcher Tunnel Prozess einmal abgelaufen, so wird das  $\alpha$ -Teilchen durch die Coulomb Abstoßung vom Tochterkernen getrennt und nimmt diese Energie  $E_\alpha$  in Form von kinetischer Energie auf.

Die Wahrscheinlichkeit für diesen  $\alpha$ -Zerfall hängt sowohl von der Wahrscheinlichkeit ab, dass im Mutterkern ein solches  $\alpha$ -Teilchen vorformiert ist, als auch von der sogenannten Tunnelwahrscheinlichkeit. Die Tunnelwahrscheinlichkeit hängt von der Höhe und der Breite des Coulomb Berges ab, der durchtunnelt werden muss. So gibt es Kerne, die instabil gegenüber  $\alpha$ -Zerfall sind, mit ganz unterschiedlichen Zerfallskonstanten oder Halb-

Abbildung 2.14: Skizze zur Diskussion des  $\alpha$ -Zerfalls im Text

wertszeiten. Kerne, die instabil sind gegenüber  $\alpha$ -Zerfall findet man insbesondere bei den Elementen oberhalb von Blei, also  $Z$  größer als 92, aber auch bei den Isotopen mit relativ wenig Neutronen im Bereich  $60 < Z < 92$ . Die Halbwertszeiten für diesen Zerfall variieren zwischen Bruchteilen von Sekunden und  $10^{10}$  Jahren.

Natürlich kann man sich auch vorstellen, dass ein Mutterkern andere Bruchstücke als ein  $\alpha$ -Teilchen emittiert. Das  $\alpha$ -Teilchen zeichnet sich aber dadurch aus, dass es ein doppelt magischer Kern ist mit einer sehr hohen Bindungsenergie. Dadurch ergeben sich große  $Q$ -Werte für den  $\alpha$ -Zerfall, was den  $\alpha$ -Zerfall im Vergleich zur Emission von anderen Bruchstücken eine höhere Zerfallskonstante liefert.

Die Emission von größeren Bruchstücken wird außerdem dadurch behindert, dass die Wahrscheinlichkeit der Vorformation solcher Bruchstücke gering ist. Eine Ausnahme ist die Kernspaltung, auf die wir in einem gesonderten Kapitel zurückkommen werden.

In der Abb. 2.15 ist noch einmal die Nuklid Karte (vergleiche auch Abb. 2.8) wiedergegeben. In diesem Fall sind die Isotope aber mit Farben bezüglich des vorherrschenden Zerfallsmodus dargestellt. Die schwarz dargestellten Isotope sind stabil, die blauen und pinkfarbenen instabil bezüglich Elektroneneinfang bzw.  $\beta^-$  Zerfalls.  $\alpha$ -Strahler sind gelb dargestellt und solche, die spontaner Spaltung unterliegen mit grüner Farbe. Die leicht rot gefärbten emittieren Protonen und die dunkel-violett gefärbten sind instabil gegenüber Neutronen Emission. Insgesamt sind etwa 3000 Isotope dargestellt, von denen aber nur etwa 10 Prozent stabil sind.

Ein ganz anderer Typ des radioaktiven Zerfalls ist der sogenannte  $\gamma$ -Zerfall. In diesem Fall ändern sich die Konstituenten des Atomkerns nicht. Es findet lediglich ein Übergang statt von einem Zustand des Atomkerns, dem Anfangszustand  $\Psi_i$  mit der Energie  $E_i$ , in einen anderen Zustand  $\Psi_f$  mit der Energie  $E_f$ . Die dabei frei werdende Energie

$$E_\gamma = \hbar\omega = E_i - E_f$$

wird in Form von elektromagnetischer Energie als Photon, bzw als  $\gamma$ -Quant abgegeben.

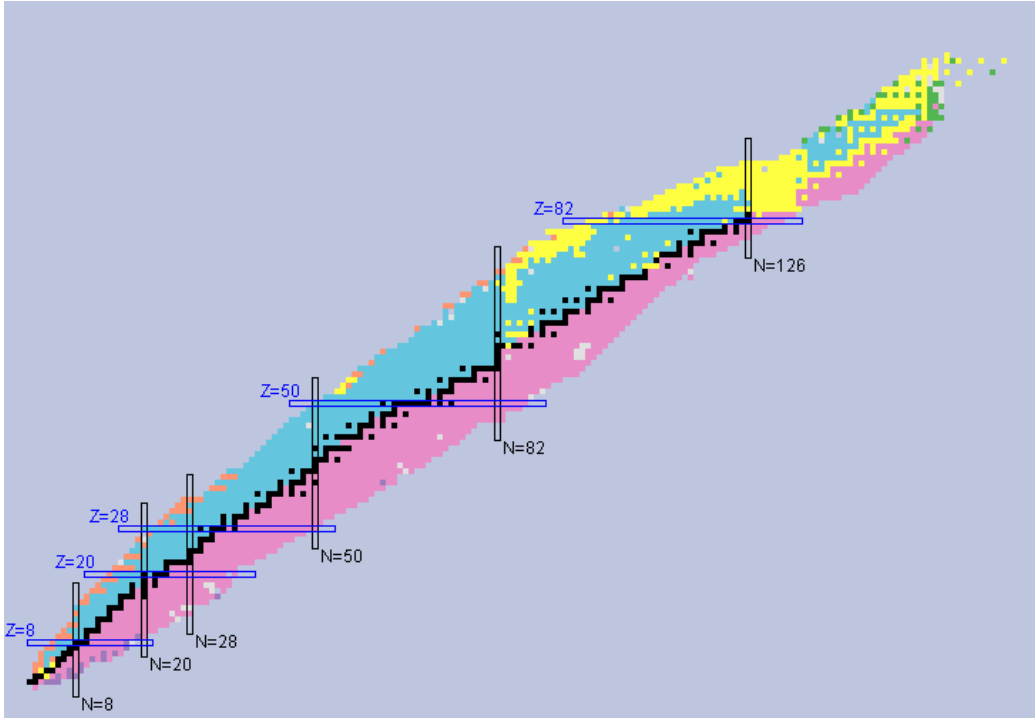


Abbildung 2.15: Nuklidkarte des National Nuclear Data Center Brookhaven, kodiert nach dem Zerfallsmodus (siehe Text).

Die Energien dieser  $\gamma$ -Quanten liegen in der Regel deutlich höher als die der Photonen aus der Atomphysik. Dadurch werden auch Übergänge ermöglicht, die eine etwas andere Struktur besitzen als die elektrischen Dipol Übergänge, die wir in der Atomphysik betrachtet haben. Die Reaktionsrate für elektromagnetische Übergänge mit der Energie  $E_\gamma$  berechnet sich mit Fermi's Goldener Regel zu

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_i(J_i, \pi_i) | \hat{O}l | \Psi_f(J_f, \pi_f) \rangle \right|^2 d\rho_l(E_\gamma). \quad (2.95)$$

Dabei bezeichnen  $J_i$  ( $J_f$ ) und  $\pi_i$  ( $\pi_f$ ) den Spin und die Parität des Anfangs (End) Zustandes des Übergangs und  $d\rho_l(E_\gamma)$  ist die Phasenraumdicke der  $\gamma$  Quanten der Energie  $E_\gamma$  mit der Multipolarität  $l$ . Das Matrixelement für den elektromagnetischen Übergang der Multipolarität  $l$

$$\langle \Psi_i(J_i, \pi_i) | \hat{O}l | \Psi_f(J_f, \pi_f) \rangle$$

ist nur dann von Null verschieden, wenn der Gesamtspin des Endzustandes, das ist die Summe aus dem Kernspin  $J_f$  und der Multipolarität der Strahlung  $l$  gleich dem Spin des Anfangszustandes  $J_i$  ist. Es müssen also die Regeln der Drehimpulskopplung erfüllt sein, so dass die Auswahlregeln gelten

$$|J_f - J_i| \leq l \leq J_f + J_i. \quad (2.96)$$

Außerdem muss die Parität des Integranden im Matrixelement positiv sein, was bedeutet, dass das Produkt aus der Parität des Anfangszustandes, des Endzustandes und des Operators  $\hat{O}l$  gleich 1 sein muss. Man unterscheidet dabei zwischen elektrischer Multipolstrahlung,  $\hat{O}l = \hat{E}l$  und magnetischer Multipolstrahlung  $\hat{O}l = \hat{M}l$ . Die Parität des Ope-

rators ist  $(-)^l$  für den elektrischen Multipol- und  $(-)^{l+1}$  für den magnetischen Multipol-Operator. Dies führt uns zu den folgenden Auswahlregeln für die Parität

$$\begin{aligned}\pi_f &= (-1)^l \pi_i && \text{für } \hat{E}l \text{ Übergänge} \\ \pi_f &= (-1)^{l+1} \pi_i && \text{für } \hat{M}l \text{ Übergänge.}\end{aligned}\quad (2.97)$$

Diese Auswahlregeln (2.96) und (2.97) erlauben im Allgemeinen die Konkurrenz von ganz unterschiedlichen Übergängen. So ist z.B. für einen Übergang

$$(J_i = 1, \pi_i = -1) : 1^- \longrightarrow (J_f = 2, \pi_i = 1) : 2^+,$$

sowohl die Abstrahlung von  $E1$  und  $E3$  als auch die von  $M2$  Strahlung mit den Auswahlregeln verträglich. Die Berechnung der Matrixelemente liefert aber typischerweise einen Faktor von

$$\begin{aligned}\left(\frac{2\pi R}{\lambda}\right)^l & \text{ für } \hat{E}l \text{ Übergänge} \\ \left(\frac{2\pi R}{\lambda}\right)^{l+1} & \text{ für } \hat{M}l \text{ Übergänge.}\end{aligned}\quad (2.98)$$

Dabei ist  $R$  der Radius des abstrahlenden Objektes, also hier des Atomkerns, mit einem Wert von etwa 5 fm und  $\lambda$  die Wellenlänge des  $\gamma$ -Quants also etwa  $\lambda/2\pi$  ungefähr gleich 400 fm für  $E_\gamma$  von 0.5 MeV. Durch diesen Faktor, der ja quadratisch in den Ausdruck für die Reaktionsrate (2.95) eingeht, dominiert  $E1$  gegenüber  $E2$  und  $M1$  Strahlung, diese wiederum gegenüber  $E3$  und  $M2$  und so weiter. Es wird also die Multipolstrahlung mit der niedrigsten Multipolarität, die mit den Auswahlregeln kompatibel ist, dominieren. Im Fall der Atomphysik entspricht der Wert für den Radius  $R$  in (2.98) dem Radius eines Atoms also etwa  $R \approx 1\text{\AA}$  und  $\lambda/2\pi \approx 800\text{\AA}$ . Dies bedeutet, dass in der Atomphysik alle Strahlungsmoden im Vergleich zur elektrischen Dipolstrahlung,  $E1$ , praktisch verboten sind. Für den Phasenraumfaktor in (2.95) gilt

$$d\rho_l(E_\gamma) \sim E_\gamma^{2l+1},$$

was ebenfalls die Bedeutung der höheren Multipolübergänge in der Kernphysik eine relativ größere Bedeutung zuordnet, als bei den niedrigen Energien der Photonen in der Atomphysik.

Charakteristisch für die Elektrische Dipol Strahlung ist die Winkelverteilung der Emission der Strahlung, die wir als Abstrahlung des Hertzschen Dipols im zweiten Semester kennengelernt haben. Bei der Emission z.B. von elektrischer Quadrupolstrahlung ist das Schwingungsmuster der Quelle nicht das eines zeitabhängigen Dipolmomentes, wie das bei dem Hertzschen Dipol der Fall ist, sondern das eines zeitabhängigen Quadrupolmomentes. Eine solche Schwingung hat auch eine andere Winkelverteilung in der Abstrahlcharakteristik zur Folge. Prinzipiell kann man also die Art der Strahlung experimentell durch die Form der Winkelverteilung bei der Emission bestimmen. Dazu müsste aber die Orientierung des Koordinatensystems festgelegt sein, was natürlich in der Regel nicht der Fall ist. Ein Ausweg liefert hier die Messung von Winkelkorrelationen bei korrelierten Zerfallsprozessen.

### 2.4.1 Zerfallsketten

Im Abschnitt 2.2 haben wir den einfachen Zerfall diskutiert, bei denen eine fest vorgegebene Anzahl von Mutterkernen  $\mathcal{N}(0)$  mit einer gegebenen Zerfallskonstante  $\lambda$  in einen Tochterkern zerfällt. Die Zahl der Mutterkerne nimmt dabei als Funktion der Zeit ständig ab nach (2.58)

$$\mathcal{N}(t) = \mathcal{N}(0)e^{-\lambda t}.$$

Häufig findet man Zerfallsketten der Form

$$\mathcal{N}_1 \xrightarrow{\lambda_1} \mathcal{N}_2 \xrightarrow{\lambda_2} \mathcal{N}_3, \quad (2.99)$$

bei denen also z.B. die Zahl der Nuklide des Typs 2,  $\mathcal{N}_2$  dadurch sinkt, dass sie zerfallen mit der Zerfallskonstante  $\lambda_2$  in Nuklide des Typs 3, andererseits aber auch ständig neue Nuklide dieses Typs durch den Zerfall des Typs 1 erzeugt werden. Um die Zeitabhängigkeit der Zahl der Isotope in einer solchen Kette zu berechnen, machen wir den Ansatz

$$\mathcal{N}_i(t) = \sum_{j \leq i} C_{ij} e^{-\lambda_j t}, \quad (2.100)$$

so dass die Zahl der Isotope  $\mathcal{N}_i$  nur von den Zerfallskonstanten der Isotope  $j$  abhängt, die in der Kette vor dem Isotop  $i$  positioniert sind. Die Koeffizienten dieses Ansatzes,  $C_{ij}$ , müssen noch bestimmt werden. Als erstes können wir dazu die Startbedingungen für  $t = 0$  heranziehen

$$\mathcal{N}_i(0) = \sum_{j \leq i} C_{ij}. \quad (2.101)$$

Die Anzahl der Mutterkerne für die gesamte Kette  $\mathcal{N}_1$  ändert sich nur durch den Zerfall in den Tochterkern vom Typ 2; für die zeitliche Änderung dieser Anzahl gilt also wie bereits im Abschnitt 2.2 diskutiert

$$\frac{d\mathcal{N}_1}{dt} = -\lambda_1 \mathcal{N}_1,$$

was zu dem üblichen Zerfallsgesetz

$$\mathcal{N}_1(t) = \mathcal{N}_1(0)e^{-\lambda_1 t}, \quad (2.102)$$

führt. Die Zahl der Isotope vom Typ 2 verringert sich pro Zeiteinheit um  $\lambda_2 \mathcal{N}_2$  und vergrößert sich durch den Zerfall der Mutterisotope 1 um  $\lambda_1 \mathcal{N}_1$ . Wir können also schreiben

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{N}_2}{dt} &= -\lambda_2 \mathcal{N}_2 + \lambda_1 \mathcal{N}_1 \\ &= -\lambda_2 (C_{21} e^{-\lambda_1 t} + C_{22} e^{-\lambda_2 t}) + \lambda_1 C_{11} e^{-\lambda_1 t}. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Die zweite Zeile dieser Gleichung haben wir dadurch erhalten, dass wir den Ansatz (2.100) für  $\mathcal{N}_1$  und  $\mathcal{N}_2$  in der ersten Zeile eingesetzt haben. Andererseits können wir aber auch schreiben

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{N}_2}{dt} &= \frac{d}{dt} (C_{21} e^{-\lambda_1 t} + C_{22} e^{-\lambda_2 t}) \\ &= -\lambda_1 C_{21} e^{-\lambda_1 t} - \lambda_2 C_{22} e^{-\lambda_2 t}. \end{aligned} \quad (2.104)$$



Vergleicht man die zweiten Zeilen von (2.103) und (2.104) so müssen, da ja diese beiden Ausdrücke das gleiche beschreiben, die Faktoren vor der Exponentialfunktion  $\exp(-\lambda_1 t)$  in beiden identisch sein, also:

$$-\lambda_2 C_{21} + \lambda_1 C_{11} = -\lambda_1 C_{21},$$

es gilt also (beachte dabei, dass wegen (2.101)  $C_{11} = \mathcal{N}_\infty(0)$ )

$$C_{21} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} C_{11} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \mathcal{N}_1(0). \quad (2.105)$$

Wegen (2.101) gilt außerdem, dass

$$C_{22} = \mathcal{N}_2(0) - C_{21}, \quad (2.106)$$

auch die Koeffizienten für  $\mathcal{N}_2(t)$  im Ansatz (2.100) eindeutig bestimmt haben. Die entsprechenden Zahlen für die folgenden Glieder der Kette können analog bestimmt werden.

## 2.4.2 Einheiten zur Quantifizierung von radioaktiver Strahlung

Zur Quantifizierung von radioaktiven Prozessen unterscheidet man 3 unterschiedliche Kriterien, nach denen diese Aktivität einer Probe bemessen wird:

- Zum ersten definiert man die **Aktivität einer Probe** nach der Zahl der radioaktiven Zerfälle, die in dieser Probe im statistischen Mittel pro Zeiteinheit stattfinden. Diese Aktivität ergibt sich aus dem Produkt der Zerfallskonstante  $\lambda$  des Materials und der Zahl der Isotope  $\mathcal{N}(t)$  in der Probe:

$$\mathcal{A} = \lambda \mathcal{N}.$$

Die Aktivität einer Probe wird angegeben in Becquerel. Dabei hat eine Probe eine Aktivität von 1 Becquerel, wenn 1 Zerfall pro Sekunde stattfindet.

$$\text{Becquerel:} \quad 1 \text{ Bq} = 1 \frac{\text{Zerfall}}{\text{Sekunde}}. \quad (2.107)$$

Ein historisches Maß für die Aktivität ist 1 Curie, was der Aktivität von einem Gramm Radium entspricht. Es gilt die folgende Umrechnung

$$1 \text{ Curie} = 1 \text{ Ci} \approx 3.7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}.$$

- Ein zweites Kriterium, nach dem man radioaktive Belastung charakterisiert, ist ihre physikalische Wirkung. Am einfachsten kann man bestimmen, wie viel Ionisationsladung in einem vorgegebenen Volumen durch radioaktive Strahlung verursacht werden. Darauf beruht die **Ionendosis**, die in Röntgen angegeben wird. Das ist die Menge an radioaktiver Strahlung, die in einem Milliliter Luft unter Normalbedingungen eine elektrostatische Einheit an Ionenladung erzeugt. Umgerechnet gilt

$$\text{Röntgen:} \quad 1 \text{ R} = 2.58 \cdot 10^{-4} \frac{\text{C}}{\text{kg Luft}}. \quad (2.108)$$

Alternativ zur Ionendosis gibt man häufig auch die **Energiedosis** an in Einheiten von Gray. Dabei ist ein Gray die Menge radioaktiver Strahlung, die in einem Kilogramm 1 Joule an Energie deponiert

$$\text{Gray:} \quad 1 \text{ Gy} = 1 \frac{\text{J}}{\text{kg}}. \quad (2.109)$$

- Ein drittes Kriterium ist die biologische Wirkung einer Dosis elektromagnetischer Strahlung, die in Sievert angegeben wird. Dieses Maß für die **biologische Wirkung** versucht zu berücksichtigen, dass z.B. eine Energiedosis von 1 Gray, die durch die Abbremsung von  $\alpha$  Teilchen deponiert wird, für biologische Zellen in der Regel schädlicher ist als die gleiche Energiedosis, durch Röntgenstrahlung oder Elektronen des  $\beta$  Zerfalls. Diese biologische Wirksamkeit wird durch einen sogenannten **Qualitätsfaktor**  $QF$  angegeben und es gilt:

$$\text{Sievert:} \quad 1 \text{ Sv} = 1 \text{ Gy } QF. \quad (2.110)$$

Röntgenstrahlung und  $\beta$ -Strahlung haben einen Qualitätsfaktor von etwa 1, für  $\alpha$  Strahler gilt  $QF \approx 10$  und für Neutronen wächst  $QF$  von 5 für langsame auf 10 für schnelle Neutronen.

### 2.4.3 Natürliche Radioaktivität, Datierungsmethoden

Im Sonnensystem und natürlich speziell auf der Erde findet man unter natürlichen Bedingungen etwa 60 Isotope, die radioaktiv sind. Alle anderen instabilen Isotope, die in der Nuklidkarte der Abb. 2.15 aufgeführt sind, mußten erst von Menschen in radioaktiven Prozessen erzeugt werden, bevor man sie untersuchen konnte.

So stellt man z.B. fest, dass das Isotop des Thoriums ( $Z=90$ ) mit  $A=232$ , also  $^{232}\text{Th}$ , mit einer Halbwertszeit von  $1.39 \cdot 10^{10}$  Jahren, genau so wie das Isotop des Urans,  $^{238}\text{U}$  ( $Z=92$ , Halbwertszeit  $4.5 \cdot 10^9$  Jahre), als natürliches Isotop vorkommt. Andererseits gibt es das Isotop des Neptunium  $^{237}\text{Np}$  ( $Z=93$ , Halbwertszeit  $2.2 \cdot 10^6$  Jahre) nicht in natürlicher Form. Dies deutet darauf hin, dass die Halbwertszeiten von  $^{232}\text{Th}$  und  $^{238}\text{U}$  so lang sind, dass von den ursprünglich in stellaren Prozessen erzeugten Atomkernen, immer noch welche verfügbar sind, während die ursprünglich erzeugten  $^{237}\text{Np}$  Isotope inzwischen alle, im Wesentlichen durch  $\alpha$  Zerfall, verschwunden sind. Aus einer genaueren Analyse der natürlichen Isotope und ihrer Zusammensetzung kann man schliessen, dass das Material des Sonnensystems vor etwa 10 Milliarden Jahren ( $10^{10}$  Jahren) erzeugt worden ist (siehe Anmerkungen zur Elementsynthese im Abschnitt 2.10).

Die Vermessung der Isotopenzusammensetzung ist aber nicht nur für die Abschätzung des Alters des Sonnensystems von Bedeutung. Als ein Beispiel für die Anwendung der Kernphysik bei Datierungen von archäologischen Funden, soll kurz auf die sogenannte  $^{14}\text{C}$  Methode eingegangen werden.

Das Isotop des Kohlenstoffs,  $^{14}\text{C}$ , ist instabil gegenüber  $\beta^-$  Zerfall mit einer Halbwertszeit von 5730 Jahren. Dennoch kommt es in der Atmosphäre mit einer kleinen Wahrscheinlichkeit vor. Dabei gilt für das Verhältnis von Zahl der  $^{14}\text{C}$  zu Anzahl der dominanten  $^{12}\text{C}$

$$\frac{\mathcal{N}(^{14}\text{C})}{\mathcal{N}(^{12}\text{C})} \approx 1.5 \cdot 10^{-12}. \quad (2.111)$$

Obwohl dieses Verhältnis sehr klein ist, ist der Anteil der  $^{14}\text{C}$  Atome natürlich nicht als Rest der ursprünglich synthetisierten Materie zu erklären (dazu ist die Halbwertszeit zu kurz).  $^{14}\text{C}$  wird vielmehr ständig in der Atmosphäre aus Stickstoff produziert durch Neutronen aus der Höhenstrahlung über die Reaktion



Dies führt dazu, dass das Verhältnis (2.111) über viele Jahrtausende konstant geblieben ist. Der Kohlenstoff der Luft wird durch biologische Prozesse z.B. im Holz fixiert. Ist der Kohlenstoff aber einmal fixiert, so reduziert sich das Verhältnis  $^{14}\text{C}$  zu  $^{12}\text{C}$  ständig mit der Zeit: Die  $^{14}\text{C}$  Isotope zerfallen durch  $\beta$ -Zerfall, es werden aber im Holz keine nachproduziert, da die Reaktion, die  $^{14}\text{C}$  Erzeugung nur in der Atmosphäre abläuft. So kann man also durch Ausmessung des Verhältnisses von  $^{14}\text{C}$  zu  $^{12}\text{C}$ , beziehungsweise durch die Vermessung der  $\beta$ -Aktivität der Probe, nachweisen vor welcher Zeit das Holz gewachsen ist. Die Halbwertszeit des  $^{14}\text{C}$  ist ideal für Altersbestimmungen von einigen tausend Jahren.

Bei dieser Analyse wird angenommen, dass das Verhältnis von (2.111) konstant ist. Im letzten Jahrhundert wurde dieses Verhältnis aber merklich durch Menschenhand beeinflusst. Zu Beginn des 20. Jahrhunderts wurde der  $^{14}\text{C}$  Anteil am Inventar der Atmosphäre kleiner. Durch die Verbrennung von fossilen Brennstoffen wurde eine zusätzliche Menge von  $^{12}\text{C}$  freigesetzt. Demgegenüber beobachtete man seit 1954 einen Anstieg des  $^{14}\text{C}$  Anteils. Die Ursache hierfür liegt wohl in den Versuchen mit Atombomben. Dabei wurden in großer Menge Neutronen freigesetzt, die über (2.112) messbare Mengen von  $^{14}\text{C}$  erzeugten.

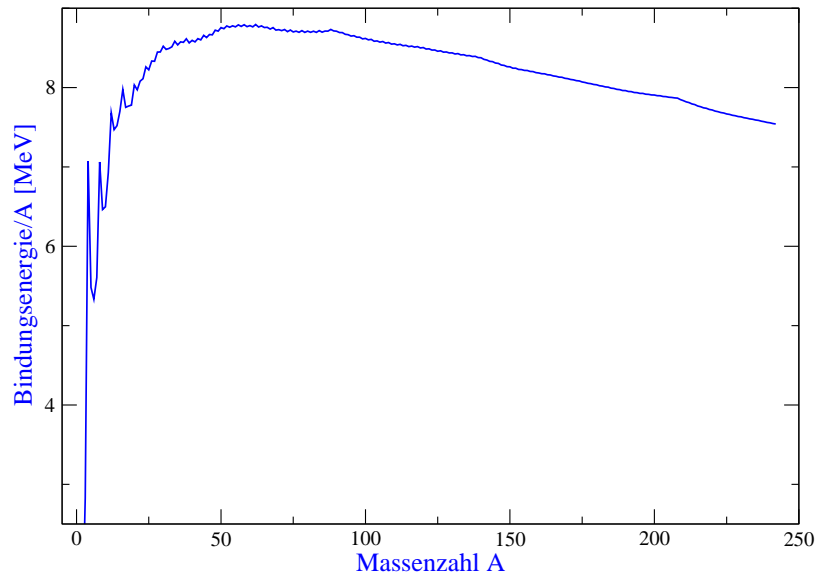


Abbildung 2.16: Experimentelle Werte für die Bindungsenergie pro Nukleon für die Atomkerne mit verschiedenen Massenzahlen  $A$ . Für jede Massenzahl ist der jeweils höchste Wert dargestellt.

## 2.7 Kernspaltung

In der Abb 2.16 sind die experimentellen Werte für die Bindungsenergie pro Nukleon aufgetragen als Funktion der Massenzahl  $A$ . Dabei wurde für jede Massenzahl  $A$  der Atomkern mit der höchsten Bindungsenergie bei dieser Massenzahl berücksichtigt. Wir sehen an dieser Darstellung der experimentellen Werte, dass sich ein Maximum für die Bindungsenergie pro Nukleon bei der Nukleonenzahl  $A$  von etwa 60 ergibt. Offensichtlich kann man also Energie dadurch gewinnen, dass man Atomkerne mit einer großen Massenzahl von etwa 200 spaltet in 2 Fragmente von mittlerer Massenzahl, oder aber zwei sehr leichte Atomkerne zu einem Atomkern mit mittlerer Massenzahl fusioniert.

Diese globale Eigenschaft der Bindungsenergie wird bereits durch das einfache Tröpfchenmodell, das der Bethe-Weizsäcker Massenformel (2.51) zugrundeliegt, reproduziert. Bei den sehr leichten Atomkernen ( $A < 50$ ) dominiert die Oberfläche das System. Die meisten Nukleonen liegen an der Oberfläche und nur wenige im Zentrum des Kerns sind von anderen Nukleonen vollständig umgeben, so dass sie die volle Attraktion durch andere Nukleonen in der Nachbarschaft erfahren. Durch eine Vergrößerung der Nukleonenzahl wird der Anteil der Nukleonen im Zentrum vergrößert, was zu mehr Bindungsenergie pro Nukleon führt.

Bei sehr großen Atomkernen wird die Coulomb Abstoßung der Protonen immer wichtiger, da dieses Coulomb Potenzial eine sehr viel größere Reichweite hat, als die attraktive Nukleon-Nukleon Wechselwirkung. Die Atomkerne versuchen diesen Coulomb Effekt dadurch abzuschwächen, dass der Anteil der Neutronen relativ zum Anteil der Protonen erhöht wird. Dies führt aber zu einem Anwachsen der Symmetrie Energie in der Bethe-Weizsäcker Massenformel. Letztlich ist es also die langreichweitige Coulomb Abstoßung, die für den Abfall der Bindungsenergie pro Nukleon bei schweren Atomkernen verant-

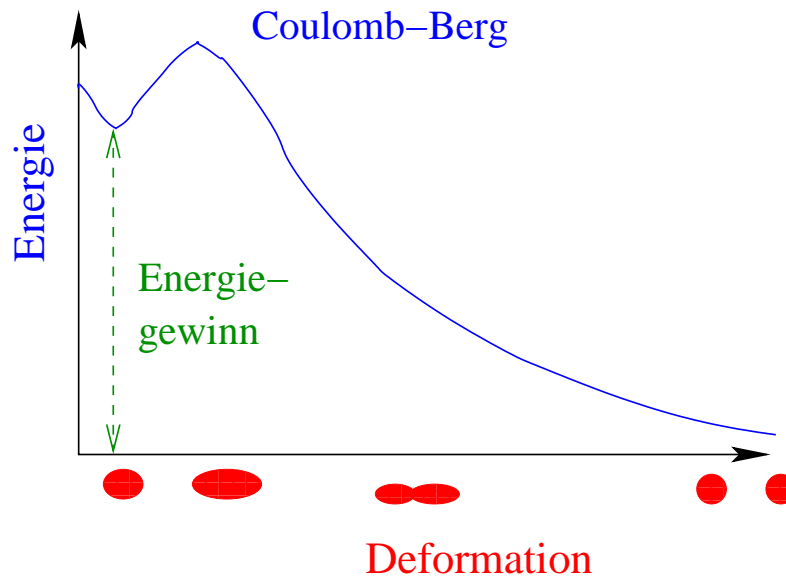


Abbildung 2.17: Skizze für die Energie eines Atomkerns als Funktion seiner Deformation. Auf der horizontalen Achse sind verschiedene Kerndeformation vom sphärischen Kern bis hin zu zwei isolierten Kernen dargestellt.

wortlich ist, und dafür sorgt, dass Atomkerne mit  $A > 240$  instabil sind.

