

Stabilität und Spektrum der Atome

Hartmut Wiesner und Rainer Müller

Einleitung

Eines der größten Probleme in der frühen Atomphysik war die Erklärung der Stabilität der Atome. Das klassische Rutherfordsche Atommodell, bei dem die Elektronen wie auf Planetenbahnen um den Atomkern kreisen ist instabil, da durch die Emission elektromagnetischer Strahlung Energie verlorengeht und die Elektronen nach kurzer Zeit in den Kern stürzen. Diese Tatsache war für Bohr unmittelbarer Anknüpfungspunkt, um mit seinem Atommodell die Gesetze der klassischen Physik zu verlassen und damit den Anstoß zur Entwicklung der Quantenmechanik zu geben. Die mit dieser historischen Entwicklung verbundenen didaktischen Fragestellungen wurden bereits im ersten Teil der Artikelserie erörtert [1], so daß im folgenden nur die systematische Perspektive behandelt werden soll.

Beschäftigt man sich mit der Stabilität der Atome, so kann man zwei Aspekte des Problems unterscheiden (vgl auch [2]):

1. die Existenz eines Grundzustandes,
2. das diskrete Spektrum der angeregten Zustände,

Didaktisch bedeutsam sind diese Punkte aus folgendem Grund: Das Linienspektrum, das sich für das Wasserstoffatom aus den Übergängen zwischen den Energieniveaus

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1)$$

ergibt, ist eine der wesentlichen experimentell zugänglichen Eigenschaften der Atome. Es ist deshalb auch Bestandteil der Lehrpläne und wird in allen Schulbüchern über Atomphysik behandelt. Die diskrete Natur der Spektren ist jedoch erklärungsbedürftig, sie kann nicht im Rahmen der klassischen Physik gewonnen werden (wenn man vom Thomsonschen Atommodell mit seinen nicht haltbaren Grundannahmen absieht, vgl. [1]). Eine erfolgreiche quantenmechanische Berechnung der Atomspektren kann im Unterricht das Vertrauen in die unanschauliche Theorie mit ihren abstrakten Begriffsbildungen fördern.

Ein ebenfalls genuin quantenmechanischer Zug ist die von Null verschiedene mittlere kinetische Energie im Grundzustand des Atoms. Die Tatsache, daß das Elektron nicht unter Energieabgabe in einen energetisch noch niedrigeren Zustand übergehen kann liegt im Kern der Stabilitätsproblematik. Sie steht in scharfem Kontrast zum oben beschriebenen Verhalten eines klassischen Rutherford-Atoms.

Verschiedene Begründungen der Stabilität

Es stellt sich nun die Frage nach einer möglichst elementaren aber doch nicht zu weit vereinfachenden Herleitung des stabilen Grundzustandes und der Atomspektren, die für den Gebrauch im Unterricht in Frage kommt. Im folgenden soll ein Überblick über bisher vorgeschlagene Ansätze gegeben werden. Die dabei auftretenden Schwierigkeiten und Vorzüge sollen kritisch diskutiert und abgewogen werden, um so eine Orientierung für die Unterrichtspraxis zu liefern

(vgl. dazu auch die Aufsätze [3] und [2]). Wir werden uns dabei auf Zugänge beschränken, die wirkliche quantenmechanische Begründungen zu geben versuchen; der verbreitete Bezug auf das Bohrsche Atommodell soll hier nicht verfolgt werden.

Zunächst muß festgestellt werden, daß das Spektrum des Wasserstoffatoms zwar quantenmechanisch exakt berechnet werden kann, daß aber die Lösungsmethode in der Schule nicht verwendbar ist. Grund dafür ist, daß die Schrödingergleichung eine partielle Differentialgleichung in drei Raumdimensionen ist, deren Reduktion auf eine Radialgleichung (also auf eine gewöhnliche Differentialgleichung in r) mit Hilfe der Schulmathematik nicht zu leisten ist. Dazu kommt, daß sich für letztere dann die Differentialgleichung der Laguerre-Polynome ergibt, die nicht elementar integrierbar ist. Allenfalls könnte man auf diese Weise die Wellenfunktion des Grundzustandes berechnen, was aber unseres Wissens für den Schulgebrauch noch nicht versucht wurde.