Dies wird auch in der Abb. 2.17 zum Ausdruck gebracht, in der die Energie eines Atomkerns als Funktion seiner Oberfläche, bzw. der Deformation dieser Oberfläche skizziert ist. Diese Energiefunktion zeigt ein lokales Minimum bei kleiner Deformation. In der Tat führen Effekte des Schalenmodells dazu, dass die meisten Atomkerne einen leicht deformierten Grundzustand aufweisen. Eine solche Deformation wird auch durch die Coulomb Wechselwirkung gefördert, da ja die Protonen in einem deformierten Atomkern im Mittel ein wenig weiter auseinander liegen werden, als im Fall des sphärischen Atomkerns.

Das globale Minimum der Energie ergibt sich aber erst bei sehr großer Deformation, dort wo der Atomkern in zwei Teilkern aufgespalten ist. Bringt man diese beiden Teilstücke zusammen, so spüren die Nukleonen des einen Fragmentes die des anderen zunächst nur über die Coulomb Abstoßung: die starke Wechselwirkung hat eine zu kurze Reichweite, um bei großen Abständen der Fragmente wirksam zu werden. So wächst also die Energie mit abnehmendem Abstand der Fragmente entsprechend dem  $1/r$  Verhalten des Coulomb Potentials an. Erst bei kurzen Abständen der Fragmente, wo die beiden Kerntropfen verschmelzen, dominiert die Attraktion, was zur Ausbildung des lokalen Minimums bei kleinen Deformationen führt.

Diese Skizze verdeutlicht, dass ein schwerer Atomkern durchaus stabil sein kann, auch wenn es energetisch natürlich günstiger wäre, ihn in 2 Teilkern zu spalten. Der sogenannte Coulomb - Berg verhindert eine solche Spaltung.

Wie wir aber bereits beim  $\alpha$ -Zerfall gesehen haben, erlaubt der Tunneleffekt der Quantenmechanik, dass das System diesen Coulomb - Berg mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durchtunnelt, so dass er mit einer **Spontanen Kernspaltung** zerfällt. Diese spontane Kernspaltung kann man bei verschiedenen schwereren Atomkernen beobachten. Meistens zeigen aber andere Prozesse wie  $\alpha$ - oder  $\beta$ -Zerfall ein größere Zerfallskonstante, so dass

diese Prozesse dominieren.

Dennoch könnte man sich naiv vorstellen, dass man eine gewisse Menge aus spaltenden Atomkernen sammelt und die Energie, die bei diesen Spaltprozessen in Form der kinetischen Energie der Spaltprodukte freigesetzt wird, in irgendeiner Form nutzt.

Dieses Energiekonzept ist auf dem ersten Blick recht attraktiv, denn durch eine Kernspaltung wird etwa 200 MeV an Energie freigesetzt, während durch chemische Prozesse, wie etwa die Verbrennung von Kohle oder Erdöl, nur wenige Elektronenvolt pro Molekül gewonnen werden.

Geht man davon aus, dass in Europa pro Jahr und pro Einwohner Primärenergie von etwa 7 Tonnen Steinkohle Einheiten (7 t SKE/Jahr) verbraucht werden, so kann man diese Energie, wie schon der Name sagt, durch Verbrennen von 7 Tonnen Steinkohle pro Bewohner und pro Jahr erbringen. Alternativ kann man diese Energie aber auch durch Verbrennen von 5 Tonnen Erdöl oder durch den Verbrauch von 200 Gramm Uranoxid in einem Kernreaktor, der die Kernspaltung nutzt, erbringen. Bei der Ausnutzung der Kernfusion würden etwa 3 Gramm Brennstoff ausreichen, um den Energiebedarf eines Europäers im Jahr zu decken. Dieser Vergleich soll die unterschiedliche Energiedichte der chemischen und nuklearen Prozesse verdeutlichen.

Das oben dargestellte Konzept des Kernreaktors, bei dem man einfach auf die spontane Kernspaltung wartet, ist natürlich für die Energiegewinnung nicht nutzbar. Entweder hat der Spaltstoff eine zu hohe Zerfallskonstante für Kernspaltung oder eine zu niedrige. Ist die Zerfallskonstante groß, hat der Kern eine kurze Halbwertszeit und man wird keine Isotope von diesem Typ vorfinden. Ist die Zerfallskonstante niedrig, so wird man wohl hinreichend viel Material vorfinden, allerdings wird dann aber die Spaltaktivität entsprechend niedrig sein, so dass man keine Energie im gewünschten Umfang erzeugen kann.

Einen Ausweg aus diesem Dilemma zeigten die Versuche von Otto Hahn und Fritz Straßmann mit der korrekten Interpretation von Lise Meitner auf. Dabei wurde Uran mit thermischen Neutronen, also Neutronen mit einer Energie von etwa  $k_B T$  mit  $T$  der Raumtemperatur, das sind etwa 0.025 eV, bestrahlt. Der Kernchemiker Otto Hahn entdeckte, daß beim Beschuss von Uran mit thermischen Neutronen mittelschwere Elemente wie *Ba* und *La* entstanden. Wie von Lise Meitner vermutet wurde, wird die Spaltung von Urankernen durch thermische Neutronen induziert. Man muss also nicht warten bis irgendwann mal ein Urankern spontan spaltet, sondern kann diesen Prozess durch die Bestrahlung mit Neutronen steuern.

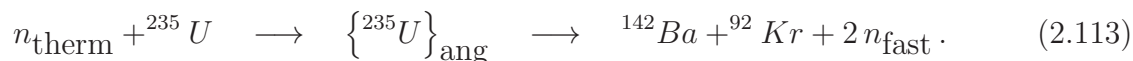
Zur genaueren Darstellung dieses Prozesses der neutroneninduzierten Spaltung von Atomkernen des Uran, betrachten wir zunächst einmal die Nuklidkarte im Bereich der Uranisotope in Abb. 2.18. Wir sehen daraus, dass natürliches Uran im wesentlichen aus zwei stabilen Isotopen zusammengesetzt ist: Es besteht zu etwa 0.7 % aus  $^{235}\text{U}$  mit einer Halbwertszeit von  $7 \cdot 10^8$  Jahren und zu 99.3 % aus  $^{238}\text{U}$  mit einer Halbwertszeit von  $7 \cdot 10^9$  Jahren. Mit diesen Halbwertszeiten sind diese Uran Isotope relativ stabil. Mit einer großen Halbwertszeit sind sie instabil vor allen Dingen gegenüber  $\alpha$ -Zerfall und spontaner Spaltung. Die höhere Halbwertszeit des  $^{238}\text{U}$  im Vergleich zum  $^{235}\text{U}$  ist natürlich ein entscheidender Grund für die größere Häufigkeit dieses Isotops.

Durch den Einfang des thermischen Neutrons wird das  $^{235}\text{U}$  in einen angeregten Zustand des  $^{236}\text{U}$  Isotopes mutiert, welches dann sehr schnell spaltet, bevorzugt in zwei Bruchstücke

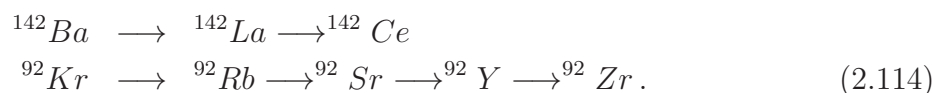
95	<sup>234</sup> Am 2.32 M ε	<sup>235</sup> Am 9.9 M ε	<sup>236</sup> Am 4.4 M ε	<sup>237</sup> Am 73.0 M ε	<sup>238</sup> Am 98 M ε	<sup>239</sup> Am 11.9 H ε	<sup>240</sup> Am 50.8 H ε	<sup>241</sup> Am 432.2 Y α	<sup>242</sup> Am 16.02 H β-
	<sup>233</sup> Pu 20.9 M ε	<sup>234</sup> Pu 8.8 H ε	<sup>235</sup> Pu 25.3 M ε	<sup>236</sup> Pu 2.858 Y α	<sup>237</sup> Pu 45.2 D ε	<sup>238</sup> Pu 87.7 Y α	<sup>239</sup> Pu 24110 Y α	<sup>240</sup> Pu 6564 Y α	<sup>241</sup> Pu 14.290 Y β-
93	<sup>232</sup> Np 14.7 M ε	<sup>233</sup> Np 36.2 M ε	<sup>234</sup> Np 4.4 D ε	<sup>235</sup> Np 396.1 D ε	<sup>236</sup> Np 154E+3 Y ε	<sup>237</sup> Np 2.144E+6 Y α	<sup>238</sup> Np 2.117 D β-	<sup>239</sup> Np 2.356 D β-	<sup>240</sup> Np 7.22 M β-
	<sup>231</sup> U 4.2 D ε	<sup>232</sup> U 68.9 Y α	<sup>233</sup> U 1.592E+5 Y α	<sup>234</sup> U 2.455E+5 Y 0.0054% α	<sup>235</sup> U 7.04E+8 Y 0.7204% α	<sup>236</sup> U 2.342E7 Y α	<sup>237</sup> U 6.75 D β-	<sup>238</sup> U 4.468E+9 Y 99.2742% α	<sup>239</sup> U 23.45 M β-
91	<sup>230</sup> Pa 17.4 D ε	<sup>231</sup> Pa 3.276E+4 Y α	<sup>232</sup> Pa 1.31 D β-	<sup>233</sup> Pa 26.967 D β-	<sup>234</sup> Pa 6.70 H β-	<sup>235</sup> Pa 24.44 M β-	<sup>236</sup> Pa 9.1 M β-	<sup>237</sup> Pa 8.7 M β-	<sup>238</sup> Pa 2.3 M β-
	139		141		143		145		147

Abbildung 2.18: Nuklidkarte im Bereich  $91 \leq Z \leq 95$ .

mit ungleicher Nukleonenzahl. Eine typische Reaktion hat also die Form



Da der Neutronenanteil der Nuklide mit wachsender Massenzahl steigt, haben die dabei entstehenden Isotope des Bariums und Kryptons, bezogen auf ihre Kernladungszahlen einen großen Neutronenanteil. Deshalb sind sie auch instabil gegenüber dem  $\beta^-$ -Zerfall und zerfallen mit Halbwertszeiten im Bereich von wenigen Sekunden bis zu einigen Stunden in



Alternativ zu dieser Reaktionskette von (2.113) und (2.114) gibt es auch andere Produktketten bei der Spaltung. Die statistische Verteilung der Spaltprodukte, insbesondere die Bevorzugung der Spaltung in asymmetrische Fragmente wird mit theoretischen Modellen recht gut beschrieben.

Festzuhalten bleibt aber für diese Spaltreaktionen:

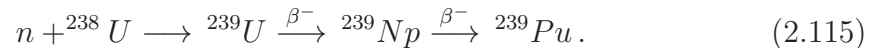
- nur das relativ seltene Uran Isotop  ${}^{235}\text{U}$  erfährt eine neutroneninduzierte Spaltung,
- bei jeder erfolgreichen Spaltung eines  ${}^{235}\text{U}$  Kerns werden im statistischen Mittel 2.4 Neutronen freigesetzt (siehe z.B. (2.113)).

Man kann sich also sehr gut vorstellen, dass diese vermehrte Freisetzung von Neutronen eine Kettenreaktion auslöst. In der ersten Generation spaltet ein Kern, dies führt zu mehr als zwei Neutronen, die zwei weitere Spaltungen induzieren, daraus ergeben sich zwei mal 2.4 Neutronen, die mehr als 4 Spaltungen auslösen könnten, usw. In der Atombombe will man gerade diese Kettenreaktion auslösen, so dass in sehr kurzer Zeit sehr viel Spaltenergie freigesetzt wird.

Diese Kettenreaktion kommt aber nur dann zustande, wenn erstens die bei einer Spaltung entstehenden Neutronen von der hohen Energie von typischerweise etwa 1 MeV auf die thermische Energie von etwa 0.025 MeV abgebremst werden. Nur diese abgebremsten Neutronen werden vom  $^{235}\text{U}$  Uran eingefangen zur Bildung der ersten Reaktionsstufe in (2.113). Der Wirkungsquerschnitt des Neutroneneinfangs mit nachfolgender Spaltung ist für schnelle Neutronen sehr viel geringer. Zweitens sollten alle abgebremsten Neutronen wieder eine Spaltreaktion auslösen und nicht von anderen Atomkernen absorbiert werden.

Was kann man also machen, um möglichst viele der bei der Spaltung erzeugten Neutronen wieder für die nächste Reaktion zu nutzen? Folgende Punkte geben eine kleine Übersicht über mögliche Maßnahmen:

- **Anreicherung des Uran:** Die Isotope des Uran mit der Massenzahl 238 stören den Spaltprozess. Sie absorbieren ebenfalls Neutronen mit einer Reaktionskette (siehe Abb. 2.18)



Das  $^{239}\text{Pu}$  hat eine Halbwertszeit von etwa 20000 Jahren. Diese Zeit ist nicht lang genug, dass es natürlich vorkommen könnte. Wegen der Reaktion (2.115) ist  $^{239}\text{Pu}$  aber ein langlebiges Abfallprodukt aller Kernreaktoren, die mit Uran arbeiten. Darüber hinaus ergibt sich aus diesem Abfallprodukt ein Sicherheitsrisiko: Plutonium kann auf chemischer Basis relativ leicht angereichert werden und kann dann selbst als Brennstoff für atomare Waffen eingesetzt werden.

Ziel der Uran Anreicherung ist es den Anteil des spaltenden  $^{235}\text{U}$  Isotops gegenüber dem Anteil des  $^{238}\text{U}$  Isotops zu vergrößern. In den üblichen Reaktoren der Kernkraftwerke wird typischerweise ein Uran - Gemisch benutzt, bei dem  $^{235}\text{U}$  auf etwa 3 bis 4 Prozent angereichert ist (im Vergleich zu 0.7 % im Natururan). In Kernwaffen benutzt man Uran, das über 90 Prozent des Isotops  $^{235}\text{U}$  enthält.

- **Überkritische Masse:** Damit die Anzahl der Neutronen, die den Kernreaktor “ungenutzt” verlassen, gering gehalten wird, kann man natürlich auch die Gesamtmasse des Spaltmaterials erhöhen, um so das Verhältnis Oberfläche zu Volumen gering zu halten. Daraus ergibt sich eine kritische Masse. Wenn man Uran mit einer bestimmten Anreicherung in einer Menge zusammenpackt, die größer ist als die kritische Masse, so kommt eine Kettenreaktion zustande: die Zahl der Neutronen, die von einer Kernspaltung freigesetzt wird und eine weitere Kernspaltung initiiert ist größer als 1.

Man kann aber auch versuchen Neutronenverluste dadurch zu verringern, dass man die Oberfläche des Reaktors mit einem Material belegt, das Neutronen reflektiert.

- **Geeignete Moderatoren:** Ein wichtiger Bestandteil eines Reaktors ist ein geeigneter Moderator, durch den die schnellen Neutronen, die bei der Spaltung entstehen auf thermische Energien abgebremst werden, so dass der Wirkungsquerschnitt für die induzierte Kernspaltung erhöht wird. Ein üblicher Moderator ist gewöhnliches Wasser ( $\text{H}_2\text{O}$ ). Besonders die Streuung von den Neutronen an den gleichschweren Atomkernen des Wasserstoffs ( $\text{H}$ ) führt zu einem effektiven Energieübertrag von den Neutronen auf den Moderator. So ist die mittlere Weglänge, die ein Neutron in



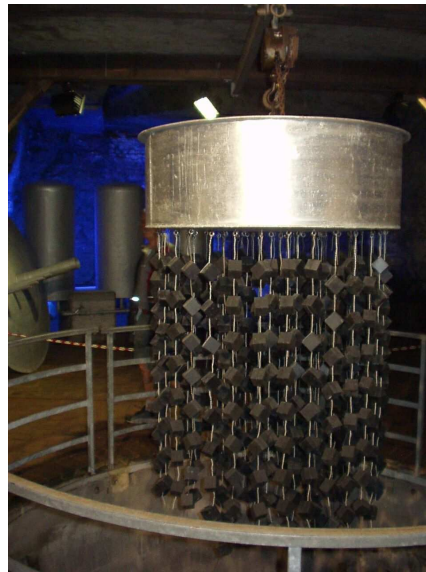


Abbildung 2.19: *Bild des Versuchsaufbaus in Haigerloch*

Wasser zurücklegt, bis es von einer Energie von etwa 1 MeV auf die thermische Energie abgebremst ist, etwa 5 cm. Ein Nachteil des Moderators normales oder leichtes Wasser ist der nicht unerhebliche Anteil der Neutronen, die durch Absorption am Proton ( $n + p \rightarrow d$  mit  $d$  dem Deuteron) für die Aufrechterhaltung der Spaltreaktion verloren gehen.

Deshalb empfiehlt sich die Nutzung von schwerem Wasser ( $D_2O$ , das ist Wasser bei dem die  $H$  Atome durch solche des Deuterons ersetzt sind) als Moderator. In schwerem Wasser ist zwar die mittlere Weglänge für die Abbremsung der Neutronen auf thermische Energien etwas größer, dafür ist aber die Absorptionsrate deutlich niedriger.

Alternativ zum Moderator Wasser wird auch Graphit als Moderator in Spaltreaktoren benutzt.

An dieser Stelle sollen kurz einige Reaktortypen vorgestellt werden. Als erstes wollen wir dabei auf einen Versuch der Reaktorentwicklung eingehen, der eine gewisse historische Bedeutung und auch einen lokalen Bezug zu Tübingen besitzt: der Versuch im **Haigerlocher Atomkeller** (siehe Abb. 2.19).

Nach der Entdeckung der neutroneninduzierten Kernspaltung im Jahre 1938, wurden während des 2. Weltkrieges mit mehr oder weniger großer Intensität Forschungsprojekte in Gang gesetzt, diese Energiequelle eventuell auch für militärische Zwecke zu nutzen. In Amerika wurde mit großem Aufwand im sogenannten **Manhattan Projekt** die Atom-bombe entwickelt. Parallel dazu gab es auch auf deutscher Seite eine Gruppe von Wissenschaftlern, die sich mit der Nutzung von Kernenergie beschäftigte. Diese Gruppe war am Kaiser Wilhelm Institut in Berlin angesiedelt, suchte aber, als die Luftangriffe auf Berlin eine effiziente Arbeit dort erschwerten, ein neues Domizil. Auf Vorschlag von W. Gerlach, der diesen Ort aus seiner Zeit in Tübingen kannte, wurden die Experimente in einem Felsenkeller des Gasthauses "Zum Schwan" in Haigerloch fortgeführt. Dieser Felskeller beherbergt heute ein kleines Museum.

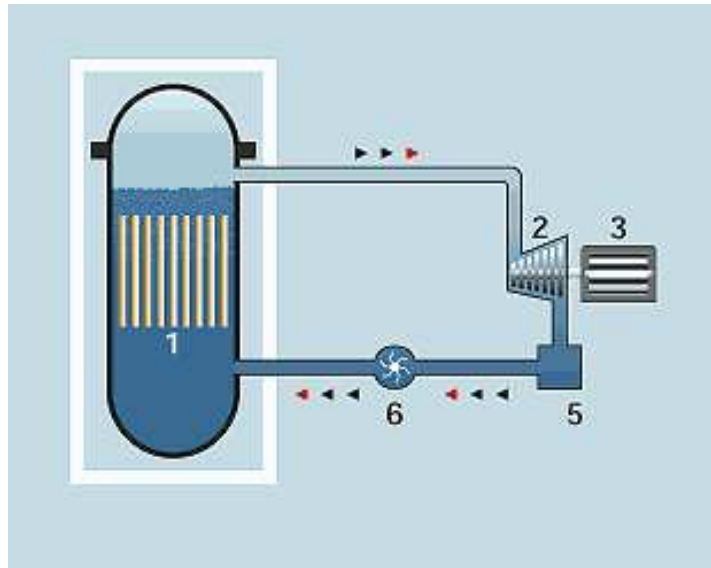


Abbildung 2.20: Schematische Darstellung eines Siedewasserreaktors

Im Zentrum dieses Museums steht eine Rekonstruktion des Versuchsaufbaus der Gruppe um W. Heisenberg. Ziel war die Erstellung eines Kernreaktors, der mit Natururan, also nicht angereichertem Uran arbeitete. Als Moderator wurde aus den oben dargestellten Gründen schweres Wasser eingesetzt. Die Abb. 2.19 zeigt den Aufbau des Reaktorkerns: die Klötze enthielten das Spaltmaterial, der Abstand der Klötze entspricht etwa der mittleren Weglänge für die Abbremsung der schnellen Neutronen im schweren Wasser. Man beobachtete eine signifikante Erhöhung der Neutronenzahl, wenn der Reaktor mit schwerem Wasser gefüllt wurde. Die Menge des zur Verfügung stehenden schweren Wassers reichte aber nicht aus, um den Reaktor kritisch werden zu lassen.

Im Einsatz als Kernkraftwerke benutzt man heute vor allen Dingen die sogenannten Leichtwasserreaktoren. Als nuklearer Brennstoff wird schwach angereichertes Uran benutzt. Wegen dieser Anreicherung kann man auf die Vorteile des schweren Wassers als Moderator verzichten und gewöhnliches Wasser nutzen. Als Beispiel ist ein Abb. 2.20 der Aufbau eines Siedewasserreaktors dargestellt. Das Spaltmaterial in Form von Uranoxid ist in den Brennstäben enthalten. Diese Brennstäbe werden vom Wasser umspült, das sowohl als Moderator dient als auch als Kühlmittel über das die bei der Kernspaltung freigesetzte Energie einer Dampfturbine zugeführt wird. Der Reaktor wird durch sogenannte Steuerstäbe geregelt. Das sind Stäbe aus einem Material z.B. Cadmium, welches Neutronen mit hohem Wirkungsgrad absorbiert. Durch das Einfahren der Steuerstäbe wird die Kettenreaktion unterbrochen.

Eine Modifikation des Siedewasserreaktors ist der sogenannte Druckwasserreaktor. Er besitzt zwei getrennte Kreisläufe. Das Wasser, welches die Brennstäbe als Moderator und Kühlmittel umspült, wird unter Druck (etwa 150 bar bei einer Temperatur bis zu 320 Grad Celsius) gehalten. Die Energie wird über einem Wärmetauscher einem zweiten Wasserkreislauf unter Normaldruck zugeführt.

Ein typisches Leichtwasserkraftwerk produziert eine Energieleistung von etwa 1 GW elektrischer Energie. Weltweit werden etwa 18 Prozent der elektrischen Energie durch Kern-

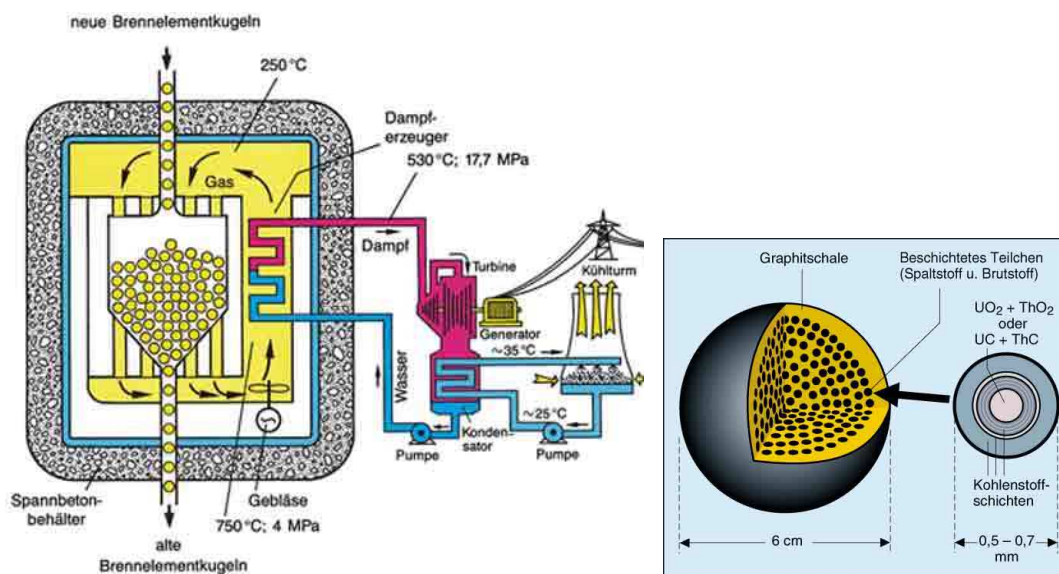


Abbildung 2.21: Schematische Darstellung Hochtemperatur Reaktors (links), Aufbau der Brennelemente (rechts)

kraftwerke bereit gestellt. In Deutschland sind es etwa 30 Prozent, in Frankreich 75 Prozent.

Eine anderer Reaktortyp, der in den siebziger und achtziger Jahren des letzten Jahrhunderts vor allen Dingen am Forschungszentrum in Jülich entwickelt wurde, ist der sogenannte **Hochtemperaturreaktor**. Ein Ziel dieser Reaktorlinie ist eine höhere Temperatur der Nutzwärme von etwa 800 bis 1100 Grad Celsius. Dadurch ergibt sich ein höherer Wirkungsgrad (siehe Carnot Prozess) für die Umwandlung von Wärmeenergie in mechanische Arbeit. Bei diesen hohen Temperaturen benutzt man nicht mehr Wasser als Kühlmittel sondern Helium Gas, das eine hohe Wärmekapazität hat und außerdem nicht zu Korrosionen führt. Als Moderator wird Graphit benutzt, das auch bei den hohen Temperaturen stabil ist. Die Brennelemente sind Graphitkugeln mit eingelagerten Kügelchen des Spaltmaterials (siehe rechter Teil der Abb. 2.21). Diese Brennelemente können kontinuierlich nachgefüllt und auch wieder abgeführt werden (siehe linker Teil der Abb. 2.21). Dadurch kann man den Inventar des spaltbaren Materials im Reaktorkern relativ klein halten. Dieses Reaktordesign besitzt eine inhärente Sicherheit, da die Brennelemente auch bei der maximal erreichbaren Temperatur nicht schmelzen. Außerdem kann dieser Reaktortyp auch in kleinen Einheiten (etwa 100 MW elektrische Leistung) gebaut werden.

Nach dem Bau eines Prototyps in Hamm Uentrop wurde die Entwicklung dieser Reaktorlinie in Deutschland nicht mehr weiter gefördert. Die Gründe dafür liegen sowohl in der allgemeinen Skepsis gegenüber der Kernkraft aber auch in der Tatsache, dass für diesen Reaktortyp ein alternatives System für den Brennstoffkreislauf hätte aufgebaut werden müssen. In den letzten Jahren wurde dieses Reaktorkonzept in Japan, China und Südafrika aufgegriffen.

Parallel zur Entwicklung des Hochtemperaturreaktors wurde in Deutschland auch ein sogenannter Brutreaktor entwickelt. Über die Reaktion (2.115) wird dabei aus dem direkt nicht nutzbarem Uran Isotop  $^{238}U$  das spaltbare  $^{239}Pu$  erbrütet. Die dabei entstehenden

den Neutronen sollten nicht auf thermische Energien gekühlt werden, sondern “schnell” bleiben; deshalb trug dieser Reaktortyp auch den Namen **Schneller Brüter**. Damit die Abbremsung nicht erfolgt, muss man ein anderes Kühlmittel als Wasser nehmen. Vorgelesen war dazu flüssiges Natrium bei einer Temperatur von etwa 400 Grad Celsius. Dieses Kühlmittel absorbiert keine Neutronen ist aber chemisch sehr aggressiv.

Vorteile dieses Reaktortyps sind die mögliche Ausnutzung des Isotops  $^{238}\text{U}$  und damit verbundene eine um den Faktor 100 verbesserte Nutzung des Natururans. Nachteile sind die bereits skizzierten Probleme mit der Handhabung des Kühlmittels Natrium und die notwendige Aufarbeitung des Brennstoffs. Wichtig ist auch eine sorgfältige Kontrolle des erzeugten Plutoniums, da es sich für den Einsatz in Kernwaffen eignet. In Deutschland wurde ein Brutreaktor in Kalkar gebaut, aber nicht in Betrieb genommen.

Zum Abschluss dieses Abschnittes soll kurz auf den Bau von Atombomben eingegangen werden, die auf der Kernspaltung basieren. Der Flaschenhals für den Bau solcher Bomben liegt in der Verfügbarkeit von spaltbarem Material in entsprechender Reinheit und Menge. Die kritische Menge für eine Plutoniumbombe beträgt etwa 10 kg Plutonium als Metall. Im Fall des Urans braucht man z.B. 52 kg Uran, das auf 93 % Anteil des  $^{235}\text{U}$  angereichert ist, um die für die Kettenreaktion kritische Masse zu erreichen. Hat man genügend Material zusammen, so zerlegt man diese Masse in Teile, die unterkritisch sind, Zur Zündung der Bombe reicht es, dass man diese Teile sehr schnell zur kritischen Masse zusammenfügt. Dies kann z.B. durch Auslösen einer konventionellen Sprengung geschehen.

## 2.8 Kernfusion

Aus der Diskussion der Bindungsenergien pro Nukleon im vorhergehenden Abschnitt wissen wir, dass man im Bereich der leichten Atomkerne Energie dadurch gewinnen kann, dass man zwei Atomkerne fusioniert. Dies gilt in besonderem Maße für Fusionsexperimente, die zum  $\alpha$ -Teilchen führen. Das  $\alpha$ -Teilchen also der Atomkern des  ${}^4\text{He}$  besteht aus zwei Protonen und zwei Neutronen, ist also ein doppelt magischer Kern zur magischen Zahl  $Z = N = 2$ . Dies erklärt die besonders hohe Bindungsenergie des  $\alpha$ -Teilchens von 7.07 MeV pro Nukleon, während etwa des Deuteron, bestehend aus einem Proton und einem Neutron nur eine Bindungsenergie von 1.1 MeV pro Nukleon besitzt (siehe Abb 2.16). Bei der Fusion von 2 Deuteronen zu einem  $\alpha$ -Teilchen würde also insgesamt eine Energie von etwa 24 MeV freigesetzt.

Diese Energiequelle der Kernfusion möchte man gerne im Fusionsreaktor nutzen. Die gleiche Energiequelle wird in der sogenannten Wasserstoffbombe genutzt, eine Waffe die vor etwa 50 Jahren entwickelt, aber zum Glück noch nie eingesetzt wurde. Schliesslich schöpft auch die Sonne ihre Energie aus solchen Fusionsreaktionen, eine Tatsache auf die wir im nächsten Abschnitt zur nuklearen Astrophysik noch zu sprechen kommen werden.

Mit welchen Problemen ist man konfrontiert, wenn man einen Fusionsreaktor realisieren möchte. Zur Beantwortung dieser Frage betrachten wir in einem ersten Schritt die Energie von 2 Deuteronen als Funktion ihres Abstandes  $R$  in der Skizze 2.22.

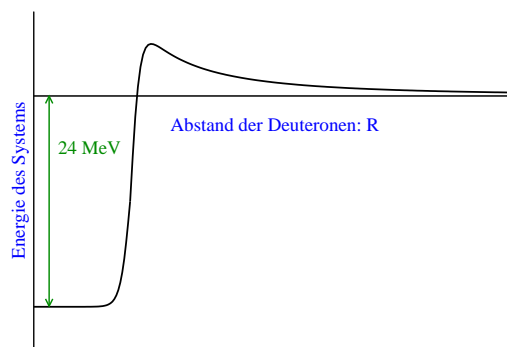


Abbildung 2.22: Energie von 2 Deuteronen als Funktion des Abstandes

Beim Abstand  $R = 0$  sind die Deuteronen fusioniert, und das System gewinnt daher die Fusionsenergie von 24 MeV im Vergleich zu den 2 völlig voneinander getrennten Deuteron Kernen. Wenn sich die Deuteronen aber aus großem Abstand annähern, so spüren sie zunächst einmal das abstossende Potenzial der Coulomb Wechselwirkung. Erst bei kurzem Abstand dominiert die attraktive Kernkraft, die zum Energiegewinn der Fusion führt.

Dieses Verhalten macht sich auch im Wirkungsquerschnitt für die Fusionsreaktion bemerkbar. Bei niedrigen Relativenergien der Deuteronen reicht die Energie nicht dazu aus, dass die Deuteronen den Berg der Coulomb Abstoßung überwinden. Die Fusion erfolgt nur über den Tunneleffekt. So steigt auch der Wirkungsquerschnitt dieser Fusionsreaktion nahezu exponentiell mit der Relativenergie an bis dieser Wirkungsquerschnitt ein Maximum bei einer Energie von etwa 100 keV erreicht. Bei höheren Energie sinkt der Wirkungsquer-

schnitt wieder. Bei diesen Energien laufen die Deuteronen aneinander vorbei und kommen so mit geringerer Wahrscheinlichkeit zur Fusion.

Der Wirkungsquerschnitt ist (im Vergleich zu  $d-d$ ) deutlich höher für die Fusionsreaktion von einem Deuteron  $d$  und einem Tritium Kern,  $t$ , das ist das Isotop des Wasserstoffs mit zwei Neutronen, also  ${}^3H$ ,



Der Energiegewinn ist mit 17.58 MeV nicht ganz so groß wie im Fall der Fusion von zwei Deuteronen, aber wegen des höheren Wirkungsquerschnittes dieser Reaktion, konzentriert man die Bemühungen um einen Fusionsreaktor auf diese Reaktion. Die freiwerdende Energie wird so aufgeteilt, dass das  $\alpha$ -Teilchen 3.52 MeV in Form von kinetischer Energie mitbekommt und das Neutron den Großteil mit 14.06 MeV wegträgt. Der Verlauf des Energie des  $d-t$  Systems als Funktion des Abstandes entspricht dem von zwei Deuteronen und damit ist auch die Energieabhängigkeit des Wirkungsquerschnittes so wie wir bereits diskutiert haben.

Damit der Wirkungsquerschnitt für die Fusion optimal ist, sollte man das Gas des Fusionsbrennstoffs auf eine Temperatur  $T$  aufheizen, so dass die mittlere thermische Energie eines Atoms der für die Fusionsreaktion optimalen Energie entspricht

$$\frac{3}{2}k_B T \approx 100 \text{ keV} \quad \rightarrow \quad T \approx 10^9 \text{ K}. \quad (2.117)$$

Bei diesen hohen Temperaturen verliert die Materie die für uns gewohnte Gestalt: die Atomkerne und die Elektronen sind nicht mehr zu neutralen Atomen gebunden. Atomkerne und Elektronen bewegen sich bei diesen hohen Temperaturen praktisch unabhängig voneinander, man spricht von einem Plasma aus Ionen und Elektronen. Man muss also ein Plasma aus  $d$  und  $t$  mit entsprechender Temperatur erzeugen, bevor man mit energieerzeugenden Fusionsreaktion rechnen kann.

Damit ein Reaktor wirtschaftlich genutzt werden kann, sollte die Energie, die z.B. zum Aufheizen des Plasmas investiert werden muss, kleiner sein als die Energie, die man aus dem Reaktor herausholt. Dies führt uns zum sogenannten Lawson Kriterium, wonach die Energiedichte die dem System entzogen werden kann,  $\varepsilon_o$ , größer sein soll, als die zugeführte Energiedichte  $\varepsilon_i$

$$\varepsilon_o > \varepsilon_i. \quad (2.118)$$

Die zuzuführende Energie wird vor allen Dingen benötigt, um das Plasma aufzuheizen. Betrachten wir ein Plasma mit der Ionendichte  $\tilde{n}$  bestehend aus positiv geladenen  $d$  und  $t$  Kernen, so ist der Energiedichte des Plasmas aus Ionen plus Elektronen gegeben durch

$$\varepsilon_i = 2\frac{3}{2}\tilde{n}k_B T. \quad (2.119)$$

Der Faktor 2 berücksichtigt, dass das Gas der Ionen und der Elektronen auf die gleiche Temperatur  $T$  aufgeheizt werden muss. Die gewinnbare Energiedichte besteht natürlich einmal aus der gewonnenen Fusionsenergiedichte

$$\varepsilon_{\text{Fusion}} = \frac{\tilde{n}^2}{4} \langle \sigma(T)v \rangle_T E_F \tau. \quad (2.120)$$

Dabei kann man davon ausgehen, dass bei jeder erfolgreichen Fusion die Energie  $E_F$  von 17.58 MeV (siehe (2.116)) frei wird. Die Zahl der Fusionsreaktionen ist gegeben durch die Dichte der  $d-t$  Paare also gleich dem Quadrat von  $\tilde{n}/2$  (wenn man annimmt, dass die Dichte der beiden Isotope gleich ist) multipliziert mit dem gemittelten Produkt aus dem Wirkungsquerschnitt  $\sigma(T)$  für die Fusion und den Relativgeschwindigkeiten der Reaktionspartner  $v$  bei der gegebenen Temperatur  $T$ . Der Energiegewinn ist dann aber auch proportional zur Einschlußzeit  $\tau$ , das ist die Zeitspanne für die es uns gelingt, das Plasma bei der Temperatur  $T$  und der Dichte  $\tilde{n}$  einzuschließen, so dass die Fusionsreaktion vonstatten gehen kann.

Außerdem kann man natürlich am Ende des Fusionszyklus auch wieder versuchen die eingesetzte Energiedichte  $\varepsilon_i$  wieder zurückzugewinnen. Allerdings wird die theoretisch zur Verfügung stehende Energiedichte  $\varepsilon_{\text{Fusion}} + \varepsilon_i$  nur mit einem gewissen Wirkungsgrad  $\eta$  nutzbar sein, so dass

$$\varepsilon_o = \eta \left[ \varepsilon_{\text{Fusion}} + \varepsilon_i \right]. \quad (2.121)$$

Setzt man diese Ausdrücke für  $\varepsilon_i$  und  $\varepsilon_o$  in das Lawson Kriterium ein, so ergibt sich

$$\frac{\tilde{n}^2}{4} \langle \sigma(T)v \rangle_T E_F \tau > 3\tilde{n}k_B T \left( \frac{1}{\eta} - 1 \right), \quad (2.122)$$

beziehungsweise

$$\tilde{n}\tau > \frac{12}{\langle \sigma(T)v \rangle_T E_F} k_B T \left( \frac{1}{\eta} - 1 \right). \quad (2.123)$$

Das Produkt aus Ionendichte  $\tilde{n}$  und Einschlußzeit  $\tau$  bezeichnet man als Einschlußparameter. Nach dem Lawson Kriterium muss dieser Einschlußparameter also größer sein als die rechte Seite von (2.123), die eine Funktion der Temperatur  $T$  ist. Setzt man auf dieser rechten Seite für  $E_F$  die gesamte Energie, die pro Fusion frei wird, ein, also  $E_F = 17.58$  MeV, so bezeichnet die Erfüllung des Lawson Kriteriums den sogenannten "Break Even" Punkt, an dem der Energiegewinn gerade gleich null ist. Setzt man für  $E_F$  den Teil der Fusionsenergie ein, der bei jeder Fusionsreaktion zum Nachheizen des Plasmas genutzt werden kann, das ist gerade die Energie  $E_F$  von 3.52 MeV, die auf das  $\alpha$ -Teilchen übertragen wird, so bezeichnet (2.123) die Zündbedingung für das Plasma. Dabei geht man davon aus, dass bei Erreichen dieser Bedingung die Energie des geladenen  $\alpha$ -Teilchens im Plasma verbleibt und dieses nachheizt also mit Erfüllung der Bedingung (2.123) trägt sich die Energie des Plasmas selbst, wie bei einem einmal gezündeten Feuer. Die Energie des Neutrons ist in der Regel für die Plasmaheizung verloren, da das ungeladene Neutron das Plasma verlässt. Die Energie des Neutrons wird außerhalb des Plasmas abgefangen und in Nutzenergie umgewandelt.

In der Abb. 2.23 sind Werte für Temperatur und Einschlußparameter aufgezeigt, die in verschiedenen Experimenten erzielt worden sind. Zum Vergleich ist auch der Bereich angegeben, den man für einen energieproduzierenden Fusionsreaktor erreichen möchte. Die erreichten Punkte unterscheiden sich in der Farbe, je nach dem Jahr, in dem die Ergebnisse erzielt wurden. Außerdem unterscheiden sich die Symbole in der Form: Kreise bezeichnen Experimente bei denen das Plasma durch ein Magnetfeld gehalten wird, Dreiecke ("inertial confinement") solche bei denen die Dichten durch Implosion von kleinen Kugeln mit Fusionsmaterial erzielt wurden. Im folgenden werden wir diese Möglichkeiten etwas genauer betrachten.

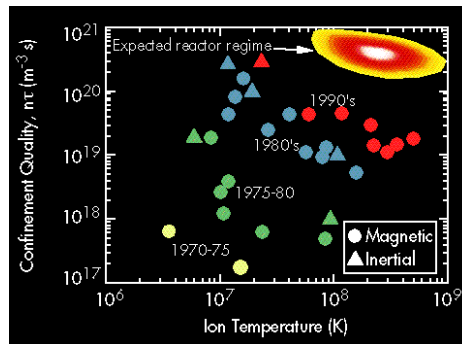


Abbildung 2.23: Darstellung des Lawson Kriteriums und bisher erreichte Werte für den Einschlussparameter in (2.123), weitere Erläuterungen im Text

Es ist sicher jedem klar, dass man ein Plasma mit einer Temperatur von 100 Millionen K nicht einfach in eine Plastiktüte oder auch einem Gefäß aus irgend einem anderen Material zusammenhalten kann. Eine Möglichkeit, ein solches Plasma aus geladenen Teilchen zu kontrollieren, bietet die Wechselwirkungen dieser Ladungen mit einem Magnetfeld über die Lorentzkraft. Bei der Diskussion der Lorentzkraft haben wir gesehen, dass sich geladene Teilchen in einem homogenen Magnetfeld frei in Richtung der Magnetfeldlinien bewegen. Bei Bewegungsrichtungen senkrecht zu den Magnetfeldlinien werden sie durch die Lorentzkraft auf eine Kreisbahn um die Feldlinien abgelenkt. Ist das Magnetfeld sehr stark, so ist der Radius dieser Kreisbahn sehr klein, man hat also praktisch eine Bewegung ausschliesslich in Richtung parallel zu den Magnetfeldlinien.

Wenn man sich nun in einem nächsten Schritt vorstellt, dass man einen Zylinder mit einem solchen homogenen Magnetfeld zu einem Kreis, bzw. Torus, zusammenfügt, so erhält man eine Magnetfeldkonfiguration, bei der sich die Ionen in erster Näherung auf diesen Kreisbahnen parallel zu den Magnetfeldlinien bewegen. Ein solches Magnetfeld erzielt man dadurch, dass man kreisförmige Spulen um den Zylinder aufbaut und diese Spulen dann wiederum in einem Kreis aufbaut (siehe Hauptfeldspulen in der Abb. 2.24). Ein solches toroidales Magnetfeld hat allerdings den kleinen Schönheitsfehler, dass das Magnetfeld nicht ganz homogen ist. An der äußeren Wand des Torus ist es schwächer als der Innenkante. Dies hat zur Folge, dass die Ionen die Tendenz haben nach außen zu driften, und so dem Einschluss durch das Magnetfeld entkommen.

Diese Driftbewegung kann man dadurch kompensieren, dass man dem toroidalen Magnetfeld eine kreisförmige Komponente überlagert mit dem Zentrum dieses Kreises in der Mitte des torusförmigen Schlauches (siehe Abb. 2.24). Die Überlagerung von toroidalem und kreisförmigem Magnetfeld führt zu schraubenförmigen (helikalen) Feldlinien. Ein Ion, das sich am äußeren Rand des Torus bewegt wird also durch diese Feldlinien wieder auf den inneren Rand des Torus gelenkt und verbleibt so im Torus.

Die kreisförmige Magnetfeldkomponente erreicht man durch einen Strom der Plasmaionen entlang des Torus. Dieser Strom kann von außen induziert werden durch eine Konstruktion wie bei einem Transformator. Dazu baut man einen Eisenjoch wickelt um einen Teil eine Spule, die Primärspule des Transformators, durch die ein ansteigender Magnetfluß in den Eisenkern induziert wird. Der Torus bildet dann die Sekundärspule des Transformators, in die dann der Ionenstrom induziert wird (siehe Abb. 2.24). Der in das Plasma induzierte



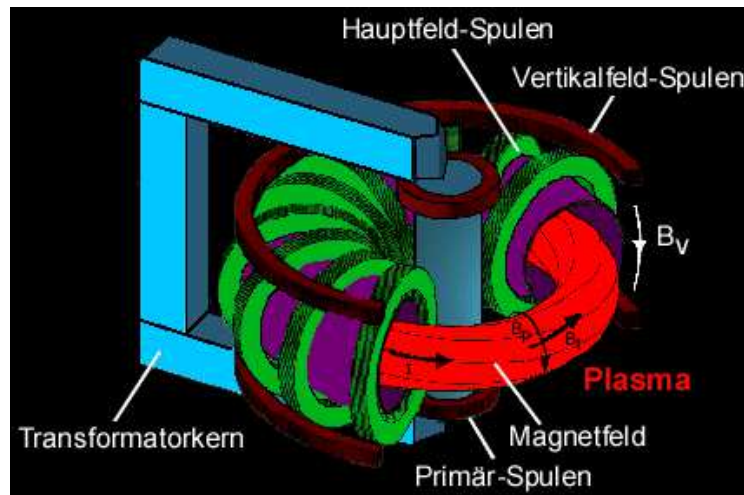


Abbildung 2.24: Skizze zum Magnetfeld eines Tokamaks

Strom übernimmt dabei eine doppelte Funktion: Einmal wird dadurch die gewünschte helikale Magnetfeldstruktur erzeugt. Zum zweiten dient dieser induzierte Strom aber auch zur Heizung des Plasmas.

In der Praxis hat man nicht nur einen Eisenjoch sondern mehrere, wie das in der Abb. 2.25 zum Ausdruck kommt. Man spricht dabei von der Realisierung des magnetischen Plasmaeinschlusses nach dem **Tokamak Prinzip**. Die Abbildung entspricht einer Konstruktionszeichnung des JET (Joint European Torus) Projekts, das von vielen europäischen Staaten finanziert wird und seit Beginn der 1990 Jahre in Culham (Großbritannien) betrieben wird. Einen Einblick in das Innere dieses JET Torus bietet die Abb. 2.26.

Als Alternative zum Tokamak Prinzip werden auch andere Magnetfeld Konfigurationen entwickelt, die das Fusionsplasma stabil erfassen. Das sogenannte **Stellarator Prinzip** bezeichnet ein kompliziert verdrilltes toroidales Magnetfeld. Entsprechende Entwicklungen gibt es z.B. am Max-Planck Institut für Plasmaphysik in Garching mit dem sogenannten Wendelstein Projekt. Eine Weiterentwicklung, das Projekt W7-X in Greifswald befindet sich noch im Bau. In diesem Fall erfolgt die Aufheizung des Plasmas vor allen Dingen durch den Einschuss neutraler Teilchen.

Man versucht aber auch die Fusionsbedingungen durch einen **Trägheitseinschluss**, das sogenannte "inertial confinement", des Plasmas zu erreichen. In diesem Fall wird eine kleine Kapsel, die im Inneren  $d$  und  $t$  Atome enthält, von möglichst vielen Seiten mit hochenergetischen Laser- oder Teilchenstrahlen bombardiert. Bei geschickter Wahl der Kapselhülle wird dieses durch die Strahlung so aufgeheizt, dass unter Absprengung der äußeren Schale das Innere der Kapsel zu so hohen Dichten und Temperaturen implodiert, dass die Fusionsreaktion gezündet wird. Das Plasma wird dabei nur durch seine Trägheit komprimiert. In der Experimentierphase werden zur Zündung des Plasmas häufig Laserstrahlen benutzt, wie z.B. bei der "National Ignition Facility", die zur Zeit in den USA gebaut wird, bei der 192 Laserstrahlen auf eine Kapsel fokussiert werden und dabei 1.8 MJ an Energie abgeben sollen. Für einen Reaktor sind Laser jedoch ungeeignet, da sie sehr ineffizient in der Energieumwandlung sind. Hier wäre der Einsatz von Teilchenstrahlen günstiger.

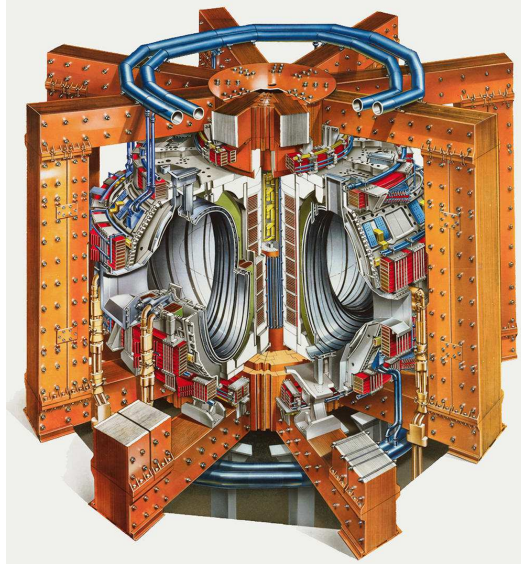


Abbildung 2.25: Konstruktionszeichnung des JET Projektes

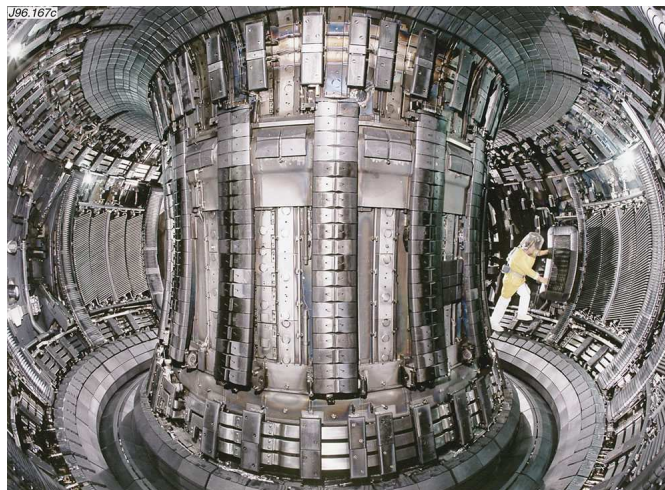


Abbildung 2.26: Blick in das Innere des JET (Joint European Torus) in Culham, England

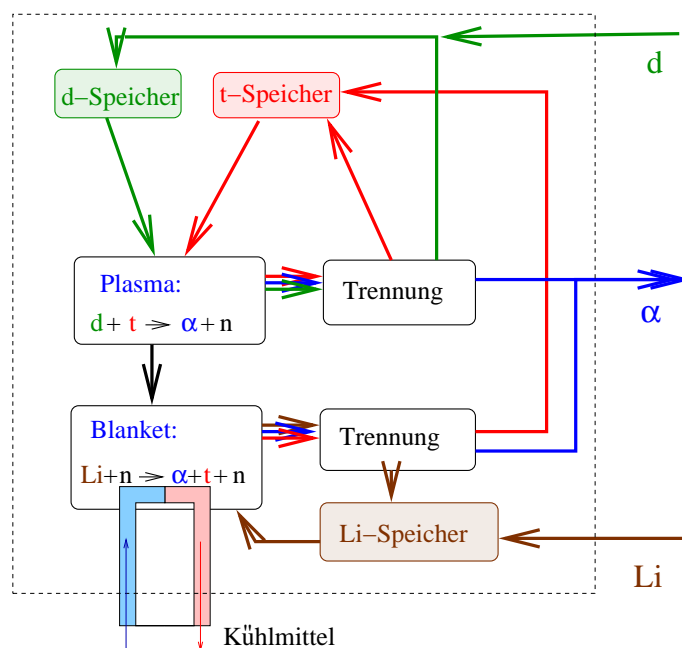


Abbildung 2.27: Schematischer Aufbau einer Fusionsreaktoranlage

Auch die Wasserstoffbombe funktioniert im Prinzip nach dem Prinzip des Trägheitseinschlusses. In diesem Fall sind aber die Mengen an Fusionsmaterial größer und die Zündung erfolgt durch eine “gewöhnliche Atombombe”, die auf der Kernspaltung basiert. Mit der Zündung der Fusionsreaktion allein hat man aber noch keinen funktionierenden Fusionsreaktor. Insbesondere fehlt uns noch der Brennstoff. Zwar gibt es Deuterone,  $d$ , im Überfluss z.B. in der Form von schwerem Wasser. Das Wasserstoffisotop mit der Massenzahl 3, das Tritium ( $t$ ) aber ist instabil gegenüber  $\beta$  Zerfall mit einer Halbwertszeit von 12,3 Jahren. Es existiert deshalb in natürlicher Form nicht und man wird es ständig erzeugen müssen.

Dieser Vorgang ist im schematischen Aufbau einer Fusionsreaktoranlage in der Abb. 2.27 dargestellt. Herzstück dieser Anlage ist natürlich einerseits das Plasma, also entweder ein Torus mit Magnetfedeinschluss oder Kapseln mit dem Trägheitseinschluss. Diesem Plasma werden Deuterium und Tritium aus den entsprechenden Speichern zugeführt. Dort findet die Fusionsreaktion nach (2.116) statt. Die Abfallprodukte,  $\alpha$ -Teilchen und noch nicht verbrauchtes Deuterium und Tritium werden hin und wieder aus dem Plasmabereich entfernt und in einer Trennungsanlage in die Komponenten  $\alpha$ ,  $d$  und  $t$  separiert. Deuterium und Tritium werden wieder den Speichern zugeführt, das  $\alpha$ , bzw. die daraus entstandenen Helium Atome können problemlos entsorgt werden.

Die bei der Fusionsreaktion entstandenen Neutronen tragen den Großteil der erzeugten Energie und werden, da sie elektrisch neutral sind, nicht durch das Magnetfeld beim magnetischen Einschluss festgehalten, sie entweichen in die Hülle des Torus, dem sogenannten Blanket. Dieses Blanket ist das zweite Herzstück der Fusionsanlage. In ihm sollen nämlich die Reaktionen stattfinden, die den Brennstoff Tritium erzeugen. Dafür benutzt man die Kernreaktionen





Bei der zweiten dieser Reaktionen kann das entstandene Neutron eine weitere Reaktion dieses Typus einleiten. So ist gewährleistet, dass für jedes in der Fusionsreaktion erzeugte Neutron theoretisch auch mehr als ein Tritium über die Brutreaktionen (2.124) erzeugen kann. In der Praxis wird natürlich ein Teil der in der Fusion erzeugten Neutronen auch durch andere Materialien als die Lithium Isotope absorbiert werden. Durch die zweite der Brutreaktionen in (2.124) kann man erreichen, dass im Blanket genau so viel Tritium erzeugt wird, wie man für die Aufrechterhaltung des Betriebs benötigt.

Der Mantel des Plasmas, also das Blanket, muss natürlich auch noch zur Abfuhr der Energie dienen. Als Kühlmittel denkt man an Helium Gas, das z.B. mit einer Temperatur von 260 Grad Celsius im Kühlkreislauf dem Blanket zugeführt werden kann um dann im Blanket auf etwa 700 Grad Celsius aufgeheizt zu werden.

In der Abb. 2.27 ist der gesamte Aufbau der Fusionsanlage durch eine gestrichelte Linie zusammengefasst. Man sieht also, dass man neben dem Kühlkreislauf von außen lediglich Deuterium und Lithium als Brennstoff zuführen muss. Abfallprodukt ist in diesem idealisierten Schema lediglich das produzierte Helium.

Reaktorstudien für den Fusionsreaktor ergeben, dass die Nutzung der Kernfusion als Quelle für die Energieerzeugung ökonomisch durchaus sinnvoll sein könnte. Solche Abschätzungen muss man natürlich mit großer Vorsicht betrachten, da ja noch nicht einmal geklärt ist, welcher Aufwand erforderlich ist, um die einzelnen Komponenten des Systems zu erstellen. Neben den Problemen zur Erzeugung eines Plasmas, in dem die Fusionsreaktion zündet, stellt sich insbesondere die Frage, ob man den Reaktormantel so gestalten kann, dass in ausreichender Menge Tritium erbrütet wird. Außerdem stellt sich z.B. auch die Frage, ob es Materialien für den Aufbau des Reaktormantels gibt, die auch bei den hohen Neutronenflüssen, die ja zwangsläufig auftreten, über lange Zeit mechanisch stabil sind.

Zum Abschluss noch einige Anmerkungen zum Thema Reaktorsicherheit und zu Problemen des radioaktiven Abfalls beim Fusionsreaktor:

- Im Vergleich zu einem konventionellen Spaltreaktor, bei dem es etwa bedingt durch einen vollständigen Ausfall des Kühlsystems zu einer Kernschmelze kommen kann verbunden mit einer unkontrollierbaren Freisetzung von Energie, kann man entsprechende Leistungsexkursionen beim Fusionsreaktor ausschliessen.
- Bei der Kernspaltung entstehen Fragmente, die in der Regel radioaktiv sind, zum Teil mit sehr langen Halbwertszeiten. Dies führt zu den bekannten Entsorgungsproblemen für den radioaktiven Abfall. Das direkte Abfallprodukt der Kernfusion, das  ${}^4\text{He}$  Isotop ist dagegen unbedenklich.
- Die radioaktive Gefährdung im laufenden Betrieb ergibt sich vor allen Dingen durch das Tritium, das ja mit einer Halbwertszeit 12.3 Jahren durch  $\beta$  Zerfall radioaktiv ist. Diese Gefährdung wird dadurch verschärft, dass Wasserstoff sehr leicht flüchtig ist. Deshalb wird man auch versuchen, die Brutreaktion für Tritium, die Verarbeitung und schliesslich die Fusionsreaktion möglichst an einem Ort ablaufen zu lassen. Reaktorstudien gehen von einem Tritium Inventar von etwa 3 kg für eine solche Gesamtanlage aus. Davon werden täglich etwa 500 g durch die Kernfusion verbrannt

und müssen wieder erbrütet werden. Im Normalbetrieb rechnet man mit etwa 2 g Tritium, die pro Jahr aus einer Anlage durch Leckage und Diffusion entweichen.