Man ist also auf Näherungsverfahren und Plausibilitätsüberlegungen angewiesen. Dabei könnte man aus der Not eine Tugend machen und die Schülerinnen und Schüler mit der „Kunst des richtigen Näherns“ vertraut machen. Unglücklicherweise kann man sich dabei in unserem Fall kein Vorbild am Vorgehen der theoretischen Physik nehmen, da in allen Lehrbüchern die exakte Lösung des Wasserstoffproblems vorgerechnet wird. Die Schulbuchliteratur ist also auf sich selbst angewiesen.

Eine ganze Reihe von Autoren [4, 5, 6, 7, 2] ermittelt den Grundzustand des Wasserstoffatoms durch Minimierung der Gesamtenergie in Abhängigkeit vom „Atomradius“. Der Prototyp einer solchen Vorgehensweise sei hier wörtlich wiedergegeben [8] ($\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \approx 1/137$ ist die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante; im englischen Original ist $\hbar = c = 1$ gesetzt):

„Die Größe des Wasserstoffatoms können wir dadurch abschätzen, daß wir seine Energie durch die Orts- und Impulsunschärfen ausdrücken:

$$E \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{\hbar c \alpha}{\Delta r}. \quad (2)$$

Da $\Delta p \approx \hbar/\Delta r$ ist, können wir dies als eine Funktion von Δr allein ansehen. Minimieren wir sie, so finden wir für Δr

$$a_0 = \frac{\hbar}{c\alpha m} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \quad (3)$$

Das ist der Bohrsche Radius; er gibt die ungefähre charakteristische Ausdehnung der meisten atomaren Zustände wieder. Nach (2) ist die charakteristische Bindungsenergie

$$\text{Ry} = \frac{\hbar c \alpha}{2a_0} = \frac{1}{2} m (c\alpha)^2 = 13,6 \text{ eV} \quad (4)$$

mit dem Namen Rydberg. Alle niedrigliegenden Anregungszustände des Atoms, die nur Elektronen in den äußeren Schalen umfassen, sind von dieser Größenordnung. Wie man an (4) sieht, ist $c\alpha$ die charakteristische Geschwindigkeit im Atom.“

Man muß klarstellen, daß es sich hier nicht um den Versuch einer rigorosen Ableitung handelt, sondern um ein „quick and dirty“-Argument zur Abschätzung von Größenordnungen. So steht denn auch die physikalische Reputation der Autoren Kurt Gottfried und Victor F. Weisskopf nicht zur Debatte. Dennoch kann man an diesem Beispiel exemplarisch die Schwierigkeiten demonstrieren, die von allen Autoren, die in einer solchen Weise verfahren, umgangen werden müssen:

1. In dem Ausdruck für die Gesamtenergie

$$W = W_{\text{kin}} + W_{\text{pot}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (5)$$

tauchen mit Ort und Impuls zwei Größen auf, die nicht gleichzeitig bestimmte Werte haben können. Eine solche Gleichung macht in der Quantenmechanik nur als Operatorgleichung einen Sinn. Als Beziehung zwischen Zahlenwerten wird sie falsch. Kinetische Energie und potentielle Energie können nicht gleichzeitig feste Werte besitzen; die Gesamtenergie läßt sich nicht mehr als Summe dieser beiden Energieformen darstellen (s. ausführlicher dazu [3]). Als Ausweg wird von allen oben zitierten Autoren der fachdidaktischen Literatur der Mittelwert von Gl. (5) betrachtet, also

$$\langle W \rangle = \langle W_{\text{kin}} \rangle + \langle W_{\text{pot}} \rangle. \quad (6)$$

Der Preis dafür ist, wie von Gabriel und Garber [2] näher ausgeführt, daß man drei verschiedene Ensembles von Atomen betrachten muß, um dieser Gleichung einen operational definierten Sinn zu geben: An jeweils einer Gruppe werden $\langle W \rangle$, $\langle 1/r \rangle$ und $\langle p^2 \rangle$ gemessen. Zwischen den Meßergebnissen an den verschiedenen Ensembles gilt die Relation (6). Das Nachvollziehen eines solches Vorgehens erfordert ein erhebliches gedankliches Abstraktionsvermögen. Nur so wird jedoch verständlich, wie bei streuenden Werten der kinetischen oder der potentiellen Energie die Gesamtenergie einen festen Wert haben kann (d. h. $\Delta W_{\text{kin}} \neq 0$, $\Delta W_{\text{pot}} \neq 0$ aber $\Delta W = 0$).

2. Um den mittleren Wert der potentiellen Energie zu berechnen benötigt man $\langle r \rangle$ bzw. $\langle 1/r \rangle$. Ohne Kenntnis der Wellenfunktion ist man auch hier auf Abschätzungen oder blindes Raten angewiesen. Im Beispiel oben wird etwa statt des mittleren Abstands $\langle r \rangle$ seine Schwankung Δr benutzt.
3. Damit man die mittlere Gesamtenergie als Funktion einer einzigen Variable auffassen und dann minimieren kann, braucht man eine Verbindung zwischen den Werten von $\langle p^2 \rangle$ und $\langle r \rangle$. Gottfried und Weisskopf benutzen zunächst, daß der mittlere Impuls des Elektrons verschwindet, da sich das Atom als Ganzes nicht bewegt. Dann gilt $p^2 = (\langle p \rangle + \Delta p)^2 = (\Delta p)^2$ (vgl. (2)). Die gesuchte Verbindung wird dann durch die nicht weiter begründete Annahme einer minimalen Orts-Impulsunschärfe hergestellt.
4. Es muß ein Ausdruck für die mittlere kinetische Energie angegeben werden, was ebenfalls nicht ohne Abschätzungen möglich ist.
5. Schließlich wird noch die Annahme benutzt, daß der Grundzustand diejenige Energie besitzt, die durch Minimierung der so erhaltenen Gesamtenergie gewonnen werden kann.

Im Lichte dieser Schwierigkeiten wollen wir uns jetzt die verschiedenen Ansätze im einzelnen ansehen:

Dorn und Bader [4] betrachten ein Atom mit einem festen Radius R . Sie rechnen zwar mit Mittelwerten für die kinetische und potentielle Energie, gehen auf die oben angesprochene Problematik allerdings nicht weiter ein. Um die mittlere potentielle Energie zu bestimmen, wird ad hoc angenommen, daß sich das Elektron im Mittel im Abstand $\frac{1}{2}R$ vom Atomkern befindet und das Coulomb-Potential an dieser Stelle ausgewertet. Zur Berechnung der mittleren kinetischen Energie wird das Atom durch einen dreidimensionalen linearen Potentialtopf mit Breite $2R$ angenähert. Für $\langle W_{\text{kin}} \rangle$ wird dann dessen Grundzustandsenergie benutzt. Der gesuchte Wert für den Radius des Atoms, der die Gesamtenergie minimiert, ist dann $R = 3\pi\epsilon_0 h^2 / (8me^2)$, in größenordnungsmäßiger Übereinstimmung mit dem Bohrschen Radius.

In didaktischer Hinsicht ist an diesem Ansatz die fragwürdige Berechnung der mittleren kinetischen Energie zu kritisieren. Ein Potentialtopfmodell ist dazu ungeeignet, da in ihm ein Teilchen nicht nur kinetische Energie besitzt, sondern auch potentielle (sonst wäre es ja nicht

gebunden). Besonders deutlich sieht man das, wenn man den Energienullpunkt vom Boden des Potentialtopfs weg verschiebt.

Ein weiterer Kritikpunkt betrifft die Annahme $\langle r \rangle = \frac{1}{2}R$ bei der Auswertung der potentiellen Energie. Mit einem anderen $\langle r \rangle$ könnte man jeden beliebigen kleineren Wert von $\langle W_{\text{pot}} \rangle$ erzeugen – bis hin zu $\langle W_{\text{pot}} \rangle \rightarrow -\infty$ für $\langle r \rangle \rightarrow 0$. Damit ist die Stabilität des Atoms, die ja erst gezeigt werden soll, bereits in die Betrachtung hineingesteckt worden.

Noch gravierender ist der Einwand, daß diese „Ableitung“ gerade nicht zeigt, daß das Elektron nur diskrete Energiezustände annehmen kann. Sie zeigt, daß im Prinzip ein kontinuierliches Spektrum vorliegt, d. h. jeder Wert kann angenommen werden: „Hätte ein H-Atom einen Radius, der von R_1 abweicht, so würde es unter Energieabgabe (Stöße mit anderen Atomen, Strahlung) in diesen stabilen Zustand übergehen“ [4]. Nach dieser Argumentation sollte die von Atomen emittierte Strahlung ein kontinuierliches Spektrum besitzen, in Kontrast zu dem experimentellen Befund diskreter Spektrallinien.