- Die beim radioaktiven Zerfall von Tritium freigesetzten Elektronen haben eine maximale Energie von 18 keV. In organischer Materie ist deren Reichweite wenige Mikrometer. Als umgebendes Gas stellt es daher für den Menschen keine Bedrohung dar, da die hornartigen, äusseren Hautschichten um ein Vielfaches dicker sind. Doch kann Tritium beispielsweise als Wasser in den Körper aufgenommen werden und hat dort eine effektive Verweilzeit von etwa 11 Tagen. Am Betriebszaun eines Fusionsreaktors beträgt dann die Strahlendosis der Bevölkerung etwa 1 % des zivilisatorischen Durchschnittswertes von etwa 2 mSv/Jahr im Normalbetrieb.
- Wegen der relativ kurzen Halbwertszeit besitzt Tritium natürlich eine hohe Aktivität. Andererseits hat diese Halbwertszeit natürlich auch zur Folge, dass diese Aktivität relativ rasch abklingt. Die langfristigen Probleme des radioaktiven Abfalls entstehen deshalb auch nicht durch das Tritium sondern durch die Aktivierung der Baumaterialien. Durch den ständigen Neutronenfluß durch den Mantel des Reaktors werden diese Materialien belastet. Ziel ist es die Baumaterialien so zu optimieren, dass sie einerseits wenig aktiviert werden, andererseits aber auch nicht zu schnell durch Versprödung brüchig werden.

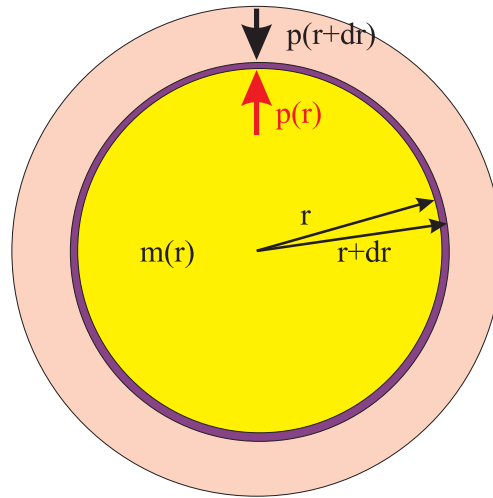


Abbildung 2.28: Kräfte auf ein Volumenelement in der Schale  $[r, r + dr]$  eines Sterns

## 2.9 Nukleare Astrophysik

Im vorhergehenden Abschnitt wurden die verschiedenen Möglichkeiten vorgestellt, wie man unter irdischen Bedingungen ein Plasma einschliessen kann, so dass in Fusionsreaktionen Energie erzeugt wird. In den Sternen hält sich das Plasma praktisch selbst zusammen, es ist die Gravitation, die die hohen Plamadichten ermöglicht. Zur näheren Erläuterung wollen wir uns in diesem Abschnitt zunächst das Kräftegleichgewicht in einem Stern oder auch in einem anderen kugelsymmetrischen Objekt, das durch die Gravitation zusammengehalten wird, vor Augen führen.

Dazu betrachten wir die schematische Darstellung der Abb. 2.28, und die Kräfte, die auf ein Volumenelement der stellaren Materie in der Kugelschale mit dem Abstand  $r$  vom Zentrum des Sterns. Das Volumenelement habe die Größe  $dV = df dr$  und enthält damit eine Masse

$$dm = \rho(r) dV = \rho(r) df dr, \quad (2.125)$$

mit  $\rho(r)$  für die Massendichte im Abstand  $r$  vom Zentrum. Auf dieses Massenelement wirkt zum einen die Gravitationskraft

$$\vec{K}_{\text{Grav}} = -\frac{G M(r) dm}{r^2} \hat{e}_r, \quad (2.126)$$

in Richtung auf das stellare Zentrum also in Richtung  $-\hat{e}_r$ . Die Kraft gleicht der Kraft, die auf die von einer Masse  $M(r)$  im Zentrum auf die Masse  $dm$  im Abstand  $r$  ausgeübt wird (siehe Physik I), wobei  $M(r)$  der Anteil der stellaren Masse ist, der sich ausgehend vom Zentrum bis zur Kugelschale mit Radius  $r$  angesammelt hat und  $G$  für die Gravitationskonstante steht.

Andererseits wirkt auf das Massenelement  $dm$  aber auch der Druck durch die umgebende Materie. Der Druck der innenliegenden Materie,  $P(r)$  versucht das Volumenelement nach außen zu drücken, während der Druck der außenliegenden Materie,  $P(r + dr)$ , eine Ge-

genkraft ( $K = P df$ ) nach innen aufbaut. Insgesamt liefern die Druckkräfte also

$$\vec{K}_{\text{Grav}} = \underbrace{(P(r) - P(r + dr))}_{=dP} df \hat{e}_r. \quad (2.127)$$

Im stationären Gleichgewicht kompensieren sich die Beiträge der verschiedenen Kräfte und es gilt

$$dP df = -\frac{G M(r)\rho(r)}{r^2} dr df,$$

was sich umformen lässt in

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dr} &= \frac{dP}{d\rho} \frac{d\rho}{dr} \\ &= -\frac{G M(r)\rho(r)}{r^2}. \end{aligned} \quad (2.128)$$

Dabei haben wir angenommen, dass der Druck nur von der Dichte abhängt, so dass die Anwendung der Kettenregel in der ersten Zeile gerechtfertigt ist. Die Information über die Eigenschaften der Materie sind in der sogenannten Zustandsgleichung der Materie  $P(\rho)$  enthalten geht über die Ableitung in (2.128) ein.

Wenn wir die Zustandsgleichung als bekannt voraussetzen können, ist es sinnvoll, (2.128) umzuschreiben auf die Form

$$\frac{d\rho}{dr} = -\frac{G M(r)\rho(r)}{r^2} \frac{1}{\frac{dP}{d\rho}}. \quad (2.129)$$

Außerdem führen wir uns vor Augen, dass die Masse  $M(r)$  sich vergrößert, wenn das Argument  $r$  um das infinitesimale Stück  $dr$  anwächst und zwar gerade um die Masse  $dM$ , die in der Kugelschale beim Radius  $r$  enthalten ist:

$$dM = M(r + dr) - M(r) = \rho(r) 4\pi r^2 dr,$$

was uns auf die Differenzialgleichung

$$\frac{dM}{dr} = \rho(r) 4\pi r^2, \quad (2.130)$$

führt. Die beiden Differenzialgleichungen (2.129) und (2.130) sind zwei gekoppelte Differenzialgleichungen erster Ordnung zur Bestimmung der unbekannt Funktionen  $M(r)$  und  $\rho(r)$ . Gibt man als Randbedingung dieser Differenzialgleichungen etwa die Werte dieser Funktionen bei  $r = 0$  vor, so kann man diese Gleichungen z.B. mit numerischen Methoden integrieren und erhält die gesuchten Funktionen für beliebige Werte von  $r$ . Der Startwert  $M(r = 0)$  ist dabei eindeutig vorgegeben, da ja die Masse im Kugelvolumen mit dem Radius  $r = 0$  identisch null sein muss. Wir können also nur einen Startwert für die Dichte  $\rho(0)$  frei vorgeben und können dann die Differenzialgleichungen integrieren.

Das Ergebnis einer solchen Rechnung sind in der Abb. 2.29 dargestellt. Details der Rechnung, wie die Art der benutzten Zustandsgleichung, werden wir zu einem späteren Zeitpunkt diskutieren. Man erkennt an dieser Darstellung, dass die Dichte mit zunehmendem  $r$  abnimmt, bis sie schliesslich den Wert 0 erreicht. Dieser Wert bezeichnet den Radius

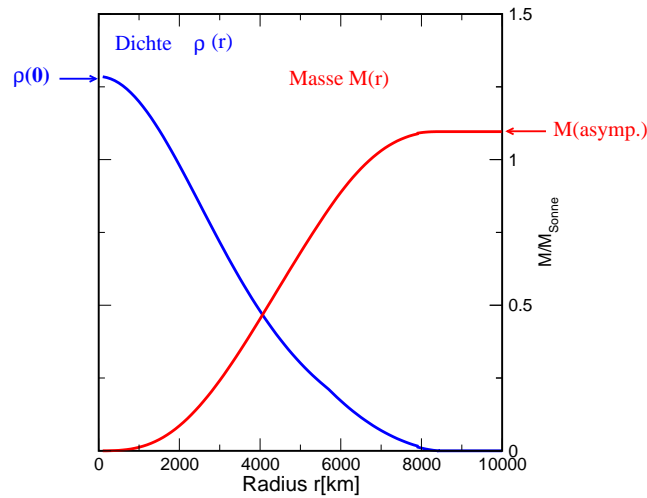


Abbildung 2.29: Ergebnisse der Integration der Gleichungen (2.129) und (2.130). Der Startwert für  $\rho(0)$  und die Zustandsgleichung wurden so gewählt, dass die Ergebnisse einen Weissen Zwerg simulieren mit einer Masse von etwa 1.1 mal der Sonnemasse und einem Radius von cirka 8000 km.

des Sterns. In der gleichen Figur sind auch die Ergebnisse die Masse  $M(r)$  aufgetragen. Diese Massenfunktion wächst an bis zum Radius  $R$  und erreicht dort die Gesamtmasse des Sterns. Für  $r > R$  bleibt  $M(r)$  konstant, da in diesem Bereich die Massendichte  $\rho$  identisch null ist.

Der zur Lösung für diese Differentialgleichung notwendige physikalische Input steckt in der Zustandsgleichung  $P(\rho)$ . Als einfaches Beispiel für eine Zustandsgleichung sei an dieser Stelle an die Zustandsgleichung eines idealen Gases, also von  $N$  Atomen in einem Volumen  $V$  und bei einer Temperatur  $T$  bei denen die Wechselwirkung der Atome vernachlässigt werden kann:

$$\begin{aligned} PV &= N k_B T \\ P &= k_B T \frac{N}{V} = k_B T \frac{\rho}{m}, \end{aligned} \quad (2.131)$$

wobei  $m$  für die Masse eines einzelnen Atoms steht. Wäre also die Temperatur in einem Stern konstant und außerdem die Näherung des idealen Gases akzeptabel, so hätten wir mit (2.131) eine einfache Form der Zustandsgleichung  $P(\rho)$ , mit der man die Differentialgleichungen (2.129) und (2.130) integrieren kann. Die Temperatur ist aber keine Konstante im Volumen des Sterns, sie ist groß im Sterninneren, wo Energie durch die Kernfusion erzeugt wird und sie nimmt zur Oberfläche hin ab. Bei der Simulation von aktiven Sternen müssen also die Differentialgleichungen für  $M(r)$  und  $\rho(r)$  webigstens erweitert werden um eine für  $T(r)$ , in die die Art der Energieerzeugung und der Transport der Energie eingehen.

An dieser Stelle wollen wir deshalb zunächst die Prozesse diskutieren, die in unserer Sonne und in anderen sogenannten **Sternen der Hauptreihe** zur Energieerzeugung ablaufen. Dies sind Ketten von Reaktionen, die je nach den Rahmenbedingungen eine mehr oder weniger große Rolle spielen. Die im vorhergehenden Abschnitt diskutierten Fusionsprozesse  $d + d$  oder  $d + t$  spielen dabei keine Rolle, da die Tritium und Deuterondichte so



9				14F	15F	16F	17F	18F	19F
				P	1.0 MeV P	40 KeV P	64.49 s ε	109.77 M ε	STABLE 100%
7			12O	13O	14O	15O	16O	17O	18O
			0.40 MeV P	8.58 MS ε	70.606 s ε	122.24 s ε	STABLE 99.762%	STABLE 0.038%	STABLE 0.200%
5		10N	11N	12N	13N	14N	15N	16N	17N
		P	1.58 MeV P	11.000 MS ε	9.965 M ε	STABLE 99.634%	STABLE 0.366%	β- 7.13 s	β- 4.173 s
	8C	9C	10C	11C	12C	13C	14C	15C	16C
	230 KeV P	126.5 MS ε	19.26 s ε	20.39 M ε	STABLE 98.89%	STABLE 1.11%	β- 5700 Y	β- 2.449 s	β- 0.747 s
	7B	8B	9B	10B	11B	12B	13B	14B	15B
	1.4 MeV P	770 MS ε	0.54 KeV P	STABLE 19.8%	STABLE 80.2%	β- 20.20 MS	β- 17.33 MS	β- 12.5 MS	β- 9.93 MS
	2	4	6	8	10				

Abbildung 2.30: Stabilität und Halbwertszeiten der Isotope des CNO Zyklus

gering ist, dass Fusionsprozesse dieser Partner vernachlässigbar sind.

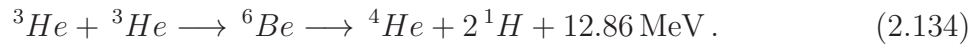
Als erstes diskutieren wir den sogenannten *pp* Prozess, zu dem ausschliesslich Protonen also Kerne des einfachen Wasserstoffisotops  $^1H$  herangezogen werden. In einem ersten Schritt fusionieren zwei Protonen und bilden über den  $\beta^+$  Zerfall ein Deuteron



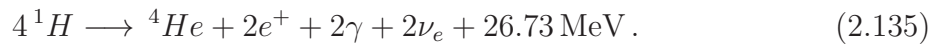
Von der dabei freigesetzten Energie von 1.44 MeV trägt das Neutrino,  $\nu_e$  typischerweise 0.25 MeV. Das so gebildete Deuteron,  $^2H$ , kann mit einem weiteren Proton zum Helium Isotop  $^3He$  fusionieren



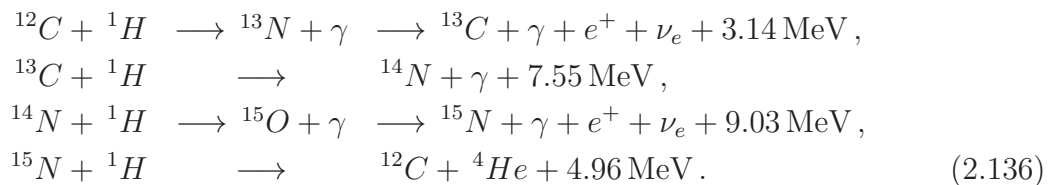
Die so gebildeten Helium Isotope sind stabil und fusionieren schliesslich in der Kette



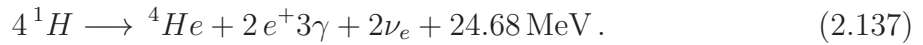
Multipliziert man die Reaktionen (2.132) und (2.133) mit einem Faktor 2 und addiert alle Reaktionen dieser Kette auf, so ergibt sich die Bilanz



Ein anderer Zyklus, der sogenannte CNO oder Bethe-Weizsäcker Zyklus, wird ermöglicht, wenn im Stern Spuren des Isotops  $^{12}C$  vorhanden sind. Diese Atomkerne des  $^{12}C$  spielen dabei quasi die Rolle eines Katalysators, der bei dem Prozess nicht verbraucht wird. Die einzelnen Schritte dieses CNO Zyklus werden gebildet durch (beachte auch die Halbwertszeit der entstehenden Nuklide in Abb. 2.30)



Bilanziert man diese Glieder der Kette, so ergibt sich insgesamt



Daneben gibt es noch andere Kernreaktionen, die mehr oder weniger wichtige Rollen bei den Fusionsprozessen in der Sonne und anderen Sternen spielen.

Neben der Energie entstehen sowohl im  $pp$  als auch im CNO Zyklus Neutrinos mit ganz charakteristischen Energieverteilungen. Die Wechselwirkung dieser Neutrinos mit der Materie ist so schwach, dass der überwiegende Anteil die Sonne ohne eine weitere Wechselwirkung verlassen wird. Daher sind die Neutrinos eine ideale Sonde, um direkt Information über die Fusionsreaktionen zu erhalten. Der Nachteil dieser Sonde ist allerdings genau diese schwache Wechselwirkung. Ein Neutrino, das die Sonne ohne Wechselwirkung durchquert, wird in der Regel auch die Erde ohne jede Wechselwirkung durchlaufen. Wie soll man ein solches Teilchen in einem Detektor einfangen?

Obwohl diese Aufgabe naturgemäß sehr schwierig ist, hat man inzwischen gelernt Detektoren für Neutrinos zu bauen. Einer der ersten Neutrino Detektoren ist mit der Elektroneneinfang Reaktion des  $^{37}\text{Ar}$  verknüpft



die für die Halbwertszeit des  $^{37}\text{Ar}$  Isotops von etwa 35 Tagen verantwortlich ist. Hat man ausreichend Neutrinos mit einer Mindestenergie von 0.8 MeV zur Verfügung, so verläuft diese Reaktion auch in Gegenrichtung uns aus dem stabilen Chlor Isotop  $^{37}\text{Cl}$  wird durch Absorption eines Neutrinos ein Atomkern des  $^{37}\text{Ar}$ . Der Detektor besteht also aus einem großen Tank mit Chlor (in der Form  $\text{C}_2\text{Cl}_4$ ), der den von der Sonne kommenden Neutrinos ausgesetzt ist. Nach einigen Tagen extrahiert man aus diesem Tank mit chemischen Methoden die erzeugten Argon Atome und bestimmt daraus die Anzahl der Neutrinos, die den Tank durchlaufen haben. Die Experimente lieferten einen Fluß von solaren Neutrinos, der nur etwa halb so groß ist, wie man theoretisch erwartete.

Leider ist der auf Chlor basierte Neutrino Detektor nur sensitiv auf Neutrinos mit einer Energie von mehr als 0.8 MeV. Die im  $pp$  Zyklus erzeugte Neutrinos (siehe (2.132)) haben aber eine niedrigere Energie von etwa 0.25 MeV. Deshalb wurde von der Heidelberg Moskauer Kollaboration ein Experiment zur Bestimmung des solaren Neutrino flusses aufgebaut, das auf der Reaktion



basiert. Ein Problem ist die Beschaffung einer ausreichenden Menge Galliums. Im hier angesprochenen Experiment wurden etwa 30 Tonnen Gallium eingesetzt, was zu einer Rate von etwa einem Ereignis pro Tag führte. Aber auch dieses Experiment liefert einen Neutrino fluss, der signifikant unter den theoretischen Vorhersagen liegt.

Es stellt sich also die Frage: Ist das Modell der Sonne und der darin stattfindenden Fusionsprozesse falsch? Vielleicht sind die Fusionsprozesse im Sonneninneren bereits gedrosselt und wir merken nur deshalb noch nichts davon, weil die Energie etwa 1 Millionen Jahre braucht um von der Erzeugung im Zentrum an die Oberfläche transportiert zu werden. Oder aber die Neutrinos, die in der Sonne als Elektron Neutrinos  $\nu_e$  erzeugt worden sind, haben auf dem Weg ihren Charakter geändert und können deshalb nicht mehr als solche

auf der Erde registriert werden. In der Tat deuten auch andere Experimente auf diese letzte Erklärung hin, man spricht dabei von **Neutrino Oszillationen**.

Nach dem Standardmodell für die Vorgänge in unserer Sonne kann man davon ausgehen, dass im Kern der Sonne bei einer Temperatur von etwa  $10^7$  K die aufgezeigten Reaktionsketten für die Energie sorgen. Diese Energie wird dann durch Strahlung und Diffusion an die Oberfläche transportiert. Dabei reduziert sich die Temperatur und erreicht schliesslich an der Oberfläche einen Wert von etwa 5800 K. Dieser Wert für die Oberflächentemperatur kann aus der Analyse des Spektrums der Sonne abgelesen werden. Die spektrale Verteilung der von der Oberfläche emittierten Strahlung entspricht in guter Näherung dem Spektrum eines Schwarzen Körpers und man kann aus der Wellenlänge, bei der die Intensitätsverteilung ihr Maximum erreicht die Temperatur extrahieren.

Die Leistung der Sonne an abgestrahlter Energie ist sehr konstant. Das liegt daran, dass die Energieproduktion im Kern sich in einem stabilen Gleichgewicht vollzieht. Würde zum Beispiel durch irgendeine Fluktuation die Plamadicht im Kern der Sonne erhöht, so würde dadurch die Rate der Fusionsreaktionen anwachsen (siehe z.B. (2.120)), dies führt zu einer Erhöhung der Temperatur verbunden mit einem Anwachsen des zentralen Drucks, was aber wiederum eine Reduktion der zentralen Dichte zur Folge hätte. Mögliche Fluktuationen werden also durch diesen Mechanismus kompensiert.

Betrachten wir nun einen Stern mit einer Gesamtmasse, die größer ist als die Masse der Sonne. Diese größere Gesamtmasse ist mit einer größeren zentralen Dichte verknüpft. Daraus resultiert eine größere Fusionsrate und damit eine höhere Temperatur sowohl im Kern als auch an der Oberfläche. Massive Sterne leuchten also heller und zeigen eine Intensitätsverteilung, die zu höheren Frequenzen hin verschoben ist: Ihre Farbspektrum enthält stärkere Beiträge aus dem blauen Bereich des sichtbaren Lichtes und natürlich auch stärkere UV Komponenten. Die höhere Energierzeugungsrate bei den massiveren Sternen führt sogar dazu, dass diese ihren gesamten Fusionsbrennstoff deutlich schneller abbrennen als die leichteren Sterne, obwohl sie doch mehr davon zur Verfügung haben. Für unsere Sonne erwartet man eine gesamte Lebensdauer von etwa 10 Milliarden Jahren, von denen sie noch etwa die Hälfte vor sich hat.

Was passiert aber, wenn einem Stern der Fusionsbrennstoff ausgeht und woher kann man dies wissen? Natürlich ist die Theorie mit ihren Modellrechnungen eine zentrale Quelle unseres Wissens. Andererseits möchte man aber natürlich diese theoretischen Modelle auch experimentell überprüfen. Die einzige Chance, die die beobachtende Astronomie hier bietet, ist es die vielen Sterne am Himmel zu beobachten, um daraus die verschiedenen Phasen im Leben der Sterne zu extrahieren.

Eine Klassifizierung der verschiedenen Sterne nach den Beobachtungsdaten, die sich in der Astronomie bewährt hat, ist die Darstellung der stellaren Objekte im **Hertzsprung Russel Diagramm**. Dabei versucht man für jedes beobachtete Objekt seine Leuchtstärke  $L$  zu ermitteln und die Temperatur seiner Oberfläche,  $T_{eff}$ , die man ja aus der spektralen Verteilung des emittierten Lichts extrahieren kann. Jeder Stern wird dann diese beiden Koordinaten  $L$  und  $T_{eff}$  charakterisiert und als ein Punkt im Hertzsprung Russel Diagramm eingetragen (siehe Abb. 2.31). Dabei trägt man gewöhnlich auf der vertikalen Achse das Verhältnis  $L/L_{\odot}$  ( $L_{\odot}$  steht hier für die Leuchtstärke der Sonne) mit einer logarithmischen Skala auf. Die horizontale Achse bezieht sich auf den Logarithmus der Temperatur (in Kelvin), wobei aber höhere Temperaturen nach links aufgetragen sind. Die Sonne ist also

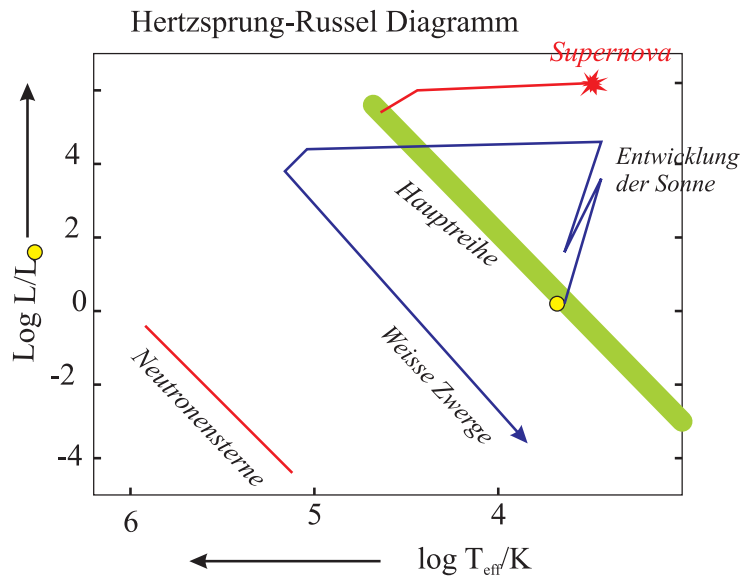


Abbildung 2.31: Phasen der Sternentwicklung im Hertzsprung Russel Diagramm

durch einen Punkt in diesem Diagramm bei

$$\log(L/L_{\odot}) = 0 \quad \text{und} \quad \log(T_{\text{eff}}) = \log(5780) = 3.76,$$

dargestellt. Damit befindet sich die Sonne wie ein Großteil der beobachteten Sterne auf der **Hauptreihe** des Hertzsprung Russel Diagramms. All diese Sterne auf der Hauptreihe befinden sich in einer Phase ihres Lebens, die der der Sonne vergleichbar ist: sie gewinnen Energie durch das Wasserstoffbrennen also dadurch, dass sie in ihrem Zentrum Protonen zu Helium fusionieren.

Ist im Kern eines solchen Hauptreihensterns diese Fusion abgeschlossen, so dass dort kein Brennstoff mehr zur Verfügung steht, so entfällt diese Quelle des thermischen Drucks, der Stern kontrahiert sich und gewinnt dadurch potenzielle Energie aus der Gravitation. Die mit diesem Energiegewinn verbundene Temperaturerhöhung zündet das Wasserstoffbrennen in einer Schale um den Kern. Dabei expandieren die äußeren Schichten des Sterns und es entsteht ein **Roter Riese**. Dies ist ein Stern mit einer höheren Leuchtkraft und einer niedrigeren Oberflächentemperatur als vergleichbare Sterne der Hauptreihe. Diese Roten Riesen befinden sich also in der rechten oberen Ecke des Hertzsprung Russel Diagramms.

Gleichzeitig wird durch die erhöhte Temperatur im Kern die Fusion eines solchen Roten Riesen die Fusion von  $He$  zu Kohlenstoff,  $C$ , oder Sauerstoff,  $O$ , ermöglicht. Diese Fusionsreaktion benötigt ein Plasma höherer Temperatur, da der zu überwindende Coulomb Berg der  $He$  Kerne höher ist als der des Wasserstoffs im Wasserstoffbrennen. Diese Phase eines Roten Riesen ist im Leben eines Sterns deutlich kürzer als die Zeit des Wasserstoffbrennens. Deshalb beobachtet man auch wesentlich weniger Rote Riesen als Hauptreihensterne.

Sterne, die deutlich schwerer sind als die Sonne können noch mehrere solcher Brennphasen durchlaufen. So kann in einem nächsten Schritt im Zentrum solcher Sterne auch die  $C$  und  $O$  Kerne in Fusionsprozessen zu schweren Elementen verbrannt werden, während in einer

mittleren und einer weiter außen liegenden Schale noch Heliumbrennen und Wasserstoffbrennen fortgesetzt wird. Man spricht dabei vom Schalenbrennen bis hin zu den Kernen im Bereich des  $Fe$  und  $Ni$ , die eine maximale Bindungsenergie pro Nukleon aufweisen, so dass die Fusionsprozesse hier stoppen.

Bei leichteren Sternen etwa mit einer Masse kleiner als die vierfache Sonnenmasse, werden die Fusionen in der Heliumbrennphase gestoppt. Die Temperaturen reichen nicht aus, um die späteren Brennphasen zu zünden. Die Stabilisierung erfolgt dann nicht mehr durch den thermischen Druck sondern durch den Druck des **entarteten Fermigases**. Um diesen Mechanismus zu verstehen, wenden wir uns im folgenden Teilabschnitt dem Modell des Fermi Gases zu.

### 2.9.1 Entartetes Fermi Gas

Der Druck eines Fermigases basiert auf dem Pauli Prinzip. Um diesen Mechanismus zu verdeutlichen, betrachten wir zunächst einmal ein unendlich ausgedehntes System von nicht wechselwirkenden Fermionen, eben ein Fermigas in einer Raumdimension. Um dieses System berechenbar zu machen, schneidet man einen Teilabschnitt der Länge  $a$  aus und betrachtet nur solche Wellenfunktionen, die sich periodisch fortsetzen lassen, die also an der Stelle  $x = 0$  den gleichen Wert haben wie an der Stelle  $x = a$ <sup>5</sup>. Da es sich hier um freie Teilchen handeln soll, sind die Wellenfunktionen ebene Wellen der Form

$$\psi_k(x) = e^{ikx} \quad \text{mit} \quad e^{ik0} = e^{ika}. \quad (2.138)$$

Dies bedeutet, dass die Wellenzahlen  $k$  beschränkt sind auf die diskreten Werte

$$k_\nu = \frac{2\pi\nu}{a} \quad \text{mit} \nu = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2.139)$$

Will man also  $N$  Fermionen mit minimaler Energie in diesem Intervall unterbringen so wird man sukzessiv die Zustände mit dem Impuls  $p_\nu = \hbar k_\nu$  erst für  $\nu = 0$  dann für  $\nu = \pm 1$ ,  $\nu = \pm 2$  und so weiter besetzen bis alle  $N$  Fermionen untergebracht sind. Damit hat man dann das Pauli Prinzip beachtet und genau die Zustände mit der geringsten Energie besetzt: denn je höher  $|\nu|$  um so höher ist die kinetische Energie

$$t_\nu = \frac{p_\nu^2}{2m}.$$

Der maximale Impuls der dabei besetzt wird trägt den Namen **Fermi Impuls**,  $p_F$ . Wegen (2.139) ist er in diesem eindimensionalen Beispiel verknüpft mit dem maximalen besetzten Index  $\nu_F$  über

$$\begin{aligned} N &= 2\nu_F \\ &= 2\frac{a}{2\pi}k_{\nu_F} \\ &= 2\frac{a}{2\pi\hbar}p_F \\ &= \frac{a}{2\pi\hbar} \int_{-p_F}^{p_F} dp. \end{aligned} \quad (2.140)$$

<sup>5</sup>Wir werden diese Forderung in der Festkörperphysik wieder aufgreifen unter dem Namen Born von Karmann Randbedingung.

Wenn man diese Zählung auf ein Gas von Fermionen in 3 Dimensionen ausweitet, betrachtet man als Basiszelle einen Kubus mit dem Volumen  $V = a^3$  mit periodischen Randbedingungen in allen 3 Raumkoordinaten und erhält für die Teilchenzahl den zu (2.140) entsprechenden Ausdruck

$$N = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} d^3p. \quad (2.141)$$

Die Teilchenzahldichte ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} n &= \frac{N}{V} \\ &= d \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^{p_F} p^2 dp \\ &= d \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 \\ &= d \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \\ &= \frac{d}{6\pi^2} k_F^3, \end{aligned} \quad (2.142)$$

wobei  $k_F$ , die zum Fermiimpuls zugehörige Wellenzahl ist,  $p_F = \hbar k_F$  und  $d$  den Entartungsgrad darstellt, mit dem ein Niveau besetzt werden kann. Betrachten wir also z.B. eine Fermigas von Elektronen, die ja eine Spin von  $1/2$  besitzen, so kann jedes Einteilchen-niveau also mit einem Elektron mit der Spinprojektion  $m_s = 1/2$  und einem Elektron mit  $m_s = -1/2$  besetzt werden, was durch den Entartungsgrad  $d = 2$  zum Ausdruck gebracht wird.

Aus (2.142) sieht man, dass die Teilchenzahldichte unabhängig vom gewählten Basisvolumen  $V$  ist und nur vom Fermiimpuls  $p_F$  abhängt. Versucht man die Teilchenzahldichte zu erhöhen, so ist das mit einem höheren Fermiimpuls verknüpft. Dies bedeutet, dass Zustände mit höherer Energie besetzt werden müssen, was letztlich für den Druck verantwortlich ist, den ein solches Fermigas einem Versuch die Dichte der Fermionen zu erhöhen entgegensetzt.

Um diesen Druck des Fermigases genauer zu bestimmen, berechnen wir die kinetische Energiedichte des Fermigases

$$\tau = \frac{T_{kin}}{V} = \frac{\sum_{i \leq F} t_i}{V}. \quad (2.143)$$

Dabei steht  $t_i$  für die kinetische Energie eines Teilchens im Quantenzustand  $i$  und wir summieren über alle Zustände, die im Fermigas besetzt sind, was wir durch die Restriktion  $i \leq F$ , also Zustände bis zum Fermiimpuls, zum Ausdruck bringen. Aus (2.142) wissen wir, dass

$$n = \frac{N}{V} = \frac{\sum_{i \leq F}}{V} = d \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} k^2 dk. \quad (2.144)$$

Damit ergibt sich für die Energiedichte aus (2.143)

$$\begin{aligned} \tau &= d \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \frac{(\hbar k)^2}{2m} k^2 dk \\ &= \frac{d}{2\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}. \end{aligned} \quad (2.145)$$

Die Energiedichte ist also proportional zu  $k_F^5$  und wegen (2.142) gilt damit

$$\tau \sim n^{\frac{5}{3}} \quad \text{bzw.} \quad T_{kin} \sim \frac{1}{V^{2/3}}. \quad (2.146)$$

Damit gilt für den Druck

$$\begin{aligned} P &= -\frac{dT_{kin}}{dV} \\ &= \frac{2}{3} \frac{T_{kin}}{V} \\ &= \frac{2}{3} \tau \\ &= \frac{2d}{6\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}. \end{aligned} \quad (2.147)$$

Man sieht also, dass der Druck proportional zu  $k_F^5$  und damit wegen (2.142) mit der Teilchendichte  $n$  proportional zu  $n^{5/3}$  anwächst. Außerdem sieht man, dass der Druck proportional zu  $1/m$  ist, also besonders stark für Fermionen mit kleiner Masse. Für den Fermidruck sind also in normaler Materie vor allen Dingen die Elektronen verantwortlich.

## 2.9.2 Weisse Zwerge und Neutronensterne

Benutzt man die Zustandsgleichung (2.147) für das Elektronengas in den Differenzialgleichungen (2.129) und (2.130) für die Berechnung von Massen und Radien von Kernen, so erhält man Ergebnisse, die charakteristisch sind für die sogenannten **Weissen Zwerge**<sup>6</sup>. Weisse Zwerge werden also nicht durch thermischen Druck sondern durch den Fermidruck der Elektronen stabilisiert. Dies entspricht dem Szenarium z.B. in der Sonne, wenn sie einmal ausgebrannt sein wird.

Die Berechnung der Eigenschaften eines Weissen Zwerges ist relativ einfach: Man nimmt einen Wert für die Dichte im Zentrum des Systems  $\rho(0)$  an und löst die gekoppelten Differenzialgleichungen (2.129) und (2.130) für die Zustandsgleichung (2.147). Man findet dann die Lösungsfunktionen für  $\rho(r)$  und  $M(r)$ , wie sie z.B. in Abb. 2.29 dargestellt sind. Startet man die Rechnung mit einer höheren zentralen Dichte, so erhält man typischerweise einen Stern mit einer größeren Masse und einem kleineren Radius. Die Weissen Zwerge sind relativ kompakte Objekte. Ein Weisser Zwerg, der etwa die Masse der Sonne hat, besitzt einen Radius von etwa 8000 km, was in etwa dem Radius der Erde entspricht.

Die maximale Masse eines Weissen Zwerges ist die sogenannte **Chandrasekhar Masse**, etwa das 1.4 fache der Sonnenmasse. Bei noch größeren Dichten ergeben sich Fermi Energie für die Elektronen, die so groß sind, dass es energetisch günstiger wird, ein Proton und ein Elektron im Sinne einer Elektroneneinfang Reaktion in ein Neutron umzuwandeln

$$p + e^- \longrightarrow n + \nu_e. \quad (2.148)$$

<sup>6</sup>Bei Benutzung der Zustandsgleichung (2.147) muss man berücksichtigen, dass die hier hergeleitete Zustandsgleichung nur für nichtrelativistische Elektronen gültig ist. Bei Dichten, bei denen die Geschwindigkeit eines Elektrons mit dem Fermiimpuls von der Größenordnung der Lichtgeschwindigkeit wird, muss man die relativistische Energie Impuls Beziehung benutzen.

Dadurch verschwinden also die Elektronen, die für den Druck verantwortlich sind, der einen Weissen Zwerg stabilisiert und man erhält einen Stern, der im wesentlichen aus Neutronen besteht und deshalb auch den Namen **Neutronenstern** hat. Ein solcher Neutronenstern hat eine Dichte, die etwa der Dichte in einem Atomkern entspricht, er ist also praktisch ein riesiger Atomkern mit einem Radius von einigen Kilometern, der allerdings fast nur aus Neutronen besteht. Typischerweise hat man etwa die Masse einer Sonne zusammengepackt in einem Neutronenstern mit dem Radius von 10 km, was einer Dichte von  $10^{15} \text{ g cm}^{-3}$  entspricht.

Die Berechnung der Zustandsgleichung für einen Neutronenstern ist ein sehr interessantes Thema der aktuellen Forschung<sup>7</sup>. Neben dem Beitrag des Fermidrucks spielt hier die Wechselwirkung zwischen den Neutronen eine wichtige Rolle, aber auch die Möglichkeiten eines Übergangs der nuklearen Materie zu einem Quark Gluon Plasma bei sehr hohen Dichten.

Ein solcher Neutronenstern entsteht aus einem ausgebrannten Riesenstern. Wir haben bereits gesehen, dass ein Stern mit z.B. einer Masse von zwanzig mal der Sonnenmasse sein Wasserstoffbrennen im Kern sehr vielschneller beendet als die kleineren Sterne. Er durchläuft auch die verschiedenen Phasen des Schalenbrennens bis hin zur Fusion von Eisen. Ist auch diese Brennphase im Kern abgeschlossen kollabiert ein solcher Stern dann in der Zeit von wenigen Sekunden. In diesem Kollaps wird Gravitationsenergie frei, die sehr viel größer ist als der gesamte Energievorrat der Sonne. Ist die Masse des Sterns groß genug, so überwindet der Kollaps auch den stabilisierenden Druck des Weissen Zwerges, der inverse Beta Prozess von (2.148) läuft ab und der Kollaps wird erst gestoppt wenn die nuklearen Dichten eines Neutronensterns erreicht sind.

Wenn der Kollaps an der Oberfläche des Neutronensternes abrupt gestoppt ist, entsteht ein elastischer Rückstoß. Dies erzeugt eine nach außen gerichtete Stoßwelle, durch die die äußeren Schalen des Sterns explosionsartig abgestoßen werden. Dies ist das Phänomen der Supernova vom Typ II. Dabei wird in kurzer Zeit so viel Energie freigesetzt, dass ein einzelner Stern bei dieser spektakulären Art seines Todes über einen kurzen Zeitraum eine größere Energiemenge freisetzt, als alle anderen Milliarden Sterne einer Galaxie.

Deshalb wurden solche spektakulären Phänomene am Sternenhimmel auch schon von Astronomen vergangener Jahrhunderte beobachtet. Ein Beispiel ist die Supernova im Krebs Nebel, die von chinesischen Astronomen 1054 beobachtet wurde. Heute kann man den Überrest jener Explosion als einen kleinen hellen Nebel beobachten (siehe Abb. 2.32). Dieser Nebel ist etwa 3400 Lichtjahre entfernt, die Gasmassen, die von der Supernova ausgestoßen wurden, breiten sich auch heute noch mit einer Geschwindigkeit von 1500 km/s aus.

Im Zentrum des Krebs Nebels beobachtet man einen Pulsar, der mit einer konstanten Frequenz von 30 Hz rotiert und mit dieser Frequenz elektromagnetische Strahlung in Richtung der Erde schickt. Man kann davon ausgehen, dass es sich dabei um einen kompakten Neutronenstern handelt. Wegen der Erhaltung des Drehimpulses hat sich die Winkelgeschwindigkeit des Sterns bei der Implosion der Materie so drastisch erhöht.

Supernovae sind relativ seltene Ereignisse am Sternenhimmel. Man entdeckt nur etwa eine

---

<sup>7</sup>siehe z.B. im Internet: [www.physik.unibas.ch/eurograd/Vorlesung/Muether/index.htm](http://www.physik.unibas.ch/eurograd/Vorlesung/Muether/index.htm) : Kompaktvorlesung *Equation of State for the dense Matter of Neutron Stars* von H. Mütter



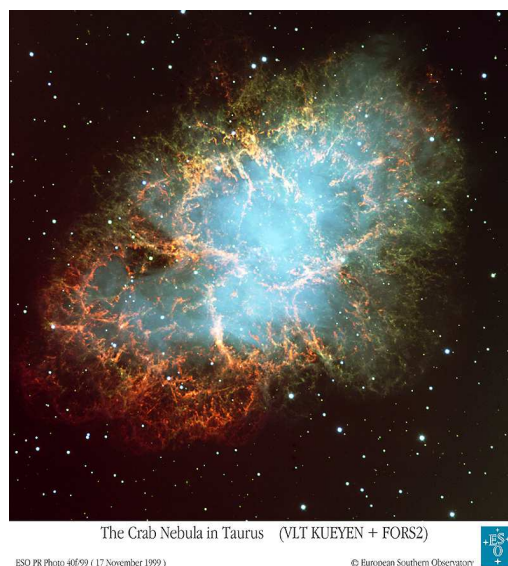


Abbildung 2.32: *Blick auf den Krebs Nebel, in dem 1054 eine Supernova beobachtet wurde.*

pro hundert Jahre in einer Galaxie. Am 23.2.1987 wurde eine solche Supernova vom Typ II<sup>8</sup> in der großen Magellanschen Wolke beobachtet, eine Nachbargalaxie unserer Milchstraße, die “nur” 160000 Lichtjahre entfernt ist. Sie trägt den Namen Supernova 1987 A oder kurz SN 1987 A. Dies ist praktisch die erste Supernova in unserer Nähe, die mit unterschiedlichen Instrumenten beobachtet werden konnte.

Besonders spektakulär war dabei die Tatsache, dass man nahezu zeitgleich mit dem ersten Lichtsignal der SN 1987 A auch eine signifikante Erhöhung von Neutrinoereignissen verzeichnete. Drei damals bestehende Neutrino Detektoren (der Kamiokande Detektor in Japan, der IMB Detektor in Cleveland/USA und ein Detektor in Baksan/Russland beobachteten jeweils 8 bis 12 Neutrinos in einem kurzen Zeitintervall, eine Rate, die signifikant über der üblichen Neutrinorate liegt. Diese Neutrinos sollten in der ersten Millisekunde der Implosion zu einem Neutronenstern durch den inversen Beta Zerfall (2.148) entstanden sein. Die Neutrinos erreichten die Erde etwa 2 Stunden vor dem sichtbaren Licht. Dies liegt natürlich nicht daran, dass die Neutrinos sich mit einer Geschwindigkeit größer als Lichtgeschwindigkeit bewegt hätten. Vielmehr wurden die Photonen zunächst noch durch die äußere Hülle der Supernova ein wenig aufgehalten, bevor sie sich auf den Weg machen konnten.

Die Abb. 2.33 zeigt ein Blick auf die Überreste der SN 1987 A, das vor kurzem mit dem Hubble Space Teleskop aufgenommen wurde. Man erkennt Ringe ausgestoßener Materie. Allerdings gibt es bis heute noch keine eindeutigen Hinweise auf einen dabei entstandenen Neutronenstern.

Massive Sterne, die bei einer Implosion nicht durch den Druck der Neutronenmaterie stabilisiert werden, enden als ein **Schwarzes Loch**.

<sup>8</sup>Supernovae vom Typ II entstehen am Ende eines massiven Sternes. Supernovae vom Typ I hingegen können in einem Doppelsternsystem entstehen. Dabei ist ein Stern ein weisser Zwerg, der Masse von seinem Begleiter anzieht und bei Erreichen der Chandrasekhar Masse explodiert.

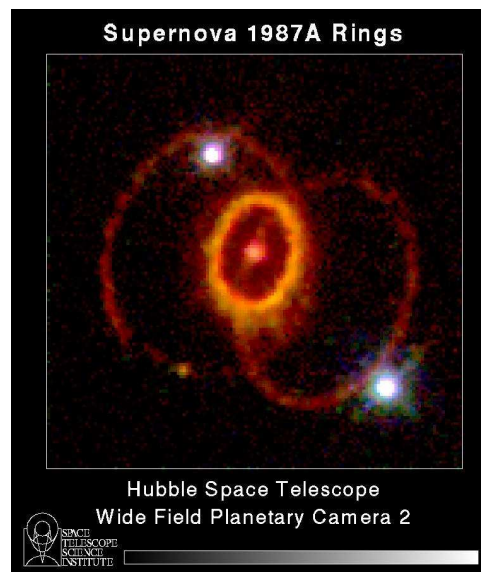


Abbildung 2.33: Bild des Hubble Space Teleskops auf Überreste der Supernova 1987 A.

Wir haben gesehen, dass durch das Schalenbrennen in den fortgeschrittenen Stadien von massiven Sternen die Elemente bis hin zum stabilsten Element in der Eisengengend fusioniert werden können. Wie können aber Elemente entstehen mit einer Ladungszahl, die noch größer ist als die des Eisens?

Man geht davon aus, dass solche Elemente vor allem durch sukzessives Anlagern von Neutronen erzeugt werden, da die Anlagerung von Protonen durch die Coulomb Barriere unterdrückt wird. Solche Neutronen stehen in ausreichender Anzahl in den brennenden Schalen alter Sterne zur Verfügung. Durch den  $\beta$ -Zerfall werden die angelagerten Neutronen in Protonen umgewandelt, so dass auch Kerne mit höherer Kernladungszahl also schwerere Elemente entstehen können. Dabei unterscheidet man zwischen s-Prozesse, s steht hier für slow, bei denen die Neutronen so langsam angelagert werden, dass vor der Anlagerung des nächsten Neutrons das  $\beta$  Gleichgewicht erreicht wurde, und r-Prozessen (r steht für rapid) bei denen auch mehrerer Neutronen angelagert werden bevor sich das  $\beta$ -Gleichgewicht einstellt.

Wir sehen hieraus, dass ein großer Teil der Materie, aus der wir bestehen, vorher in einem massiven Stern erzeugt worden ist und dann bei dessen Tod ins Universum emittiert wurde.

## 2.10 Elementarteilchen

Bis etwa in die vierziger Jahre des letzten Jahrhunderts kannte man als elementare Bausteine der Materie und damit als Elementarteilchen lediglich die Protonen ( $p$ ), die Neutronen ( $n$ ), die Elektronen ( $e^-$ ) und aus dem  $\beta$ -Zerfall die Neutrinos  $\nu_e$ . Hinzu kamen die jeweiligen Antiteilchen. Diese Elementarteilchen unterscheiden sich dadurch, welchen fundamentalen Wechselwirkungen sie ausgesetzt sind. Deshalb wollen wir uns zunächst in diesem Abschnitt um die Charakterisierung der fundamentalen Wechselwirkungen bemühen.

### 2.10.1 Fundamentale Wechselwirkungen

Am vertrautesten ist uns die Gravitationswechselwirkung. Zwei Massen der Größe  $m$  ziehen sich gegenseitig an. Dies wird beschrieben durch das attraktive Gravitationspotenzial, das sich als Funktion des Abstandes der beiden Massen,  $r$ , darstellen lässt in der Form

$$V_g(r) = -G \frac{m^2}{r}, \quad (2.149)$$

wobei  $G$  die Gravitationskonstante ist. Ganz ähnlich ist die Wechselwirkung zweier ruhender Ladungen. In diesem Fall kann die Kraft aber je nach Vorzeichen der Ladungen attraktiv oder repulsiv sein. Für zwei Ladungen  $e$  mit gleichem Vorzeichen, ist die Wechselwirkung repulsiv und wird beschrieben durch das Coulomb Potenzial

$$V_{em}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \quad (2.150)$$

Die Massen  $m$  im Gravitationspotenzial (2.149) haben also eine Rolle ganz analog zu den Ladungen  $e$  im Coulomb Potenzial, allerdings mit dem Unterschied, dass Ladungen mit 2 unterschiedlichen Vorzeichen existieren und dadurch repulsive oder attraktive Wechselwirkungen erfahren, während eine Masse auf alle anderen Massen stets attraktiv wirkt. Die Gravitationskonstante in (2.149) wird ersetzt durch die Konstante  $1/(4\pi\epsilon_0)$ . Bewegen sich die Ladungen, so wird die elektrische Wechselwirkung ergänzt durch die magnetische Wechselwirkung. Die magnetische Wechselwirkung ist aber keine unabhängige Fundamentalkraft. Elektrische und magnetische Wechselwirkungen werden ineinander transformiert, je nach dem Bezugssystem, in dem die Wechselwirkung dargestellt wird. Wir sprechen ja deshalb von der elektromagnetischen Wechselwirkung, die in (2.150) durch das Coulomb Potenzial repräsentiert wird.

Hinzu kommt als weitere fundamentale Wechselwirkung die sogenannte **starke Wechselwirkung**, die wir bisher nur als die Wechselwirkung kennengelernt haben, die zwischen Protonen und Neutronen wirkt und den Zusammenhalt der Atomkerne bewirkt. Dabei haben wir gesehen, dass diese Wechselwirkung bei kurzen Abständen dominiert, bei größeren Abständen aber die Coulomb Wechselwirkung zwischen den Protonen stärker ist als die Anziehung zwischen den Nukleonen. Die starke Wechselwirkung besitzt also offensichtlich eine kürzere Reichweite als die Coulomb Wechselwirkung. Deshalb macht es auch Sinn das Potenzial dieser Wechselwirkung in Analogie zu (2.149) und (2.150) als ein  $1/r$  Potenzial anzusetzen, dessen Stärke aber durch einen Exponentialfaktor bei großen Abständen reduziert wird, etwa in der Form

$$V_s(r) = -\frac{g_s^2}{r} e^{-\alpha r}. \quad (2.151)$$

All diese Wechselwirkungen haben wir bisher nur in der Form kennengelernt, dass sie die Art der wechselwirkenden Teilchen nicht verändern. Auf den ersten Blick ganz anders ist die vierte fundamentale Wechselwirkung, die sogenannte **schwache Wechselwirkung**. Wir haben diese schwache Wechselwirkung kennengelernt beim  $\beta$ -Zerfall des Neutrons oder z.B. bei den Elektronen Einfang Reaktionen in einem Atomkern, wo ja im wesentlichen die Reaktion



abläuft. Bei dieser Wechselwirkung werden die wechselwirkenden Partner Proton und Elektron in Neutron plus Neutrino umgewandelt. Die Art der Teilchen wird verändert, es gelten aber Erhaltungssätze für die Zahl der Nukleonen (1 Proton geht über in ein Neutron), die Zahl der Leptonen (1 Elektron geht über in ein Neutrino) und für die Ladung: die Gesamtladung vor und nach der Wechselwirkung ist identisch null. Auch diese Prozesse können durch ein Potenzial beschrieben werden der Form (der Index  $w$  steht für "weak" gleich schwach)

$$V_w(r) = \frac{g_w^2}{r} e^{-\beta r}. \quad (2.153)$$

Wir haben gesehen, dass die Prozesse der schwachen Wechselwirkung recht gut durch eine Kontaktwechselwirkung dargestellt werden können (siehe (2.81)), also einem Potenzial mit sehr kurzer Reichweite. Dies bedeutet, dass der Faktor  $\beta$  in (2.153) groß sein muss.

Alle Wechselwirkungspotenziale haben also die gleiche Form wie etwa das Potenzial der starken Wechselwirkung (2.151). Für die elektromagnetische und die Gravitationswechselwirkung gilt lediglich, dass der Parameter  $\alpha$  in der Exponentialfunktion den Wert null annimmt, so dass die Exponentialfunktion also insgesamt durch den Faktor 1 ersetzt werden kann.

In einem nächsten Schritt wollen wir die Transformation dieser Potenziale von der Ortsdarstellung in die Impulsdarstellung betrachten. Wir begeben uns dazu in das Koordinatensystem, das sich mit dem Schwerpunkt der wechselwirkenden Teilchen mitbewegt. Besitzt also vor der Wechselwirkung das eine Teilchen in diesem Koordinatensystem den Impuls  $\vec{p}_i$ , so muss das andere den Impuls  $-\vec{p}_i$  besitzen so dass der Gesamtimpuls der beiden Teilchen identisch Null ist. Da dieser Gesamtimpuls erhalten bleiben muss, muss auch im Endzustand, also nach der Wechselwirkung gelten, dass das eine Teilchen einen Impuls  $\vec{p}_f$  besitzt und das andere dann den Impuls  $-\vec{p}_f$  (siehe auch Abb. 2.34).

Damit ergibt sich also für den Anfangszustand die Zweiteilchenwellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | -\vec{p}_i, \vec{p}_i \rangle = e^{i(-\vec{p}_i \vec{r}_1 + \vec{p}_i \vec{r}_2)/\hbar} = e^{i\vec{p}_i \vec{r}/\hbar} \quad (2.154)$$

wobei  $\vec{r}$  für den Relativvektor zwischen den beiden wechselwirkenden Teilchen steht

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1.$$

Entsprechendes gilt für den Endzustand. Damit erhalten wir für die Impulsdarstellung eines Potenzials  $V(r)$ , das nur vom Abstand der wechselwirkenden Teilchen  $r$  abhängt

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}_f | V | \vec{p}_i \rangle &= \int d^3r \langle \vec{p}_f | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | V | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p}_i \rangle \\ &= \int d^3r e^{-i\vec{p}_f \vec{r}/\hbar} V(r) e^{i\vec{p}_i \vec{r}/\hbar} \\ &= \int d^3r V(r) e^{i\vec{q} \vec{r}/\hbar}, \end{aligned} \quad (2.155)$$

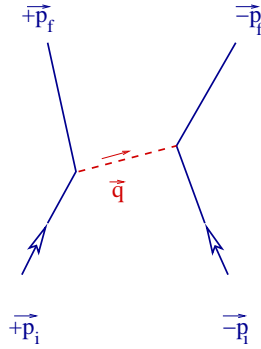


Abbildung 2.34: Impulse vor und nach einer Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen. Die Zeit wächst in dieser Darstellung von unten nach oben.

wobei wir den **Impulstransfer**  $\vec{q}$  definiert haben als

$$\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f . \quad (2.156)$$

Der Impulstransfer ist also gerade der Impuls, der von einem der wechselwirkenden Partner abgegeben wird und vom anderen Partner aufgenommen wird. Wenn man sich also vorstellt, dass die Wechselwirkung durch den Austausch eines ‐Botschafter - Teilchens‐ (eines **Mesons**) zwischen den Teilchen vermittelt wird, so entspricht der Impulstransfer gerade diesem Impuls des ausgetauschten Mesons. Lokale Wechselwirkungen, die nur vom Relativvektor  $\vec{r}$  der wechselwirkenden Teilchen abhängen, hängen in der Impulsdarstellung also nur vom Impulstransfer  $\vec{q}$  ab.

Für die weitere Rechnung führen wir die Integration über die Koordinaten des Vektors  $\vec{r}$  in dem Koordinatensystem aus, dessen  $z$ -Achse parallel zur Richtung von  $\vec{q}$  orientiert ist und benutzen die Nomenklatur

$$\vec{q}\vec{r} = qr \cos \vartheta = qr\xi = \hbar kr\xi .$$

Damit ergibt sich in Fortsetzung von (2.155)

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}_f | V | \vec{p}_i \rangle &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr V(r) \int_{-1}^1 d\xi e^{ikr\xi} \\ &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr V(r) \frac{1}{ikr} [e^{ikr} - e^{-ikr}] \\ &= \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r dr V(r) \sin(kr) . \end{aligned} \quad (2.157)$$

Dieses Ergebnis gilt noch für alle Potentiale, die nur vom Betrag des Abstandes  $r$  abhängen. Im nächsten Schritt wollen wir nun speziell ein Potenzial vom Typ der starken Wechselwirkung (2.151) behandeln.

$$\langle \vec{p}_f | V_s | \vec{p}_i \rangle = -\frac{4\pi g_s^2}{k} \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \sin(kr) . \quad (2.158)$$

Zu berechnen bleibt also

$$\mathcal{X} = \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \sin(kr)$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{k} \cos kr e^{-\alpha r} \Big|_0^\infty - \frac{\alpha}{k} \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \cos(kr) \\
&= \frac{1}{k} - \frac{\alpha}{k} \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \cos(kr) \\
&= \frac{1}{k} - \frac{\alpha}{k} \left\{ \frac{1}{k} \sin kr e^{-\alpha r} \Big|_0^\infty - \frac{-\alpha}{k} \int_0^\infty dr e^{-\alpha r} \sin(kr) \right\} \\
&= \frac{1}{k} - \frac{\alpha^2}{k^2} \mathcal{X}. \tag{2.159}
\end{aligned}$$

Bei dem Übergang zur zweiten und zur vierten Zeile dieser Gleichungsfolge wurde jeweils partiell integriert. Die erste und letzte Zeile von (2.159) führt uns auf die Lösung

$$\mathcal{X} = \frac{1}{k} \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2}{k^2}}. \tag{2.160}$$

Setzt man dieses Ergebnis für  $\mathcal{X}$  in (2.158) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle \vec{p}_f | V_s | \vec{p}_i \rangle &= -\frac{4\pi g_s^2}{k^2 + \alpha^2} \\
&= -\frac{4\pi g_s^2 \hbar^2 c^2}{c^2 q^2 + \alpha^2 \hbar^2 c^2}. \tag{2.161}
\end{aligned}$$

Identifizieren wir nun den Parameter  $\alpha$  mit

$$\alpha = \frac{m_\pi c^2}{\hbar c}, \tag{2.162}$$

so entspricht der Nenner im Ausdruck (2.161) gerade dem Quadrat der relativistischen Energie eines Teilchens der Masse  $m_\pi$  mit dem Impuls  $q$

$$E_q^2 = c^2 q^2 + \alpha^2 \hbar^2 c^2 = c^2 q^2 + m_\pi^2 c^4. \tag{2.163}$$

Damit entspricht dieser Nenner, wie wir in der Vorlesung Quantenmechanik noch sehen werden, dem sogenannten Propagator eines entsprechenden Bosons. Ein solcher Propagator beschreibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang von einem Anfangszustand in einen Endzustand. In diesem Fall also die Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass das Boson der Masse  $m_\pi$  mit dem Impuls  $q$  vom Ort des einen Nukleons zum Ort des anderen Nukleons gelangt (siehe Abb. 2.34).

Stünde diese Energie  $E_q$  wirklich zur Verfügung, so könnte das Boson wirklich erzeugt werden und von einem Ort zu einem beliebigen anderen Ort gelangen. Im Fall der elastischen Wechselwirkung von 2 Teilchen wird aber gar keine Energie freigesetzt. Die Energie  $E_q$  kann also nach den Gesetzen der Quantenmechanik nur im Rahmen einer Schwankung  $\Delta E$  um den erhaltenen Erwartungswert der Energie aufgebracht werden. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation gibt es für die Größe dieser Schwankung und dem Zeitintervall während dem eine solche Schwankung zur Verfügung gestellt werden kann die Beziehung

$$E_q \Delta t = \Delta E \Delta t \approx \hbar.$$

Dies bedeutet, dass das Boson also maximal einen Weg der Strecke

$$\Delta r = c \Delta t \approx \frac{c \hbar}{E_q}$$

zurücklegen kann. Je größer die Masse des Bosons, um so kleiner diese Reichweite. Damit haben wir eine anschauliche Erklärung für die Ortsdarstellung der starken Wechselwirkung. Mit der Identifikation von  $\alpha$  nach (2.162) schreibt sich ja (2.151)

$$V_s(r) = -\frac{g_s^2}{r} e^{-m_\pi cr/\hbar}. \quad (2.164)$$

Je größer die Masse des Austauschteilchens  $m_\pi$  um so kleiner die Reichweite der Wechselwirkung und um so stärker wird das Potenzial für größere Abstände  $r$  gedämpft.

Der japanische Physiker **H. Yukawa**, nach dem auch Potenziale der Form (2.164) als Yukawa Potenziale bezeichnet werden, analysierte die starke Wechselwirkung und kam zu dem Schluß, dass bei einer Reichweite der starken Wechselwirkung von etwa 1 fm, also  $10^{-15}$  m, der Austausch von Mesonen mit einer Masse von etwa  $100 \text{ MeV}/c^2$  dafür verantwortlich sein sollte. Diese von Yukawa bereits im Jahre 1935 postulierten Mesonen wurden im Jahre 1947 als Pionen experimentell gefunden. Wir werden darauf noch zu sprechen kommen.