Einen ganz ähnlichen Zugang verfolgen Berg et al. [5] („Berliner Konzept“). Das Atom wird durch einen dreidimensionalen Potentialtopf mit Kantenlänge L modelliert. Die weitere Rechnung verläuft wie bei Dorn und Bader. Das Auswerten der potentiellen Energie an der Stelle $\frac{1}{2}L$ wird im Sinne eines „Herantastens“ an den eigentlichen Wert verstanden. Auch hier wird L durch Minimierung der Gesamtenergie bestimmt. Die Einwände gegen das Verfahren sind die gleichen wie oben.

Eine überzeugendere Herleitung – wenn auch unter Verwendung der gleichen Grundidee – geben Brachner und Fichtner [6, 7]. Sie weisen darauf hin, daß in der Quantentheorie $W \neq W_{\text{kin}} + W_{\text{pot}}$, aber $\langle W \rangle = \langle W_{\text{kin}} \rangle + \langle W_{\text{pot}} \rangle$ erfüllt ist. Die mittlere potentielle Energie wird unter der Annahme berechnet, daß die Wellenfunktion des Elektrons innerhalb eines Radius R konstant ist und außerhalb verschwindet. Zur Abschätzung der mittleren kinetischen Energie wird (unter der Annahme, daß der Drehimpuls im Grundzustand verschwindet) der Grundzustand des eindimensionalen Potentialtopfes herangezogen (in [7]) bzw. die Heisenbergsche Unschärferelation benutzt (in [6]). Das Minimum der Gesamtenergie ergibt sich dann bei einem Wert $R > 0$, womit die Stabilität einleuchtender als bei den eben kritisierten Überlegungen erklärt ist. Höhere Anregungszustände des Atoms werden durch Rekurs auf den Potentialtopf behandelt, indem dessen Energiespektrum zur Auswertung von $\langle W_{\text{kin}} \rangle$ benutzt werden. Dies führt zum korrekten Wasserstoffspektrum $\sim n^{-2}$. Trotzdem kann die Erklärung des diskreten Spektrums, hier wie bei allen Minimierungszugängen, nicht als befriedigend angesehen werden, da die Minimierung der Gesamtenergie gerade ein Kontinuum von möglichen Energiewerten voraussetzt.

Gabriel und Garber [2] gehen sorgfältig auf die Notwendigkeit ein, die gemittelte Gesamtenergie zu betrachten. Um die mittlere kinetische Energie zu bestimmen, benutzen sie die Unschärferelation und schätzen $\langle p^2/(2m) \rangle \approx \hbar^2/(8m(\Delta r)^2)$ ab, wobei Δr die Ortsunschärfe ist. An einem Beispiel wird diskutiert, daß die Heisenbergsche Unschärferelation allein nicht ausreicht, die Stabilität zu demonstrieren. Zusätzlich müssen noch Annahmen über die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Elektrons getroffen werden. Eine solche Annahme wird für die mittlere potentielle Energie benutzt, nämlich daß die Streuung Δr von der Größenordnung des Mittelwerts $\langle r \rangle$ ist: $\langle 1/r \rangle = \alpha/\Delta r$ (wobei α eine Zahl der Größenordnung 1 ist). Damit ist insbesondere, ähnlich wie bei Dorn und Bader, schon vorweggenommen, daß der mittlere Radius größer als Null ist. Die zu zeigende Stabilität des Atoms wurde also auch hier implizit hineingesteckt. Die Minimierung der Gesamtenergie führt zu einem Ausdruck für den Bohrschen Radius, der den Faktor α noch enthält. Im Grunde handelt es sich hier um eine etwas verfeinerte (und didaktisch überarbeitete) Variante des eingangs vorgestellten Arguments von Gottfried und Weisskopf.