Die Form der schwachen Wechselwirkung in (2.153) entspricht der der starken Wechselwirkung. Wie bereits erwähnt hat die schwache Wechselwirkung eine sehr viel kürzere Reichweite, als die starke Wechselwirkung. Dies bedeutet, dass die Massen der verantwortlichen Austauschteilchen,  $m_W$ , die ja entsprechend (2.162) mit dem Parameter  $\beta$  in (2.153) über

$$\beta = \frac{m_W c^2}{\hbar c}, \quad (2.165)$$

verknüpft sein sollten sehr viel größer sein muss. Der experimentelle Nachweis dieser  $W$ -Bosonen mit einer Masse von  $m_W = 80 \text{ GeV}/c^2$  gelang erst 1983 am Proton - Antiproton Speicherring des CERN.

Die Impulsdarstellung der schwachen Wechselwirkung besitzt also die Form

$$\langle \vec{p}_f | V_w | \vec{p}_i \rangle = \frac{4\pi g_w^2 \hbar^2 c^2}{c^2 q^2 + m_W^2 c^4}. \quad (2.166)$$

Für mittlere Impulstransfers mit  $q^2 \ll m_W^2 c^2$  kann man den Beitrag des Impulstransfers gegenüber der Masse des  $W$  Bosons im Nenner vernachlässigen und (2.166) wird in der Impulsdarstellung reduziert zu einer Konstanten

$$\langle \vec{p}_f | V_w | \vec{p}_i \rangle = \frac{4\pi g_w^2 \hbar^2}{m_W^2 c^2}. \quad (2.167)$$

Bei Transformation in die Ortsdarstellung ergibt sich als Funktion des Abstandes die Diracsche Deltafunktion und wir landen wieder bei der Darstellung der schwachen Wechselwirkung als Kontaktwechselwirkung, wie bereits in (2.81) diskutiert wurde.

Die Gravitation und die elektromagnetische Wechselwirkung werden durch Potenziale der Form  $1/r$  beschrieben, die Masse der Austauschteilchen, die ja in die Exponentialfunktion einer Austauschwechselwirkung vom Typ (2.164) eingeht, ist also in diesen beiden Fällen identisch Null. Damit haben wir alle 4 Formen der fundamentalen Wechselwirkung durch den Austausch von Teilchen dargestellt. Die Masse der Photonen im Fall der elektromagnetischen Wechselwirkung und die Masse der Gravitonen im Falle der Gravitations sind aber identisch Null und die Energie ist gegeben durch

$$E_q = cq.$$

Die Reichweite wird hier nicht durch eine Exponentialfunktion eingeschränkt, man sagt diese beiden Wechselwirkungen haben eine unendliche Reichweite. Die Impulsdarstellung dieser Wechselwirkungen ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}_f | V_g | \vec{p}_i \rangle &= -G 4\pi \frac{m^2 \hbar^2}{q^2} \\ \langle \vec{p}_f | V_{em} | \vec{p}_i \rangle &= \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{e^2 \hbar^2}{q^2}.\end{aligned}\quad (2.168)$$

Dies erlaubt einen direkten Vergleich der Stärke der Gravitation und der elektromagnetischen Wechselwirkung. Wenn man für die Ladung  $e$  und die Masse  $m$  die Werte für ein Proton einsetzt, ergibt sich

$$\left| \frac{V_{em}}{V_g} \right| = \frac{e^2}{4\pi G \varepsilon_0 m^2} \approx 10^{36}.\quad (2.169)$$

Für den Vergleich der anderen Wechselwirkungen müssen wir einen Wert für den Impulstransfer annehmen. Für den Fall

$$q^2 = m_p^2 c^2,$$

mit  $m_p$  der Masse des Protons ergibt sich

$$\begin{aligned}\left| \frac{V_s}{V_{em}} \right| &= \frac{g_s^2 4\pi \varepsilon_0}{e^2} \frac{q^2}{q^2 + m_\pi^2 c^2} \approx 2 \times 10^3 \\ \left| \frac{V_{em}}{V_w} \right| &= \frac{e^2}{g_w^2 4\pi \varepsilon_0} \frac{q^2 + m_W^2 c^2}{q^2} \approx 1 \times 10^4.\end{aligned}\quad (2.170)$$

Insgesamt ergibt sich also ein Vergleich von

$$|V_s| > |V_{em}| > |V_w| \gg |V_g|.\quad (2.171)$$

### 2.10.2 Der Zoo der Elementarteilchen

Die Elementarteilchen unterscheidet man nun zunächst einmal danach, ob sie der starken Wechselwirkung unterliegen oder nicht. Die Teilchen, die die starke Wechselwirkung spüren, bezeichnet man als **Hadronen**. Im Bereich der Hadronen unterscheidet man zwischen Hadronen mit halbzahligem Spin, das sind also fermionische Hadronen, die den Namen **Baryonen** tragen, und bosonische Hadronen, die man als **Mesonen** bezeichnet. Bisher haben wir aus dem Bereich der Baryonen die Protonen und Neutronen kennengelernt. Aus dem Bereich der Mesonen wurden die Pionen genannt, die in einer positiv geladenen Form,  $\pi^+$ , in einer negativ geladenen Form  $\pi^-$  und einer elektrisch neutralen Form  $\pi^0$ , vorkommen.

Wie kann man diese Elementarteilchen und eventuell auch noch weitere Elementarteilchen experimentell nachweisen. Ein klassisches Instrument zur Identifikation von geladenen Elementarteilchen sind Blaskammern, in denen die Teilchen durch die Spuren, die sie in Form von kleinen Bläschen in einer Flüssigkeit, oder auch durch die Ausbildung von Tröpfchen in einer überkritischen Gasphase, hinterlassen. Die Tröpfchen oder Blasen bilden sich dadurch, dass die zu untersuchenden Teilchen Atome des Mediums, das sie



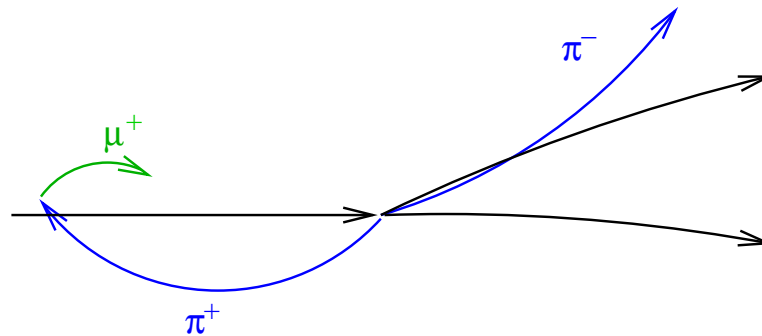


Abbildung 2.35: Skizze eines charakteristischen Blasenkammerbildes der Reaktion  $p + p \rightarrow p + p + \pi^+ + \pi^-$ .

durchlaufen, ionisieren und diese ionisierten Teilchen Kondensationskeime für Tröpfchen oder Bläschen bilden. Eine Fotografie dieser Spuren, nach Möglichkeit aus verschiedenen Richtungen, erlaubt die Identifikation dieser Spuren.

Diese Blasenkammern wurden vor allen Dingen in den sechziger Jahren des 20. Jahrhunderts sehr intensiv genutzt. Heute werden sie im Allgemeinen ersetzt durch Detektorsysteme mit guter Orts- und Zeitauflösung, so dass die Spuren der Teilchen durch eine Analyse rekonstruiert werden können. Bringt man diese Detektoren in einem Magnetfeld unter, so kann man aus der Krümmung der Bahnen Informationen über die Ladung und die Impulse der Teilchen extrahieren.

Ein charakteristisches Beispiel für eine Blasenkammeraufnahme ist in Abb. 2.35 skizziert. Ein Proton mit einem Impuls von  $12 \text{ GeV}/c$  kommt von links und trifft ein ruhendes Proton in einer Wasserstoffblasenkammer. Das ruhende Proton wird beschleunigt und verlässt die Blasenkammer zusammen mit dem ursprünglichen Projektil. An der Wechselwirkungsstelle werden aber auch ein  $\pi^+$  und ein  $\pi^-$  erzeugt. Wegen der anderen Ladung hat die Bahn des  $\pi^-$  im Magnetfeld eine andere Krümmung als die der anderen Teilchen. Das  $\pi^+$  zerfällt noch in der Blasenkammer gemäß

$$\pi^+ \longrightarrow \mu^+ \nu_\mu .$$

Dies sieht am Knick der Bahn des  $\pi^+$  (die farbliche Unterscheidung der Bahnen ist nur in der Skizze möglich), das myonische Neutrino,  $\nu_\mu$ , ist elektrisch neutral und hinterlässt keine Spuren in der Blasenkammer.

Die geladenen Pionen haben eine mittlere Lebensdauer  $\tau$  von  $2.6 \cdot 10^{-8}$  Sekunden. In dieser Zeit können sie also, wenn sie sich mit annähernd Lichtgeschwindigkeit bewegen, eine Strecke von etwa 8 Metern zurücklegen. Spuren solcher Teilchen sind also gut in einer Blasenkammer oder einem modernen Detektorsystem zu beobachten. Wie kann man aber Teilchen entdecken, die eine erheblich kürzere Lebensdauer besitzen, so dass man Spuren nicht mehr auflösen kann?

In diesem Fall identifiziert man die Teilchen, die in einer Zwischenstufe existent waren, dadurch, dass man untersucht, bei welchen Energie- und Impulsverteilungen von möglichen Folgeprodukten der intermediären Teilchen signifikante Maxima zu sehen sind. Als ein einfaches Beispiel hierzu betrachten wir die Reaktion

$$e^+ + e^- \longrightarrow \pi^+ + \pi^- ,$$

bei der hochenergetische Positronen und Elektronen (mit entgegengesetztem Impuls, so dass der Gesamtimpuls gleich Null ist) sich gegenseitig vernichten und aus der zur Verfügung stehenden Energie ein Paar von Pionen ( $\pi^+$  und  $\pi^-$ , so dass die Gesamtladung erhalten bleibt) entstehen. Diese Reaktion zeigt ein ausgeprägtes Maximum bei einer Gesamtenergie von Positron und Elektron von 770 MeV. Man kann dies interpretieren als eine Zweistufenreaktion, bei der in einem Zwischenschritt ein ungeladenes Teilchen  $\rho^0$  ein Rho Mesonenstand ist

$$e^+ + e^- \longrightarrow \rho^0 \longrightarrow \pi^+ + \pi^- .$$

Wenn also die Energie der Positronen und Elektronen gerade der Ruheenergie des Rho Mesons,  $m_\rho c^2$ , entspricht ist der Wirkungsquerschnitt für diese Reaktion besonders groß. Die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes von der zur Verfügung stehenden Energie  $\mathcal{E}$  wird durch die **Breit-Wigner Formel** beschrieben

$$\sigma(\mathcal{E}) = \mathcal{C} \frac{\Gamma_{ee}\Gamma_{2\pi}}{(\mathcal{E} - m_\rho c^2)^2 + \Gamma^2/4} \quad (2.172)$$

Hierbei bedeuten  $\Gamma_{ee}$  und  $\Gamma_{2\pi}$  die Wahrscheinlichkeiten (partiellen Breiten) für den Übergang  $\rho \leftrightarrow e^+e^-$  bzw  $\rho \leftrightarrow \pi^+\pi^-$  und  $\Gamma$  bezeichnet die Breite der Resonanz im Wirkungsquerschnitt. Diese Breite der Resonanz, beziehungsweise Unschärfe in der Energiebestimmung des Rho Mesons, ist über die Unschärferelation mit seiner mittleren Lebensdauer verknüpft

$$\Gamma\tau = \hbar . \quad (2.173)$$

Im Fall des Rho Mesons gilt

$$m_\rho c^2 = 770 \text{ MeV} \quad \text{und} \quad \Gamma = 153 \text{ MeV} ,$$

was also einer Lebensdauer von

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{\hbar c}{c\Gamma} \\ &= \frac{197.3 \text{ MeV fm}}{c \cdot 153 \text{ MeV}} \\ &= \frac{1}{c} 1.3 \text{ fm} \\ &= 4.5 \times 10^{-23} \text{ s} . \end{aligned} \quad (2.174)$$

Die Lebensdauer ist also so extrem kurz, dass das  $\rho$  mit Lichtgeschwindigkeit gerade mal eine Strecke von 1.3 fm zurücklegen könnte. Entsprechende Spuren sind natürlich nicht in einer Blaskammer aufzulösen. Das Rho Meson ist also nur über sein Folgeprodukt, ein  $\pi^+\pi^-$  Paar bei der entsprechenden Energie identifizierbar.

Ein Beispiel für eine schärfere Resonanz im Wirkungsquerschnitt der  $e^+e^- \rightarrow$  Hadronen Reaktion, ist das  $\omega$  Meson, das sich bei der Reaktion

$$e^+ + e^- \longrightarrow \pi^+ + \pi^0 + \pi^- ,$$

bemerkbar macht. Die experimentellen Daten, gemessen am Speichering ACO in Orsay<sup>9</sup>, werden sehr gut durch eine Breit Wigner Verteilung mit einer Masse und Breite für das  $\omega$  Meson von

$$m_\omega c^2 = 783 \text{ MeV} \quad \text{und} \quad \Gamma = 8.5 \text{ MeV} ,$$

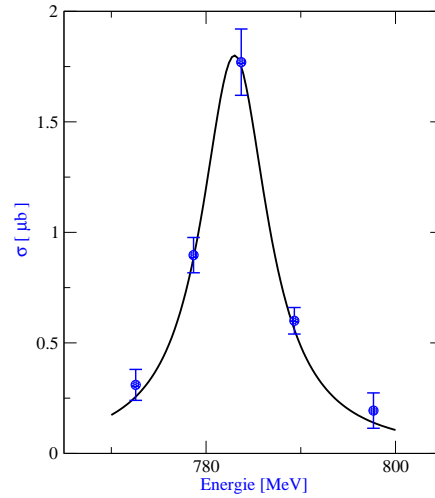
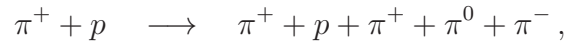


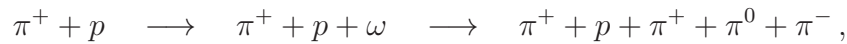
Abbildung 2.36: Wirkungsquerschnitt  $e^+ + e^- \rightarrow \pi^+ + \pi^0 + \pi^-$ .

wiedergegeben (siehe Abb. 2.36).

Nicht alle kurzlebigen Teilchen können ihre Existenz in so einfacher Form nachweisen. Als weiteres Beispiel betrachten wir die Reaktion



und fragen uns ob nicht ein Teil dieses Wirkungsquerschnittes über die Reaktionskette



verläuft. Beim Zerfall des  $\omega$  Mesons gelten Energie und Impulssatz. Dies bedeutet, dass wir bei der Analyse der Experimente jeweils ein Tripel von  $\pi^+ + \pi^0 + \pi^-$  herausgreifen, deren Gesamtenergie  $E_{123}$  und Gesamtimpuls  $\vec{p}_{123}$  bestimmen und daraus über die relativistische Energie Impulsbeziehung

$$E_{123}^2 = \vec{p}_{123}^2 c^2 + m_{eff}^2 c^4$$

eine effektive Masse zu bestimmen. Gibt es ein Maximum der so bestimmten Massen bei  $m_{eff} = m_\omega$  so kann man daraus schliessen, dass ein entsprechender Anteil der Reaktionen über die Bildung eines intermediären  $\omega$  Mesons verlaufen ist.

Mit der Analyse von diesen und ähnlichen Reaktionen wurden im Laufe der Jahre immer mehr Resonanzen entdeckt, die man verschiedenen Mesonen zuordnen konnte.

Ähnliches gilt aber auch für die Beobachtung von resonanzartigen Strukturen, die man kurzlebigen Baryonen zuordnet. Analysiert man z.B. den Wirkungsquerschnitt von  $\pi^+ + p$  Reaktionen als Funktion der Energie und des Impulses des Gesamtsystems, so ergibt sich ein ausgeprägtes Maximum bei einer effektiven Masse von  $1232 \text{ MeV}/c^2$ . Diese Resonanz trägt einen halbzahligen Gesamtspin (Spin des Protons,  $1/2$ , plus Spin des Pions,  $0$ , plus möglicher Bahndrehimpuls der Relativbewegung,  $l=0,1,\dots$  ergibt insgesamt einen halbzahligen Drehimpuls) ist also ein fermionisches Hadron und damit ein Baryon. Genauere Analysen ordnen dieser Resonanz den Spin  $3/2$  zu. Die Ladung ist doppelt positiv. Man bezeichnet dieses Elementarteilchen als  $\Delta^{++}$  Resonanz.

<sup>9</sup>siehe D.Benaksas et al. Phys. Lett. 42B (1972) 507.

		Ladung [e]	Masse [MeV/c <sup>2</sup> ]
Elektron	$e^-$	-1	0.511
Neutrino	$\nu_e$	0	$< 3 \cdot 10^{-6}$
Myon	$\mu^-$	-1	105.7
$\mu$ Neutrino	$\nu_\mu$	0	$< 0.19$
Tau Lepton	$\tau^-$	-1	1777
$\tau$ Neutrino	$\tau^-$	0	$< 18.2$

Tabelle 2.2: Leptonen und ihre Eigenschaften

Auch im Fall der Baryonen lieferten die verschiedenen Experimente eine große Zahl von kurzlebigen Elementarteilchen. Man sprach deshalb von dem Elementarteilchenzoo der Hadronen und versuchte, wie in einem richtigen Zoo, eine Ordnung in diese Vielzahl der Hadronen zu bringen.

Dabei war das Quarkmodell besonders erfolgreich. Die Quarks sind Fermionen mit dem Spin 1/2 und besitzen Ladungen von 2/3 oder -1/3 der Elementarladung. Drei Quarks werden zusammengesetzt zu einem Baryon, während die Mesonen aus einem Quark und einem Antiquark aufgebaut sind. Wir werden weitere Einzelheiten des Quark Modells im nächsten Unterabschnitt besprechen.

Die Quarks wurden also zunächst nur eingeführt um eine Ordnungsstruktur in den Elementarteilchenzoo zu bringen und es bestand lange in Zweifel, ob die Quarks existent sind oder nur rein hypothetische Teilchen. Eine deutliche Antwort auf diese Frage brachten Streuexperimente von hochenergetischen Elektronen an Protonen. Die Energie der Elektronen muss so hoch sein, dass man Impulstransfer erzeugt, mit denen man die mögliche Substruktur der Protonen auflösen kann (siehe Diskussion der Streuexperimente im Abschnitt 2.1). Dabei zeigte sich, dass man diese Streuexperimente in der Tat sehr gut dadurch beschreiben kann, dass man sich das Proton vorstellt als ein System aus punktförmigen Teilchen, die gerade die Ladungen der Quarks tragen.

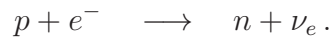
Dadurch wurde also das Quarkmodell eindrucksvoll bestätigt. Allerdings ist es bis heute noch nicht gelungen einzelne Quarks mit ihrer drittelzahligen Ladung zu isolieren. Es hält sich deshalb die Frage, welcher Mechanismus ist dafür verantwortlich, dass die Quarks immer nur im Dreierpack oder als Quark - Antiquark auftreten. Diese Frage nach der Ursache des **Quark Confinement** ist eine der zentralen Fragen der modernen Elementarteilchenphysik.

### 2.10.3 Heutiges Bild der Elementarteilchen

In diesem Abschnitt wollen wir den aktuellen Stand des Standardmodells der Elementarteilchenphysik vorstellen. Wir haben bereits angedeutet, dass die Hadronen also die Baryonen und Mesonen, die die starke Wechselwirkung spüren aus Quarks zusammengesetzt sind. Wir werden uns diesem Quarkmodell der Hadronen weiter unten zuwenden. Zunächst betrachten wir die Fermionen, die die starke Wechselwirkung nicht spüren, die **Leptonen**.

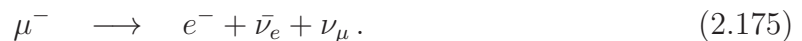
Das uns bekannteste Lepton ist das Elektron. Es wechselwirkt mit seiner Umgebung über die elektromagnetische Wechselwirkung, die Gravitation mit einer Ruhemasse von 0.511

MeV/c<sup>2</sup> und die schwache Wechselwirkung z.B. durch die Reaktion des Elektroneneinfangs



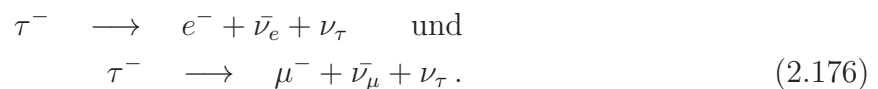
Bei dieser Reaktion, so wie bei den anderen Reaktionen, die durch die schwache Wechselwirkung beschrieben werden, haben wir gesehen, dass wir dem Elektron ein Neutrino zuordnen müssen, das Elektron Neutrino  $\nu_e$ . Dieses Neutrino reagiert also mit der Umwelt über die schwache Wechselwirkung. Es ist elektrisch neutral und deshalb unempfindlich in Bezug auf die elektromagnetische Wechselwirkung. Eine endgültige Aussage über die Masse können wir noch nicht machen, deshalb enthält die Tabelle 2.2 an dieser Stelle auch nur eine obere Schranke.

Das Myon ist so etwas wie eine schwerere Kopie des Elektrons. Es hat die gleichen Eigenschaften wie das Elektron und unterscheidet sich von diesem nur durch die Masse, die etwa 200 mal so groß ist. Wegen dieser größeren Ruhemasse zerfällt das Myon mit einer Lebenszeit von  $\tau = 2.2 \cdot 10^{-6}$  s nach dem Schema



Bei diesem wie allen anderen uns bekannten Prozessen bleibt die Leptonenzahl erhalten: Auf der linken Seite von (2.175) ist die Leptonenzahl natürlich gleich 1 für die Leptonen, die zur **myonischen Leptonenfamilie** gehören. Auch auf der rechten Seite der Reaktion treffen wir genau ein Mitglied dieser Familie, das  $\nu_\mu$ . Die Anzahl der Leptonen, die zur **elektronischen Leptonenfamilie** gehören ist auf beiden Seiten identisch Null. Für die linke Seite von (2.175) ist dies trivial, für die rechte Seite ergibt sich diese Null aus der Summe von +1 für das Elektron,  $e^-$ , und -1 für das Antineutrino  $\bar{\nu}_e$ . Die Reaktion (2.175) ist also ein typisches Beispiel für das Gesetz von der **Erhaltung der Leptonenzahl**.

Zur dritten Familie der Leptonen gehören das  $\tau^-$  als schwerste Kopie des Elektrons mit einer Masse von 1.777 GeV/c<sup>2</sup> und das zugehörige Neutrino  $\nu_\tau$ . Die Lebenszeit des  $\tau^-$  beträgt  $290 \times 10^{-15}$  s. Rein leptonisch zerfällt es mit etwa gleich großer Wahrscheinlichkeit über die Reaktionen



Wegen der großen Masse des  $\tau$  Leptons, stehen aber auch Zerfallskanäle offen, bei denen Hadronen in der Form von Mesonen entstehen.

Neben den in der Tabelle aufgelisteten Leptonen existieren natürlich auch noch die zugehörigen Antiteilchen: das Positron ( $e^+$ ) die ebenfalls positiv geladenen  $\mu^+$  und  $\tau^+$  so wie die jeweils zugehörigen Antineutrinos.

Natürlich stellt sich die Frage, ob es noch weitere Leptonenfamilien gibt. Aus experimentellen Daten kann man heute mit großer Sicherheit ausschließen, dass es weitere "leichte Neutrinos" gibt und ebenso sollte es keine weiteren Leptonen mit einer Masse kleiner als etwa 100 GeV/c<sup>2</sup> geben. Das gegenwärtige Standardmodell sieht die in Tabelle 2.2 dargestellten 3 Leptonenfamilien vor.

Die stark wechselwirkenden Teilchen, die Hadronen, sind aus Quarks und Antiquarks zusammengesetzt, die mit ihren Eigenschaften in Tabelle 2.3 aufgelistet sind. Dabei besteht

		Ladung [e]	Masse [MeV/c <sup>2</sup> ]
Up	<i>u</i>	2/3	≈ 1
Down	<i>d</i>	-1/3	≈ 3
Charm	<i>c</i>	2/3	1200
Strange	<i>s</i>	-1/3	100
Top	<i>t</i>	2/3	174000
Bottom	<i>b</i>	-1/3	4000

Tabelle 2.3: Quarks und ihre Eigenschaften

alle Baryonen und Mesonen, die wir bisher diskutiert haben aus den Quarks mit dem **Flavor** Up und Down und deren Antiteilchen. So besteht das Proton in einfachster Darstellung aus zwei Up und einem Down Quark mit der Gesamtladung:  $2 \cdot 2/3 - 1/3 = 1$ , und das Neutron aus zwei Down und einem Up Quark (Ladung =  $2/3 - 2 \cdot 1/3 = 0$ ):

$$\begin{aligned} p &\sim uud \\ n &\sim udd. \end{aligned} \quad (2.177)$$

Beim  $\beta$ -Zerfall des Neutrons wird also ein Down in ein Up Quark umgewandelt und ein  $W^-$  Boson mit negativer Ladung emittiert. Dieses  $W^-$  Boson sorgt auf der leptonischen Seite für die Erzeugung eines Elektrons und eines Antineutrinos.

Als ein weiteres Beispiel betrachten wir die oben erwähnte  $\Delta^{++}$  Resonanz. Sie ist doppelt positiv geladen und daher aus 3 Up Quarks aufgebaut. Außerdem ist der Spin dieser  $\Delta$  Resonanz gleich  $3/2$ , d.h. die Spins der 3 Quarks stehen alle parallel zueinander. Dies bringt uns in Konflikt mit dem Pauliprinzip, das ja den Aufenthalt von identischen Fermionen, den *u* Quarks, mit gleicher Spinprojektion untersagt. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit, eine neue Eigenschaft der Quarks, die **Farbladung** einzuführen, die drei Werte annehmen kann. Man kann diese Farben z.B. mit rot, gelb und blau bezeichnen. Die 3 Up Quarks, die das  $\Delta^{++}$  Teilchen bilden unterscheiden sich also durch ihre Werte für die Farbladung.

Diese Farbladung ist das Spezifikum der stark wechselwirkenden Hadronen. Die starke Wechselwirkung ist also direkt mit dieser Farbladung verknüpft. Die Theorie dieser Wechselwirkung ist die **Quantenchromodynamik, QCD**. Mit relativ einfachen Mitteln kann man aus der QCD Vorhersagen für die Quarks bei Prozessen mit hohen Impulstransfers herleiten und im Vergleich mit Experimenten verifizieren. Sehr viel schwieriger sind Berechnungen im Rahmen der QCD bei niedrigen Energien und Impulsen. Die Physiker sind aber davon überzeugt, dass die QCD auch die Zusammensetzung der Hadronen aus den Quarks richtig beschreibt.

Allerdings hat man in diesem Bereich noch keine wirklich zuverlässigen Lösungen. So ist die Frage, warum Quarks immer nur in farblosen Kombinationen auftreten, die Frage nach dem **Farb-Konfinement** noch nicht restlos geklärt.

Baryonen sind nach diesem Konzept ein System aus 3 Quarks mit den 3 unterschiedlichen Farben, die sich insgesamt zur Farbe weiß addieren oder kompensieren. Mesonen bestehen aus einem Quark mit einer Farbe und dem Antiquark mit der entsprechenden Antifarbe, so dass insgesamt auch wieder ein farbloses Objekt entsteht.

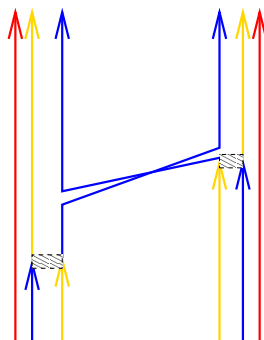


Abbildung 2.37: *Mesonenaustausch zwischen 2 Baryonen im Quarkmodell*

Die Wechselwirkung zwischen den Quarks wird durch den Austausch von **Gluonen** vermittelt. Diese Gluonen tragen selbst Farbladung, sie können also miteinander wechselwirken. Dies ist die wesentliche Komplikation der QCD im Vergleich zur Quantenelektrodynamik, bei der ja die Photonen elektrisch neutral sind.

Der Austausch von Mesonen, wie wir ihn im vorhergehenden Unterabschnitt diskutiert haben, stellt sich im Quarkmodell dar, wie das im linken Teil der Abb. 2.37 skizziert ist: Ausgetauscht werden ein Quark und ein entgegenkommendes Quark, ein Antiquark, die schraffierten Flächen bezeichnen den Austausch von Gluonen.

Neben den Hadronen aus den “gewöhnlichen” Up und Down Quarks gibt es Hadronen mit schweren Quarks, die dann auch eine entsprechend größere Masse besitzen.





# Kapitel 3

## Festkörperphysik

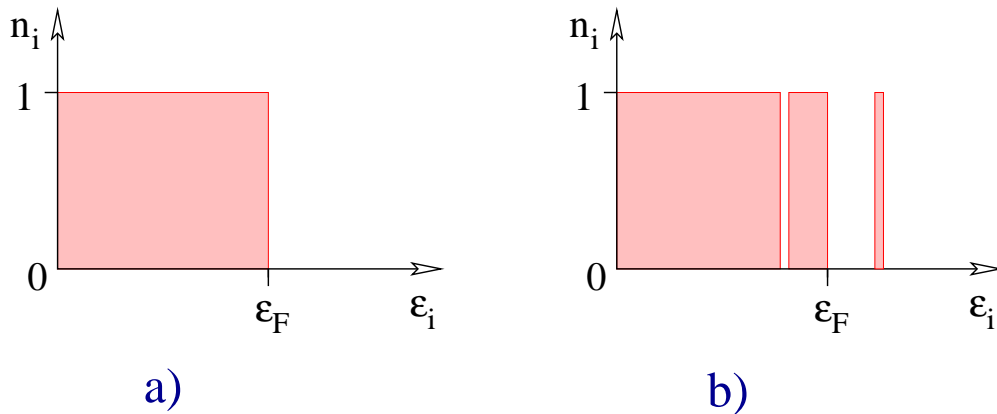


Abbildung 3.1: Besetzungszahlen eines Fermigas im Grundzustand (a)) und für eine angeregte Konfiguration (b)).