Einen ganz anderen Zugang verfolgt Theis [9]. Er nimmt alle notwendigen Näherungen bereits am klassischen Potential vor und kann die quantenmechanischen Berechnungen dann exakt

durchführen. Die Grundidee ist dabei, das Coulomb-Potential durch einen geeignet gewählten dreidimensionalen Potentialtopf zu approximieren. Seine Breite wird durch den klassischen Umkehrradius R bei vorgegebener Energie E zu

$$E = -e^2 / (4\pi\epsilon_0 R) \quad (7)$$

bestimmt. Die Tiefe V_0 ergibt sich durch Mittelung des Coulomb-Potentials über eine Kugel mit Radius R zu $V_0 = (3/2)E$. Das diskrete Spektrum und die Existenz eines Grundzustandes folgen dann direkt aus den Randbedingungen des Potentialtopf-Modelles. Konkret erhält man die Energien

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2R} \right)^2 6n^2. \quad (8)$$

Nun wird der oben angegebene Wert für V_0 eingesetzt und mit Gl. (7) die Potentialtopfbreite R eliminiert. Man erhält so eine algebraische Gleichung für die Energie E , die bis auf einen Zahlenfaktor auf das korrekte Spektrum (1) führt.

Etwas verwirrend, wenn auch nicht unrichtig, ist bei diesem Verfahren, daß das verwendete Potential von der gesuchten Energie abhängt. Die algebraische Gleichung für die Energiewerte erhält so den Charakter einer Selbstkonsistenzbedingung. Insgesamt liegt hier eine befriedigende Methode vor, das Spektrum und die Stabilität des Wasserstoffatoms zu berechnen. Insbesondere ist die Struktur der zugrundeliegenden Näherungen klar durchschaubar. Als einen Vorzug kann man auch ansehen, daß das hier benutzte Vorgehen (nämlich das eigentliche Potential durch ein einfacheres zu ersetzen) als ein Beispiel für die in der theoretischen Physik üblichen Näherungsmethoden gelten kann.

Vakuumschwankungen, Strahlungsrückwirkung und die Stabilität der Atome

Die Frage nach der Stabilität der Atome in der Quantenmechanik birgt mehr Subtilitäten, als man nach der vorangegangenen Diskussion meinen möchte. Man könnte annehmen, daß das Problem erledigt ist, wenn die Lösungen der Schrödingergleichung für das Elektron im Coulomb-Potential des Kerns gefunden sind. Ihre Stationarität sollte die Stabilität des Atoms garantieren.

Um zu zeigen, daß dem nicht so ist, soll noch einmal die Analogie zum klassischen Rutherford-Modell hergestellt werden (eine ausführlichere Darstellung findet sich in [1]). Für ein klassisches Punktelektron, das sich im Coulombfeld des Kerns bewegt, ergeben sich Kreis- und Ellipsenbahnen als Lösung, genau wie beim Keplerproblem. Die Instabilität des Rutherford-Atoms zeigt sich erst, wenn man berücksichtigt, daß das beschleunigte Elektron elektromagnetische Wellen abstrahlt und infolgedessen Energie verliert. Der entscheidende Punkt ist also die Kopplung an das Strahlungsfeld.

Genau diese Wechselwirkung wird jedoch bei der üblichen Behandlung des Wasserstoff-Atoms, wie sie in jedem Lehrbuch der Quantenmechanik steht, vernachlässigt. Das so beschriebene Atom kann also gar nicht strahlen; das Problem ist unvollständig gelöst. Dieser Feststellung entspricht, daß sich bei dem Zugang ein Zuviel an Stabilität ergibt: Nicht nur der Grundzustand, sondern auch alle angeregten Zustände werden für stabil befunden (da $\langle \psi_0 | \psi_n \rangle = 0$). Das ist in deutlichem Widerspruch zur Empirie, die für angeregte Zustände von Atomen eine typische Lebensdauer von etwa 10^{-8} sec liefert, nach der sie durch spontane Emission in den Grundzustand übergehen.

Man muß also die erweiterte Problemstellung betrachten, daß das Atom zusätzlich zum Coulomb-Feld des Kerns mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld wechselwirkt. Die Kopplung erfolgt über den Wechselwirkungs-Hamiltonoperator $H_{WW} = -\vec{d} \cdot \vec{E}$, wobei \vec{d} das Dipolmoment des Atoms und \vec{E} das elektrische Feld ist. Man muß jedoch beachten, daß sich ein

quantenmechanisch korrektes Resultat nur dann ergibt, wenn man für \vec{E} ein quantisiertes Feld einsetzt. Damit haben wir ein Problem der Quantenelektrodynamik vorliegen.