### 3.3 Fermi Dirac Statistik

In diesem Abschnitt wollen wir die thermodynamischen Eigenschaften eines Gases aus Fermionen bei einer Temperatur  $T$  betrachten. Nach der Definition eines Gases besteht auch ein Fermigas aus Teilchen, eben den Fermionen, deren Wechselwirkung untereinander vernachlässigbar ist. Die Energie eines solchen Fermigas berechnet sich also dadurch, dass man die Einteilchenenergien der einzelnen Fermionen aufaddiert. Anders ausgedrückt: Man bestimmt die möglichen Einteilchenenergien des Systems  $\varepsilon_i$  und die Besetzungszahl des entsprechenden Einteilchenniveaus  $n_i$ .

Ist das System aus  $N$  Fermionen in seinem Grundzustand, so werden gerade die  $N$  Niveaus mit den niedrigsten Einteilchenenergien einfach besetzt sein. Eine Doppelbesetzung ist ja durch das Pauli Prinzip verboten. Ordnet man die Einteilchenniveaus entsprechend ihrer Energie an, so sind im Grundzustand gerade alle Niveaus bis zur Fermienergie  $\varepsilon_F$  besetzt. Die Energie dieses Grundzustandes berechnet sich gemäß

$$\begin{aligned} E_0 &= \sum_i n_i \varepsilon_i \\ &= \sum_{i=1}^F \varepsilon_i. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Für die Besetzungszahlen der Niveaus gilt also

$$n_i = \begin{cases} 1 & \text{für } i \leq F \\ 0 & \text{für } i > F \end{cases} \quad (3.2)$$

Diese Verteilung der Besetzungszahlen ist in Abb. 3.1 a) dargestellt. Auch die Energien der angeregten Zustände des Fermigas  $E_\alpha$  können in der Form der ersten Zeile von (3.1) berechnet werden. Lediglich die Verteilung der Besetzungszahlen  $n_i$  ist bei einer solchen angeregten Konfiguration anders, etwa so wie sie im Beispiel der Abb. 3.1 b) dargestellt ist.

Bringt man das Fermigas in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$ , so dass Energie ausgetauscht werden kann zwischen dem Wärmebad und dem Fermigas, so ist die

Energie des Fermigas nicht mehr fest definiert. Vielmehr wird ein Zustand des Fermigas der Energie  $E_\alpha$  realisiert sein mit einer Wahrscheinlichkeit  $\mathcal{P}(E_\alpha)$ , die entsprechend der Boltzmann Verteilung gegeben ist durch

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(E_\alpha) &= \mathcal{C}e^{-E_\alpha/k_B T} \\ &= \mathcal{C}e^{-\beta E_\alpha}.\end{aligned}\tag{3.3}$$

Dabei steht  $k_B$  für die Boltzmann Konstante und wir haben die übliche Abkürzung für die inverse Temperatur eingeführt mit

$$\beta = \frac{1}{k_B T}.\tag{3.4}$$

Die Normierungskonstante  $\mathcal{C}$  in (3.3) ergibt sich aus der Forderung, dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten  $\mathcal{P}(E_\alpha)$ , summiert über alle Zustände des Systems  $\alpha$  den Wert 1 annehmen muss

$$1 = \sum_\alpha \mathcal{P}(E_\alpha) = \mathcal{C} \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha}.\tag{3.5}$$

Definieren wir also die Zustandssumme durch

$$Z = \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha},\tag{3.6}$$

so gilt

$$\mathcal{C} = \frac{1}{Z},$$

und

$$\mathcal{P}(E_\alpha) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E_\alpha}.\tag{3.7}$$

In der Regel ist es praktisch unmöglich die Zustandssumme  $Z$  aus (3.6) für ein makroskopisches System zu berechnen, die Zahl der Summanden ist schlicht zu groß. Dies wird uns durch die folgende Abschätzung verdeutlicht.

Nehmen wir einmal an, dass es  $k$  unterschiedliche Einteilchenniveaus gibt mit Einteilchenenergien  $\varepsilon_i$ . Wir wollen nun abschätzen wie viele Konfigurationen es für  $N$  Fermionen gibt, d.h. wie viele Möglichkeiten diese  $N$  Fermionen auf die  $k$  Zustände zu verteilen.

Für  $N = 1$  ergeben sich  $k$  Möglichkeiten: das Fermion kann jedes dieser Niveaus besetzen, was jeweils einer anderen Konfiguration entspricht. Für  $N = 2$  können wir das erste Fermion in jedes der  $k$  Niveaus plazieren, so dass für das zweite Fermion jeweils  $(k - 1)$  Möglichkeiten offenstehen. Auf den ersten Blick scheint es also  $k(k - 1)$  Konfigurationen für  $N = 2$  zu geben. Dabei müssen wir aber berücksichtigen, dass die Fermionen ununterscheidbar sind. Dies bedeutet, dass die Konfiguration bei der Teilchen 1 im Niveau  $i = 15$  und Teilchen 2 im Niveau  $i = 23$  untergebracht ist, identisch ist mit der Konfiguration bei der sich Teilchen 2 im Niveau  $i = 15$  und Teilchen 1 im Niveau  $i = 23$  befindet. Die Gesamtzahl der Konfigurationen beträgt also für  $N = 2$ :

$$\frac{k(k - 1)}{2}.$$

Mit Hilfe der vollständigen Induktion über  $N$  kann man zeigen, dass die Zahl der Konfigurationen für  $N$  Teilchen in  $k$  Zustände den Wert

$$\binom{k}{N} = \frac{k(k - 1) \dots (k - N + 1)}{N!},\tag{3.8}$$

annimmt, eine Zahl die durch den sogenannten **Binomial Koeffizienten**  $k$  über  $N$  gegeben ist. Diese Zahl wächst also proportional zu  $k^N$  an. Damit wird die Zahl der Summanden in der Zustandssumme bei Teilchenzahlen  $N$  von der Größe der Loschmidtschen Zahl so groß, dass selbst das Alter des Universums nicht ausreichen würde, dass ein moderner Computer eine solche Summe ausführen könnte.

Es ist aber sehr attraktiv diese Zustandssumme auszurechnen. Mit ihr kann man nämlich auch verschiedene Mittelwerte des Systems direkt berechnen. Uns interessiert z.B. mit welcher statistischen Wahrscheinlichkeit eines der Niveaus  $s$  mit der Einteilchenenergie  $\varepsilon_s$  besetzt ist, wenn sich das Fermigas in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$  befindet. Dieser Mittelwert der Besetzungswahrscheinlichkeit  $\langle n_s \rangle$ , berechnet sich natürlich dadurch, dass wir über alle Konfigurationen des Systems summieren, bei jeder Konfiguration die Besetzungszahl dieses Niveaus  $n_s$  bestimmen und diese Besetzungszahl mit der Wahrscheinlichkeit, dass diese Konfiguration eingenommen wird multiplizieren. Es gilt also:

$$\begin{aligned} \langle n_s \rangle &= \sum_{\alpha} n_s \mathcal{P}(E_{\alpha}) \\ &= \sum_{\alpha} n_s \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\alpha}} \\ &= \frac{\sum_{[n_i, N]} n_s e^{-\beta(n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots)}}{\sum_{[n_i, N]} e^{-\beta(n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots)}}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Bei dem Übergang zur dritten Zeile haben wir die Summe über alle Konfigurationen  $\alpha$  dargestellt durch eine Summe, bei der die Besetzungszahlen aller Niveaus  $i$  die Werte  $n_i = 0$  oder  $n_i = 1$  annehmen kann. Dabei sind aber nur solche Kombinationen zu berücksichtigen, bei der die gesamte Fermionenzahl gleich  $N$  ist also gilt:

$$\sum_i n_i = N. \quad (3.10)$$

Dies soll durch das Symbol  $[n_i, N]$  unter dem Summenzeichen in (3.9) angedeutet werden. Die aktuelle Besetzungszahl  $n_s$  bei einer gegebenen Konfiguration kann man formal berechnen durch die Ableitung

$$n_s = \left( -\frac{1}{\beta} \right) \frac{d}{d\varepsilon_s} e^{-\beta(n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots)}.$$

Setzt man diesen Ausdruck in (3.9) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle n_s \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{[n_i, N]} \left( -\frac{1}{\beta} \right) \frac{d}{d\varepsilon_s} e^{-\beta(n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots)} \\ &= \left( -\frac{1}{\beta} \right) \frac{1}{Z} \frac{d}{d\varepsilon_s} Z \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{d \ln Z}{d\varepsilon_s}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Aus der Ableitung des Logarithmus der Zustandssumme ergibt sich also direkt ein Ausdruck für die mittlere Besetzungszahl  $\langle n_s \rangle$ . Kennt man diese mittleren Besetzungszahlen, so können auch andere statistische Mittelwerte berechnet werden, wie z.B. der

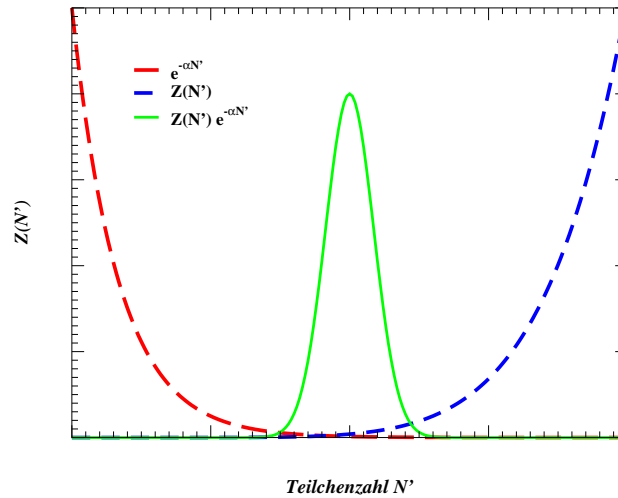


Abbildung 3.2: Zustandssumme als Funktion der Teilchenzahl, siehe Diskussion im Text

Mittelwert für die Energie des Systems

$$\langle E \rangle = \sum_i \langle n_i \rangle \varepsilon_i.$$

Das Problem ist aber nach wie vor die Berechnung der Zustandssumme für eine große Zahl von Fermionen  $N$ . Dieses Problem kann man durch einen Trick lösen, in dem man sich einem Problem zuwendet, das auf dem ersten Blick noch schwieriger ist: Wir betrachten nämlich ein System von Fermionen, bei denen die Teilchenzahl  $N$  nicht fest ist sondern flexibel. Dies bedeutet natürlich, dass die Zahl der Summanden in der Zustandssumme noch größer wird. Wir müssen ja nicht nur die Konfigurationen für eine Teilchenzahl  $N$  aufsummieren sondern die Konfigurationen für alle möglichen Teilchenzahlen  $N'$ . Wie wir oben in (3.8) gesehen haben, wächst die Zahl der Summanden und, da alle Summanden positiv sind, damit auch der Wert für die Zustandssumme proportional zu  $k^{N'}$  mit der Teilchenzahl  $N'$  an. Dies ist in der Abb. 3.2 skizziert.

Multipliziert man die jeweiligen Zustandssummen  $Z(N')$  mit einem Exponentialfaktor

$$Z(N') e^{-\alpha N'},$$

so sorgt dieser Exponentialfaktor dafür, dass das Produkt für große Werte von  $N'$  wieder kleiner wird. Der Parameter  $\alpha$  kann dabei so gewählt werden, dass das Maximum dieser Produktfunktion genau bei einer anvisierten Teilchenzahl  $N' = N$  auftritt. Damit definieren wir die Zustandssumme einer **Großkanonischen Gesamtheit** durch

$$\mathcal{Z} = \sum_{N'} Z(N') e^{-\alpha N'}. \quad (3.12)$$

Für große Teilchenzahlen  $N'$  ist der Bereich von Teilchenzahlen, in dem das Produkt  $Z(N') e^{-\alpha N'}$  signifikant von Null verschieden ist sehr klein verglichen zur Gesamtteilchenzahl<sup>1</sup>. Deshalb kann man also annähern

$$\mathcal{Z} \approx Z(N) e^{-\alpha N} \Delta N. \quad (3.13)$$

<sup>1</sup>Diese Eigenschaft der Großkanonischen Zustandssumme wird im Detail noch in der Statistischen Mechanik diskutiert werden.

Der konstante Faktor  $\Delta N$  spielt bei Berechnungen nach (3.11) keine Rolle und wir können schreiben

$$\ln \mathcal{Z} \sim \ln Z(N) - \alpha N ,$$

beziehungsweise

$$\ln Z(N) \sim \ln \mathcal{Z} + \alpha N , \quad (3.14)$$

wobei der Parameter  $\alpha$  so gewählt werden muss, dass die mittlere Teilchenzahl in der Großkanonischen Zustandssumme  $\mathcal{Z}$  gleich der gewünschten Teilchenzahl  $N$  ist. Die Berechnung der Großkanonischen Zustandssumme wird sich nun als relativ einfach erweisen. Nach (3.12) gilt ja

$$\mathcal{Z} = \sum_{n_i} e^{-\beta(n_1\varepsilon_1+n_2\varepsilon_2+\dots)} e^{-\alpha(n_1+n_2+\dots)} . \quad (3.15)$$

Da keine feste Teilchenzahl vorgegeben ist, haben wir hier eine Summe über alle Kombinationen von  $n_i$  ohne die Einschränkung (3.10). Definieren wir außerdem

$$\alpha = \frac{-\mu}{k_B T} = -\beta\mu , \quad (3.16)$$

so kann man (3.15) umschreiben in

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{n_i} e^{\beta(n_1(\mu-\varepsilon_1)+n_2(\mu-\varepsilon_2)+\dots)} \\ &= \left( \sum_{n_1} e^{\beta n_1(\mu-\varepsilon_1)} \right) \left( \sum_{n_2} e^{\beta n_2(\mu-\varepsilon_2)} \right) \dots \\ &= \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_1)} \right) \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_2)} \right) \dots \end{aligned} \quad (3.17)$$

Damit ergibt sich für den Logarithmus der Großkanonischen Zustandssumme

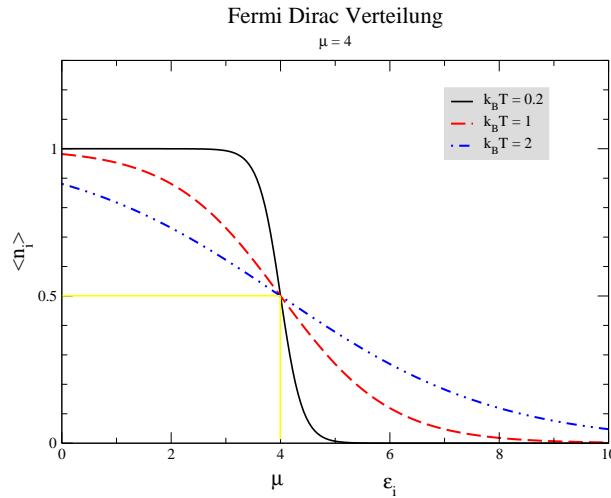
$$\begin{aligned} \ln \mathcal{Z} &= \ln \left( \prod_i \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \right) \right) \\ &= \sum_i \ln \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \right) . \end{aligned} \quad (3.18)$$

Mit (3.14) ergibt sich also

$$\ln Z(N) = -\beta\mu N + \sum_i \ln \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \right) , \quad (3.19)$$

und die mittlere Besetzungszahl  $\langle n_s \rangle$  berechnet sich nach (3.11)

$$\begin{aligned} \langle n_s \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{d}{d\varepsilon_s} \left( \sum_i \ln \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \right) \right) \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{d}{d\varepsilon_s} \ln \left( 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_s)} \right) \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{(-\beta) e^{\beta(\mu-\varepsilon_s)}}{1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_s)}} \\ &= \frac{1}{e^{-\beta(\mu-\varepsilon_s)} + 1} . \end{aligned} \quad (3.20)$$

Abbildung 3.3: *Fermi Dirac Verteilung bei verschiedenen Temperaturen*

Ergebnisse für die Fermi Dirac Verteilung der Besetzungszahlen als Funktion der Einteilchenenergie  $\varepsilon_s$  sind in Abb. 3.3 dargestellt. Dabei wurde für den Parameter  $\mu$  ein Wert von  $\mu = 4$  festgehalten, während für die Temperaturen verschiedene Werte betrachtet werden.

Im Fall  $\varepsilon = \mu$  liefert die Fermi Dirac Verteilung

$$\langle n_s \rangle = \frac{1}{e^0 + 1} = \frac{1}{2},$$

also gerade den Wert  $1/2$  unabhängig von der Temperatur. Im Grenzfall sehr kleiner Werte für  $\varepsilon$ , so dass  $\mu - \varepsilon$  sehr groß ist gegenüber  $k_B T$ , kann man den Beitrag der Exponentialfunktion im Nenner von (3.20) gegenüber der 1 vernachlässigen und erhält die Besetzungszahl  $\langle n_s \rangle = 1$ . Andererseits ergibt sich für sehr große Werte von  $\varepsilon$  eine Besetzungszahl, die gegen Null geht. In welchem Energieintervall die Besetzung von  $\langle n_s \rangle = 1$  über den Wert  $1/2$  bei  $\varepsilon = \mu$  auf  $\langle n_s \rangle = 0$  abfällt wird durch die Temperatur kontrolliert. Im Grenzfall  $T = 0$  beziehungsweise  $\beta = \infty$  geht die Verteilung über in die Stufenfunktion, in diesem Fall entspricht der Parameter  $\mu$  genau der Fermienergie.

Für Temperaturen  $T > 0$  muss der Parameter  $\mu$ , das **Chemische Potenzial** so bestimmt werden, dass der Mittelwert für die Teilchenzahl gerade den gewünschten Wert liefert. Für eine Teilchenzahldichte, das ist die Anzahl der Zustände pro Energieintervall  $g(\varepsilon)$  berechnet sich diese Teilchenzahl

$$\langle N \rangle = \int_0^\infty g(\varepsilon) n_s(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.21)$$

Für den Fall, dass die Teilchenzahldichte eine Konstante ist, ergibt sich daraus mit (3.20)

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= g \int_0^\infty \frac{1}{e^{-\beta(\mu-\varepsilon)} + 1} d\varepsilon \\ &= \frac{-g}{\beta} \int_0^\infty \frac{d}{d\varepsilon} \ln(1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}) d\varepsilon \\ &= \frac{-g}{\beta} \ln(1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}) \Big|_0^\infty \end{aligned}$$

$$= \frac{-g}{\beta} [\ln(1) - \ln(1 + e^{\beta\mu})] . \quad (3.22)$$

Bei der Herleitung des Ausdrucks für die mittlere Besetzungszahl  $\langle n_s \rangle$  in (3.20) haben wir die Großkanonische Zustandssumme betrachtet. Der Ausdruck für die Fermiverteilung kann aber auch noch auf eine andere Art hergeleitet werden. Dazu betrachten wir die Kanonische Zustandssumme  $Z(N)$  für eine feste Teilchenzahl  $N$  und zerlegen Sie in die Teilsumme über Konfigurationen, bei denen der Zustand  $s$  nicht besetzt ist und die Teilsumme, bei denen  $s$  besetzt ist. Damit schreiben wir

$$Z(N) = Z_s(N) + e^{-\beta\varepsilon_s} Z_s(N-1) . \quad (3.23)$$

Dabei bezeichnet  $Z_s(N)$  die Zustandssumme für ein System mit  $N$  Fermionen, bei denen der Zustand  $s$  mit der Einteilchenenergie  $\varepsilon_s$  ausgespart bleibt. Entsprechend steht  $Z_s(N-1)$  für die Zustandssumme eines Systems aus  $n-1$  Fermionen, bei denen ebenfalls der Zustand  $s$  ausgespart ist. Damit ergibt sich für die mittlere Besetzungszahl  $\langle n_s \rangle$

$$\langle n_s \rangle = \frac{0 Z_s(N) + 1 e^{-\beta\varepsilon_s} Z_s(N-1)}{Z(N)} \quad (3.24)$$

$$= \frac{e^{-\beta\varepsilon_s} Z_s(N-1)}{Z_s(N) + e^{-\beta\varepsilon_s} Z_s(N-1)} \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{\frac{Z_s(N)}{Z_s(N-1)} e^{\beta\varepsilon_s} + 1} . \quad (3.26)$$

Ersetzen wir in dieser letzten Zeile

$$\frac{Z_s(N)}{Z_s(N-1)} = \frac{Z_s(N)}{Z_s(N-1)} = e^{-\mu\beta} ,$$

wobei wir bei der ersten Gleichung annehmen, dass das Verhältnis der Zustandssummen unabhängig davon sein wird, ob ein weiterer Zustand  $s$  zu berücksichtigen ist oder nicht, und bei der zweiten Gleichung dieses Verhältnis über einen Parameter  $\mu$  parametrisieren, so ergibt sich

$$\langle n_s \rangle = \frac{1}{e^{-\beta(\mu-\varepsilon_s)} + 1} ,$$

also das identische Ergebnis wie in (3.20). Der Parameter  $\mu$  muss angepasst werden, so dass die Teilchenzahl nach (3.21) reproduziert wird.



## 3.6 Bloch Wellen

Das Thema dieses Abschnittes sind die stationären Lösungen der Schrödinger Gleichung für Teilchen, also im Fall der Festkörper Elektronen, die sich in einem periodischen Potenzial bewegen. Ein solches periodisches Potenzial ist dadurch gekennzeichnet, dass gilt

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}), \quad (3.27)$$

wobei  $\vec{R}$  ein Vektor des **Bravais Gitters** ist. Es gilt also für ganze Zahlen  $n_i$  und den Basisvektoren des Bravais Gitters  $\vec{a}_i$ :

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3. \quad (3.28)$$

Das **Bloch Theorem** besagt nun, dass sich die stationären Lösungen der Schrödinger Gleichung für die Bewegung eines Teilchens in einem solchen periodischen Potenzial darstellen lassen in der Form in der Form einer Wellenfunktion vom Typ

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_k(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad u_k(\vec{r} + \vec{R}) = u_k(\vec{r}). \quad (3.29)$$

Diese Wellenfunktion besteht also aus einem Faktor, der die gleiche Periodizität besitzt wie das Potenzial, multipliziert mit der komplexen Phase einer ebenen Welle vom Betrag 1.

Den Beweis dieses Bloch Theorems wollen wir auf 2 Arten erbringen. Der erste Beweis ist ein mehr formaler Beweis. Bei der zweiten Beweisführung beschränken wir uns aus Gründen der Übersichtlichkeit auf ein periodische Potenzial in einer Raumrichtung. Dieser zweite Beweis ist aber dafür konstruktiv in dem Sinne, dass er einen Weg für eine konkrete Lösung aufweist und auch die Struktur des Spektrums der Eigenwerte vermittelt.

Für den ersten Beweis führen wir den Operator für eine Translation um den Vektor  $\vec{R}$ ,  $\mathcal{T}_{\vec{R}}$  ein, der angewandt auf eine Funktion  $f(\vec{r})$  den Funktionswert an der Stelle  $f(\vec{r} + \vec{R})$  ergibt:

$$\mathcal{T}_{\vec{R}} f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}). \quad (3.30)$$

Wendet man diesen Operator z.B. auf die stationäre Schrödinger Gleichung unseres Problems in der Ortsdarstellung an, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\vec{R}} H(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) &= H(\vec{r} + \vec{R}) \Psi(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= H(\vec{r}) \Psi(\vec{r} + \vec{R}) \\ &= H(\vec{r}) \mathcal{T}_{\vec{R}} \Psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Der Übergang zur zweiten Zeile dieser Gleichungsfolge ist korrekt, da wegen der Periodizität des Potenzials für alle Vektoren  $\vec{R}$  des Bravais Gitters gilt  $H(\vec{r} + \vec{R}) = H(\vec{r})$ . Die Gleichungen (3.31) gelten für beliebige Funktionen  $\Psi(\vec{r})$  und deshalb folgt also, dass

$$\mathcal{T}_{\vec{R}} H(\vec{r}) = H(\vec{r}) \mathcal{T}_{\vec{R}} \quad \text{bzw.} \quad [\mathcal{T}_{\vec{R}}, \hat{H}] = 0. \quad (3.32)$$

Ist aber der Kommutator zwischen dem Hamiltonoperator und dem Translationsoperator  $\mathcal{T}_{\vec{R}} = 0$ , so besitzen diese Operatoren ein gemeinsames Eigenfunktionssystem. Sei also  $\Psi(\vec{r})$

eine solche Eigenfunktion zu  $\hat{H}$  und  $\mathcal{T}_{\vec{R}}$ , so stellt sich die Frage nach den Eigenwerten für den Translationsoperator.

Zur Beantwortung dieser Frage betrachten wir die Anwendung von 2 Translationsoperatoren,  $\mathcal{T}_{\vec{R}}$  und  $\mathcal{T}_{\vec{R}'}$ , die, wie man leicht sieht, auch untereinander kommutieren, mit den Eigenwerten  $\chi_{\vec{R}}$  und  $\chi_{\vec{R}'}$

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\vec{R}}\mathcal{T}_{\vec{R}'}|\Psi\rangle &= \chi_{\vec{R}}\chi_{\vec{R}'}|\Psi\rangle \\ &= \mathcal{T}_{\vec{R}+\vec{R}'}|\Psi\rangle \\ &= \chi_{\vec{R}+\vec{R}'}|\Psi\rangle.\end{aligned}\quad (3.33)$$

Die Eigenwerte besitzen also die Eigenschaft

$$\chi_{\vec{R}+\vec{R}'} = \chi_{\vec{R}}\chi_{\vec{R}'}, \quad (3.34)$$

für beliebige Vektoren des Bravais Gitters  $\vec{R}$  und  $\vec{R}'$ . Jeder Vektor des Bravais Gitters lässt sich durch die Primitivvektoren des Gitters  $\vec{a}_i$  darstellen

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (3.35)$$

was natürlich wegen (3.34) bedeutet, dass

$$\chi_{\vec{R}} = \chi_{\vec{a}_1}^{n_1}\chi_{\vec{a}_2}^{n_2}\chi_{\vec{a}_3}^{n_3}. \quad (3.36)$$

Wir machen nun den Ansatz, dass

$$\chi_{\vec{a}_j} = e^{2\pi i x_j}, \quad \text{für } j=1,2,3. \quad (3.37)$$

Dies ist immer möglich solange wir zulassen, dass  $x_j$  eine komplexe Zahl ist. Damit können wir aber mit

$$\begin{aligned}\vec{k} &= x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3, \quad \text{und} \\ \vec{b}_i\vec{a}_j &= 2\pi\delta_{ij},\end{aligned}\quad (3.38)$$

auch schreiben

$$\begin{aligned}\chi_{\vec{R}} &= e^{i\vec{k}\vec{R}} \\ &= e^{i(x_1\vec{b}_1+x_2\vec{b}_2+x_3\vec{b}_3)(n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3)} \\ &= e^{2\pi i n_1 x_1} e^{2\pi i n_2 x_2} e^{2\pi i n_3 x_3} \\ &= \chi_{\vec{a}_1}^{n_1}\chi_{\vec{a}_2}^{n_2}\chi_{\vec{a}_3}^{n_3}.\end{aligned}\quad (3.39)$$

Jetzt berücksichtigen wir noch die Born - von Karmann Randbedingung, nach der

$$\Psi(\vec{r} + N_j\vec{a}_j) = e^{2\pi i x_j N_j} \Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}), \quad (3.40)$$

sein muss. Dies bedeutet aber, dass

$$x_j N_j = m_j \quad \text{mit } m_j \text{ eine ganze Zahl}$$

oder anders ausgedrückt

$$x_j = \frac{m_j}{N_j},$$

reelle Zahlen sind. Da wegen der Orthogonalitätsrelation in (3.38) die Vektoren  $\vec{b}_j$  gerade die Basisvektoren des reziproken Gitters sind, ist damit der in der ersten Zeile von (3.38) definierte Vektor  $\vec{k}$  ein Vektor des Impulsraumes und wir haben wegen (3.39) für die gemeinsamen Eigenzustände des Hamiltonoperators und der Translationsoperatoren die Eigenschaft

$$\Psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}}\Psi(\vec{r}). \quad (3.41)$$

Diese Eigenschaft wird aber genau durch die Bloch Wellenfunktionen in (3.29) realisiert. Damit wäre also ein formaler Beweis des Bloch Theorems erbracht.

In einem zweiten Beweis des Bloch Theorems, der dann aber auch mehr Information über das Eigenwertspektrum liefert, wollen wir uns auf periodische Potenziale in einer Raumrichtung beschränken, also Potenziale vom Typ

$$V(x + a) = V(x). \quad (3.42)$$

Bereits im ersten Semester haben wir gesehen, dass eine solche periodische Funktion durch eine Fourier Reihe dargestellt werden kann in der Form

$$\begin{aligned} V(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(k_n x) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(k_n x), \quad \text{mit } k_n = \frac{2\pi n}{a} \quad \text{und} \\ a_n &= \frac{1}{a} \int_0^a dx V(x) \cos(k_n x), \\ b_n &= \frac{1}{a} \int_0^a dx V(x) \sin(k_n x). \end{aligned} \quad (3.43)$$

Mit der Euler Darstellung der Kosinus und Sinusfunktionen können wir diese Entwicklung aber auch umschreiben in

$$\begin{aligned} V(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{1}{2} (e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{1}{2i} (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{a_n}{2} - \frac{b_n}{2i} \right) e^{-ik_n x} + \left( \frac{a_n}{2} + \frac{b_n}{2i} \right) e^{ik_n x} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{-ik_n x}, \end{aligned} \quad (3.44)$$

wobei sich die Koeffizienten  $V_n$  als Kombination aus den  $a_n$  und  $b_n$  ergeben. Als einfache Beispiele für diese Fourierreihe, auf die wir noch zurückgreifen werden, führen wir an:

- Auch ein konstantes Potenzial ist natürlich ein Beispiel für ein periodisches Potenzial zu einer beliebigen Länge  $a$  der Periode. Die Fourierreihe des Potenzials  $V(x) = V$  nach (3.44) ist durch die Koeffizienten

$$V_n = \begin{cases} V & \text{für } n = 0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.45)$$

- Als zweites Beispiel nehmen wir das Potenzial, das durch die Kosinusfunktion definiert ist

$$V(x) = V \cos\left(2\pi \frac{x}{a}\right). \quad (3.46)$$

Dieses Potenzial ist periodisch mit der Periodizitätslänge  $a$  und ein semirealistisches Beispiel für ein Potenzial von Atomrümpfen, die an den Positionen  $\pi/a$ ,  $3\pi/a$  etc. sitzen, und dort ein attraktives Potenzial für Elektronen hervorrufen. Die Koeffizienten der Fourierreihe ergeben sich hier einfach dadurch, dass wir (3.46) umschreiben auf die Form

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{V}{2} \left( e^{i2\pi\frac{x}{a}} + e^{-i2\pi\frac{x}{a}} \right) \\ &= \frac{V}{2} \left( e^{-ik_{-1}x} + e^{-ik_1x} \right). \end{aligned} \quad (3.47)$$

In diesem Fall sind die Entwicklungskoeffizienten der Darstellung (3.44) also gegeben durch

$$V_n = \begin{cases} \frac{V}{2} & \text{für } n = -1 \text{ und } n = 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.48)$$

Die Lösung der stationären Schrödingergleichung soll nun in der Impulsdarstellung erfolgen und deshalb wollen wir zur Erinnerung und zur Etablierung der Nomenklatur einige Grundzüge der Darstellung von Zuständen wiederholen.

Ein quantenmechanischer Zustand wird abstrakt in der Dirac Notation durch einen Ket Vektor  $|\Psi\rangle$  dargestellt. Für eine konkrete Darstellung dieses Zustandes geht man z.B. in die Ortsdarstellung und gibt den Überlapp dieses Ket Zustandes mit den Ortseigenzuständen  $|x\rangle$  an

$$\langle x|\Psi\rangle = \Psi(x). \quad (3.49)$$

Das Ergebnis ist die Wellenfunktion  $\Psi(x)$ , die die Wahrscheinlichkeitsamplitude angibt mit der ein Teilchen im Zustand  $|\Psi\rangle$  am Ort  $x$  aufzufinden ist. Eine Alternative zur Ortsdarstellung ist die Impulsdarstellung, also die Entwicklung des Zustandes nach den Impulseigenfunktion mit Impulsen  $p = \hbar k$

$$\langle k|\Psi\rangle = C(k), \quad (3.50)$$

wobei die Funktion  $C(k)$  die Wahrscheinlichkeitsamplitude angibt, mit der das Teilchen mit einem Impuls  $\hbar k$  detektiert werden kann. Die Transformation von der Orts- in die Impulsdarstellung erhält man dadurch, dass man in geeigneter Weise eine 1 in Form einer Vollständigkeitsrelation einfügt

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \langle x|\Psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \langle x|k\rangle \langle k|\Psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} C(k), \end{aligned} \quad (3.51)$$

beziehungsweise in der anderen Richtung

$$\begin{aligned} C(k) &= \langle k|\Psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle k|x\rangle \langle x|\Psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \Psi(x). \end{aligned} \quad (3.52)$$

In diesen Transformationen haben wir benutzt, dass die Ortsdarstellung der Impulseigenfunktionen durch die ebenen Wellen gegeben ist

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} = \langle k|x\rangle^*.$$

(3.51) und (3.52) belegen, dass Orts- und Impulsdarstellung eines Zustandes durch die Fourier Transformation miteinander verknüpft sind.

Wenden wir uns nun der stationären Schrödinger Gleichung zu, die in der Dirac Schreibweise gegeben ist durch

$$(T + V) |\Psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\Psi_\alpha\rangle.$$

Die Impulsdarstellung erhalten wir dadurch, dass wir diese Gleichung von links mit einem Bra Vektor  $\langle k'|$  multiplizieren

$$\langle k'| (T + V) |\Psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha \langle k'|\Psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha C_\alpha(k'). \quad (3.53)$$

Betrachten wir zunächst den Operator der kinetischen Energie  $T$

$$\begin{aligned} \langle k'|T|\Psi_\alpha\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \langle k'|T|k\rangle \langle k|\Psi_\alpha\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta(k - k') C_\alpha(k) \\ &= \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} C_\alpha(k'). \end{aligned} \quad (3.54)$$

In einem zweiten Schritt betrachten wir den Operator des Potentials in (3.53)

$$\begin{aligned} \langle k'|V|\Psi_\alpha\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \langle k'|V|k\rangle \langle k|\Psi_\alpha\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \langle k'|V|k\rangle C_\alpha(k). \end{aligned} \quad (3.55)$$

Die Matrixelemente des Potentials in der Impulsdarstellung ergeben sich durch

$$\begin{aligned} \langle k'|V|k\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle k'|x'\rangle \langle x'|V|x\rangle \langle x|k\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-ik'x'} V(x) \delta(x - x') e^{ikx} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) e^{i(k-k')x}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Bei dem Übergang zur zweiten Zeile haben wir uns auf die üblichen lokalen Potentiale beschränkt, deren Matrixelemente in der Ortsdarstellung gegeben sind durch

$$\langle x'|V|x\rangle = V(x) \delta(x - x').$$

Betrachten wir nun speziell die Matrixelemente von Potentialen, die periodisch mit der Periodizität  $a$  sind, also durch die Reihe (3.44) dargestellt werden, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle k'|V|k\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k-k'-2\pi n/a)x} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \delta\left(k - k' - \frac{2\pi n}{a}\right). \end{aligned} \quad (3.57)$$

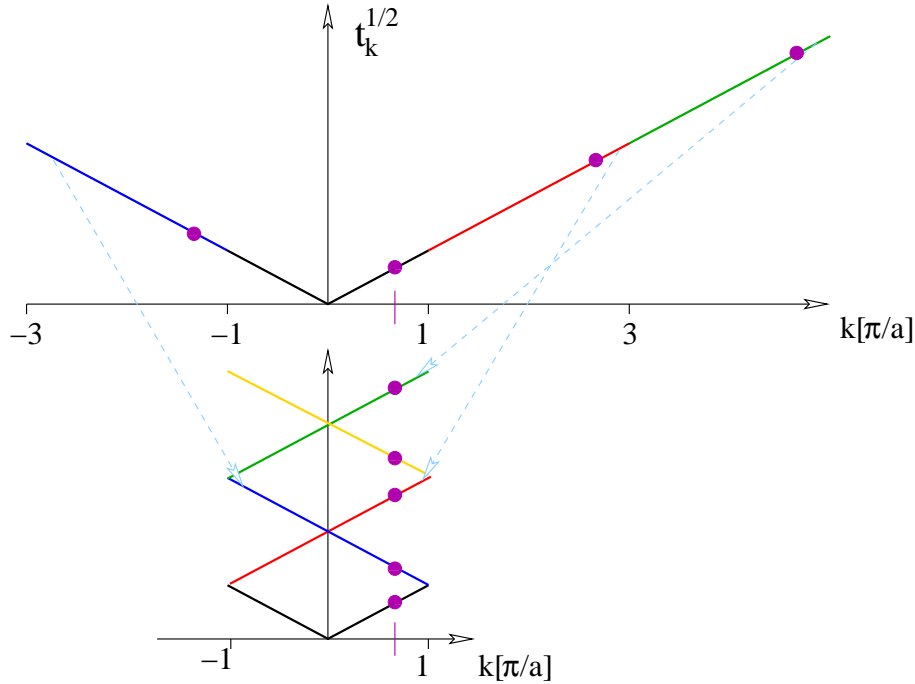


Abbildung 3.4: Kinetische Energie  $t_k$  als Funktion der Wellenzahl. Herausgehoben ist eine Gruppe von Wellenzahlen, die durch die Schrödinger Gleichung (3.59) miteinander verknüpft sind. Im unteren Teilbild sind die Teile der Energiefunktion so verschoben, dass diese Punkte vertikal übereinander positioniert sind und so das Intervall der Wellenzahl auf die erste Brillouinzone reduziert ist.

Setzt man dieses Ergebnis in Gleichung (3.55) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle k' | V | \Psi_\alpha \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n \delta\left(k - k' - \frac{2\pi n}{a}\right) C_\alpha(k) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n C_\alpha(k' + 2\pi n/a). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Setzt man die Ergebnisse von (3.54) und (3.58) in die stationäre Schrödinger Gleichung (3.53) ein, so ergibt sich

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} C_\alpha(k') + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n C_\alpha(k' + 2\pi n/a) = \varepsilon_\alpha C_\alpha(k'). \quad (3.59)$$

Greift man also z.B. einen Wert der Wellenzahl  $k'$  aus dem Intervall der ersten Brillouinzone  $[-\pi/a, \pi/a]$  heraus, so verknüpft diese Schrödinger Gleichung (3.59) den Wert der unbekannten Amplitude  $C_\alpha(k')$  nur mit denen dieser Amplitude an den Stellen  $C_\alpha(k' + 2\pi n/a)$ . Diese Werte für die Wellenzahlen sind im oberen Teil der Abb. 3.4 durch Punkte auf der Geraden  $\sqrt{t_k}$  als Funktion von  $k$  markiert.

Durch die angedeutete Umpositionierung der einzelnen Abschnitte dieser Energiekurve erreicht man im unteren Teile der Abb. 3.4, dass all diese Wellenzahlen übereinander positioniert sind. Die Gleichung (3.53) und damit auch (3.59) gilt für beliebige Wellenzahlen

$k'$  und damit auch für  $k_j = k' + 2j\pi/a$ , wobei  $k'$  der erwähnte Impuls aus der ersten Brillouinzone ist. Damit ergibt sich für (3.59)

$$\frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} C_\alpha(k_j) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n C_\alpha(k_{j+n}) = \varepsilon_\alpha C_\alpha(k_j). \quad (3.60)$$

Diese Gleichungen bilden ein Eigenwertproblem unendlicher Dimension zur Bestimmung der Eigenwerte  $\varepsilon_\alpha$  und der Eigenvektoren in Form der Koeffizienten  $C_\alpha(k' + 2j\pi/a)$ .

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + V_0 & V_1 & V_2 & \dots \\ V_{-1} & \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + V_0 & V_1 & \dots \\ V_{-2} & V_{-1} & \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V_0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_\alpha(k_0) \\ C_\alpha(k_1) \\ C_\alpha(k_2) \\ \vdots \end{pmatrix} = \varepsilon_\alpha \begin{pmatrix} C_\alpha(k_0) \\ C_\alpha(k_1) \\ C_\alpha(k_2) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Beachte dabei, dass diese Matrix auch für negative Indices  $k_{-j}$  ergänzt werden muss.

Die Eigenwerte werden also am besten gekennzeichnet durch zwei Zahlen: die Wellenzahl  $k'$  in der ersten Brillouinzone und eine natürliche Zahl  $n$ , die angibt, der wievielte Eigenvektor, bezogen auf die Größe des Eigenwertes, betrachtet werden soll

$$\varepsilon_\alpha \quad \text{mit} \quad \alpha \leftrightarrow k', n. \quad (3.62)$$

Die Eigenzustände sind charakterisiert durch die Koeffizienten  $C_\alpha(k_j)$ , Entwicklungskoeffizienten in der Impulsdarstellung. Damit ergibt sich also für den Eigenzustand

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_\alpha(k' + 2\pi j/a) |k' + 2\pi j/a\rangle. \quad (3.63)$$

In der Ortsdarstellung ergibt sich also für diese Eigenzustände die Darstellung

$$\begin{aligned} \langle x | \Psi_\alpha \rangle &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_\alpha(k' + 2\pi j/a) \langle x | k' + 2\pi j/a \rangle \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} C_\alpha(k' + 2\pi j/a) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k' + 2\pi j/a)x} \\ &= e^{ik'x} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{C_\alpha(k' - 2\pi j/a)}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(2\pi j/a)x} \\ &= e^{ik'x} u_\alpha(x), \end{aligned} \quad (3.64)$$

mit

$$u_\alpha(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{C_\alpha(k' - 2\pi j/a)}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(2\pi j/a)x}. \quad (3.65)$$

Damit entspricht die Darstellung von  $u_\alpha$  einer Fourierreihe des Typs von (3.44). Dies bedeutet, dass  $u_\alpha$  periodisch mit der Periodizität  $a$  ist ( $u_\alpha(x+a) = u_\alpha(x)$ ) womit die Darstellung des Eigenzustandes  $\Psi_\alpha(x)$  in (3.64) das Bloch Theorem (3.29) verifiziert ist.

Allerdings ist der der Wellenvektor  $k'$ , den wir bei dieser Darstellung herausgehoben haben, nicht eindeutig. Mit gleichem Ergebnis hätte man auch eine ebene Welle mit der Wellenzahl  $k' + 2\pi j/a$  herausfaktorieren können.

Betrachten wir jetzt als einfache Anwendungen die periodischen Potenziale, die wir bereits oben unter (3.45) und (3.48) betrachtet haben:

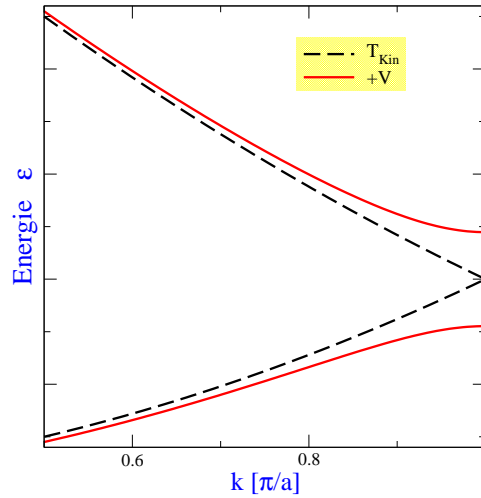


Abbildung 3.5: Kinetische Energien und Einfluss des Potentials auf die Ein-  
teilchenenergien in der Nähe von  $k' = \pi/a$ .

- Zunächst also das triviale Beispiel des konstanten Potentials  $V = V_0$ . In diesem Fall sind also alle Matrixelemente  $V_n$  der Matrix in (3.61), die nicht in der Diagonalen stehen, identisch null. Die Eigenvektoren sind genau die ebenen Wellen und die Eigenwerte, die entsprechenden kinetischen Energien plus die Konstante  $V_0$ , wie es zu erwarten war.

Sind die Nebendiagonalelemente im Vergleich zur kinetischen Energie klein, so kann man davon ausgehen, dass die Eigenvektoren dominiert werden durch jeweils einen Entwicklungskoeffizienten  $C_\alpha(k_j)$ , während die anderen klein sind. Dieser Zustand ist also kein exakter Eigenzustand zum Impulsoperator, wird aber dominiert durch eine Impulskomponente  $\hbar k_j$ , die den Namen Quasiimpuls trägt. Die Voraussetzung, dass die Matrixelemente  $V_n$  klein sind im Vergleich zur kinetischen Energie trifft natürlich insbesondere zu für Zustände mit hoher kinetischer Energie.

- Das zweite Beispiel eines periodischen Potentials ist die Kosinusfunktion. Nach (3.48) besitzt die Fourierreihe dieser Funktion nur die Koeffizienten  $V_1$  und  $V_{-1}$ . Dies bedeutet, dass in der Matrix in (3.61) nur die erste Nebendiagonale von Null verschieden ist.

Zur Analyse der Eigenwerte und Eigenvektoren, nehmen wir an, dass  $V_1 = V_{-1} = v$  relativ klein ist im Vergleich zu den typischen Differenzen zwischen den kinetischen Energien. Zur Bestimmung der niedrigsten Eigenwerte etwa in der Nähe von  $k' = \pi/a$  können wir dann die Matrix reduzieren auf eine  $2 \times 2$  Matrix, die nur die Beiträge von  $k_0$  und  $k_{-1}$  berücksichtigt (siehe auch Abb. 3.4) in der Form

$$\begin{pmatrix} t_{-1} & v \\ v & t_0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad t_0 = \frac{k'^2 \hbar^2}{2m} \quad t_{-1} = \frac{(k' - 2\pi/a)^2 \hbar^2}{2m}. \quad (3.66)$$

Die Eigenwerte dieser Matrix sind gegeben durch

$$\varepsilon = \frac{t_0 + t_{-1}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(t_0 - t_{-1})^2 + 4v^2}. \quad (3.67)$$



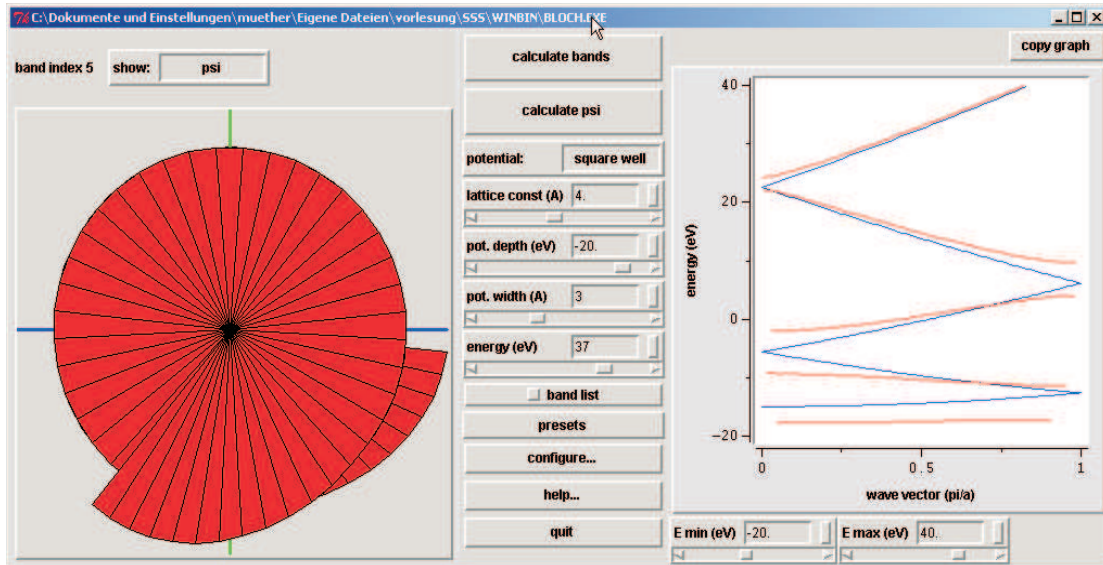


Abbildung 3.6: Oberfläche des Simulationsprogramms “bloch” aus dem Paket *Simulations for Solid State Physics*, siehe [www.ruph.cornell.edu/ss/sss.html](http://www.ruph.cornell.edu/ss/sss.html)

Ist also der Betrag der Differenz  $(t_0 - t_{-1})$  groß gegenüber  $v$ , so kann man den Wert von  $v$  in der Wurzel vernachlässigen und man erhält die kinetischen Energien  $t_0$  und  $t_{-1}$  für die Einteilchenenergien. In diesem Fall sind die Wellenfunktionen dann auch nahezu identisch mit den ebenen Wellen. Nähert man sich aber z.B. der Grenze der Brillouin Zone  $k' = \pi/a$ , so werden die kinetischen Energien  $t_0$  und  $t_{-1}$  identisch. In diesem Grenzfall sind die Eigenwerte dann

$$\varepsilon = \frac{t_0 + t_{-1}}{2} \pm v. \quad (3.68)$$

Durch das Potenzial ergibt sich also eine Lücke im Energiespektrum (siehe Abb. 3.5, in der diese Eigenwerte dargestellt sind). In diesem Grenzfall sind die Eigenzustände gegeben durch

$$\begin{aligned} |\Psi_\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|k_0 = \pi/a\rangle \pm |k_{-1} = -\pi/a\rangle) \\ &\sim \begin{cases} \cos(\pi x/a) & \text{bzw.} \\ \sin(\pi x/a) & . \end{cases} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Wir haben es also in diesem Fall mit stehenden Wellen zu tun, deren Maxima des Amplitudenquadrats für die attraktive Energie in den Minima des Potenzials (für den weniger attraktiven Eigenwert in den Maxima des Potenzials) zu finden sind.

Diese Eigenschaften der Lösungen der Schrödinger Gleichung für ein periodisches Potenzial ist keinesfalls eine Besonderheit des von uns gewählten Kosinus Potenzials. Das Auftreten eines Gaps im Energiespektrum und die diskutierten Eigenschaften der Wellenfunktionen sind vielmehr charakteristisch auch für andere periodische Potenziale.

Dies kann man sehr schön durch Spielereien mit dem Simulationsprogramm “bloch” aus dem Projekt *Simulations for Solid State Physics* von R.H. Silsbee und J. Dräger sehen.

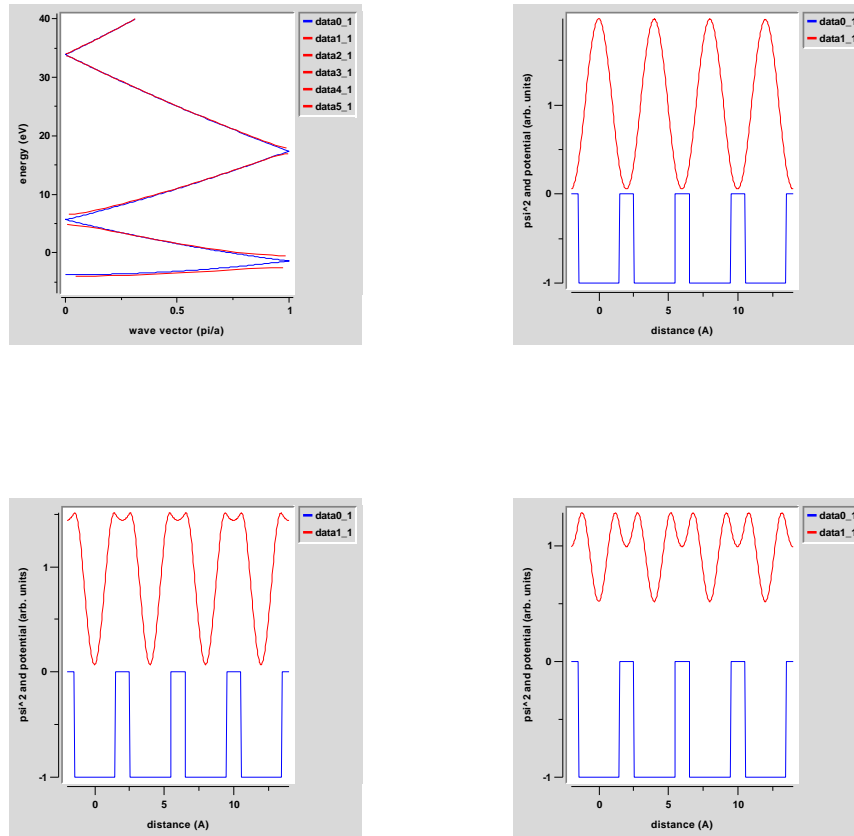


Abbildung 3.7: *Ergebniss des Simulationsprogramms “bloch” aus dem Paket Simulations for Solid State Physics, Details siehe Text*

Diese Programme sind frei zugänglich unter [www.ruph.cornell.edu/ssss/ssss.html](http://www.ruph.cornell.edu/ssss/ssss.html) und auch auf den Rechnern des Studentenpools der Fakultät installiert. Die Abbildung 3.6 zeigt das Layout der Programm Oberfläche.

Als Anwendungsbeispiel dieses Paketes sind in der Abb. 3.7 einige Ergebnisse von einfachen Bandstrukturechnungen zusammengefasst. Als Beispiel haben wir die Bandstruktur für ein periodisches Kastenpotential mit einer Tiefe von 5 eV herausgegriffen (siehe die Darstellung in 3 Teilbildern von Abb. 3.7. Das erste Teilbild zeigt das Energiespektrum im Vergleich zum Spektrum der kinetischen Energie (geschiftet um die Konstante  $V_0$ ). Dieses Spektrum ist nur für die reduzierte Brillouin Zone für  $k'$  aus  $[0, \pi/a]$  dargestellt, da die Energien spiegelsymmetrisch um  $k' = 0$  sind.

Man findet eine erste Bandlücke bei  $k' = \pi/a$ : Zwischen  $\varepsilon = -2.53$  eV und  $-0.49$  eV sind keine Energieeigenwerte zu finden.

Der zweite Plot in der ersten Reihe von Abb. 3.7 zeigt die Form des Potentials im unteren Teil und im oberen Teil das Quadrat der Wellenfunktion für  $\varepsilon = -2.6$  eV, also knapp unterhalb der Bandlücke. Wir sehen, dass es hier zur Ausbildung einer stehenden Welle kommt, wie bereits im Fall der Kosinusfunktion diskutiert, mit Maxima der Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den Stellen der Potenzialminima

Der linke Plot in der zweiten Reihe von Abb. 3.7 stellt die Ergebnisse für  $\varepsilon = -.45$  eV also leicht oberhalb des Energiegaps dar. In diesem Fall ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit

groß im Bereich der Potenzialmaxima.

Der vierte Plot zeigt Ergebnisse für  $\varepsilon = 1.6$  eV, also weiter weg von den Energielücken. In diesem Fall fluktuiert das Quadrat der Wellenfunktion nur relativ schwach um den Wert 1.

Nachdem wir also die Lösungen der Schrödinger Gleichung für die periodischen Potenziale diskutiert haben, stellt sich die Frage nach der Besetzung dieser Zustände mit Elektronen unter Berücksichtigung des Pauli Prinzips.

Wir betrachten dazu wieder das einfache Beispiel eines periodischen Potentials in einer Raumrichtung mit der Periodizität  $a$ . In Abständen von  $a$  befindet sich also jeweils ein Atomrumpf. Außerdem betrachten wir zur Diskretisierung des Problems einen Ausschnitt aus diesem eindimensionalen Gitter der Länge

$$L = Na. \quad (3.70)$$

Nach der Länge  $L$ , also nach  $N$  Atomen, sollen die Wellenfunktionen periodisch fortgesetzt werden: Auf diesem Abschnitt der Länge  $L$  sollen also die Born-von Karmann Randbedingungen gelten. Dies bedeutet, dass wir diskrete Wellenzahlen zu berücksichtigen haben der Form

$$k_\gamma = \frac{2\pi\gamma}{L} \quad \text{mit} \quad \gamma = 0, \pm 1 \dots \quad (3.71)$$

In der ersten Brillouin Zone  $[-\pi/a, \pi/a]$  finden wir von diesen diskreten Wellenzahlen gerade die Werte

$$k_\gamma = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L} \dots, + \underbrace{\frac{N\pi}{L}}_{=\frac{\pi}{a}}. \quad (3.72)$$

Dabei ist zu beachten, dass wir von den 2 Impulswerten, die genau auf der Grenze der Brillouin Zone liegen, nur einen der ersten Brillouin Zone zuordnen ( $+N\pi/L$ ). Der andere ( $-N\pi/L$ ) wird bereits der nächsten Zone zugeordnet. Damit finden wir in (3.72) also genau  $N$  diskrete Impulswerte in der ersten Brillouin Zone.

Somit gibt es also für  $N$  Atome im Intervall der Länge  $L$  genau  $N$  diskrete Wellenzahlen und damit  $N$  Energieniveaus in jedem Energieband. Berücksichtigen wir, dass wegen der Spinartung in jedem Energiezustand 2 Elektronen untergebracht werden können, so haben in jedem Energieband  $2N$  Elektronen Platz.

Im Fall der Alkali Atome mit ihren abgeschlossenen Schalen und einem Valenzelektron, bringt also jedes Atom ein Valenzelektron ein und wir erwarten nach dieser einfachen Abschätzung, dass das Energieband der Valenzelektronen gerade zur Hälfte gefüllt ist. Bei den Erdalkali Atomen mit 2 Valenzelektronen sollten also im Kristallverbund genau die Zustände eines Bandes aufgefüllt werden.

Wegen der Spiegelsymmetrie der Zustände um  $k = 0$  ist bei einer vollen Besetzung des Bandes zu erwarten, dass der Gesamtimpuls aller Elektronen in diesem Band sich zu Null addiert. Für jedes Elektron, das einen Zustand mit einem Quasiimpuls  $\hbar k$  besetzt, gibt es ein zweites Elektron, das den Zustand mit dem Quasiimpuls  $-\hbar k$  besetzt. Legt man eine Spannung zwischen die Enden eines solchen Kristalls an, so kann das elektrische Feld keinen Strom erzeugen. Die Energielücke zum nächsten Band ist zu groß, als dass das elektrische Feld Elektronen in das nächste Band befördern und so den Elektronen einen von Null verschiedenen Gesamtimpuls aufprägen könnte.

Da nach unseren obigen Überlegungen die Alkaliatome eine halb besetzte Valenzschale zeigen während die Valenzschale der Erdalkali Atome voll besetzt ist, sollte man erwarten, dass Alkali Atome zu den Metallen gehören, was auch stimmt, während Erdalkali Atome Kristalle mit Isolatorstrukturen bildet. Dies ist aber nicht richtig. Wegen der dreidimensionalen Struktur der realen Festkörper überlappen die Bandstrukturen bei verschiedenen Erdalkaliatomen. Dies führt zu schwachen Leitfähigkeiten.