Berücksichtigt man die beim Rutherford-Atom gemachten Erfahrungen, so wird mit dieser zusätzlichen Kopplung die Stabilität des Grundzustandes wieder zur offenen Frage. Die Antwort darauf weist eine interessante physikalische Struktur auf. Zum Glück ist es zu ihrem Verständnis nicht notwendig, sich in den Apparat der Quantenelektrodynamik zu vertiefen, da es eine ganz anschauliche Interpretation gibt. Den zugehörigen Formalismus findet man in [10], zusammen mit lesenswerten weitergehenden Erörterungen.

Um die Vorgänge bei der spontanen Emission näher zu verstehen, erinnern wir daran, daß das quantenmechanische Vakuum nicht einfach eine eigenschaftslose Leere ist. Das elektromagnetische Feld ist im Vakuum ständigen Fluktuationen unterworfen. Diese Nullpunktsschwankungen nennt man Vakuumfluktuationen. In Anwesenheit des Atoms besteht das Feld also aus zwei Anteilen: zum einen den Vakuumfluktuationen und zum anderen dem durch das Atom selber verursachten Anteil, der zum klassisch abgestrahlten Feld analog ist. Durch die Wechselwirkung zwischen Atom und Feld beeinflussen beide Anteile die Bewegung des Elektrons.

Zur ungestörten Bewegung des Elektrons um den Kern treten also zwei zusätzliche Einflüsse hinzu: der Anteil der Strahlungsrückwirkung, der auf das abgestrahlte Feld zurückgeht und der Anteil der Vakuumfluktuationen. Der erstere war schon beim klassischen Rutherford-Atom vorhanden, während der zweite als ein echter Quanteneffekt neu hinzutritt.

Um die Wirkung der beiden Einflüsse auf das Atom zu bestimmen, bedarf es ausführlicher quantenelektrodynamischer Rechnungen. Das Ergebnis ist aber einfach: Der Anteil der Strahlungsrückwirkung führt zu einer kontinuierlichen Abnahme der mittleren atomaren Energie. Das ist ganz analog zum klassischen Atommodell. Gäbe es nur diesen Anteil, wäre das quantenmechanische Atom ebenfalls instabil.

Der Unterschied kommt vom zweiten Anteil, dem der Vakuumfluktuationen. Für ein Atom, das anfänglich in einem angeregten Zustand ist, wirken sie ebenfalls abregend. (Das entspricht dem alten heuristischen Bild der spontanen Emission als durch Vakuumfluktuationen induzierte stimulierte Emission [11]). Angeregte Atome sind also instabil und zerfallen im Einklang mit der Erfahrung durch spontane Emission.

Für ein Atom im Grundzustand tendieren die Vakuumfluktuationen indessen dazu, das Atom in höhere Zustände anzuregen. Die detaillierte Analyse zeigt, daß im Grundzustand die Einflüsse von Vakuumfluktuationen und Strahlungsrückwirkung gleich groß sind und entgegengesetztes Vorzeichen besitzen. Sie heben sich in ihrer Wirkung also auf und der Grundzustand ist stabil. Er hat diese Stabilität aber nur dieser subtilen Balance zwischen Vakuumfluktuationen und Strahlungsrückwirkung zu verdanken. Bildlich kann man sagen, daß die strahlungsbedingten Energieverluste des Atoms an das Vakuum durch die Energie ausgeglichen werden, die durch die Schwankungen des elektromagnetischen Feldes auf das Atom übertragen wird.

Die Bilanz dieser Ausführungen ist, daß die Stabilität selbst des Wasserstoffatoms im Gegensatz zur landläufigen Meinung ein nichttriviales Problem ist, dessen Auflösung aber Einsicht in interessante physikalische Vorgänge ermöglicht. Zur Behandlung in der Schule ist das Thema sicherlich zu kompliziert, doch als Hintergrundinformation für Lehrerinnen und Lehrer möglicherweise nützlich. Nicht zuletzt ist es reizvoll, daß man mit dem Leitmotiv der Stabilität von den frühesten Anfängen der Atomphysik bis hin zur aktuellen Forschung (z. B. [12]) geführt wird.

Anhang: Vakuumfluktuationen und Strahlungsrückwirkung

Die im letzten Abschnitt beschriebenen Ergebnisse dürften allgemein wenig bekannt sein. Um die interessierten Leser nicht nur auf die Spezialliteratur [10, 12] verweisen zu müssen, sollen in diesem Anhang die Wirkungen von Vakuumfluktuationen und Strahlungsrückwirkung in etwas formalerer Weise erläutert werden. Dabei wird allerdings eine gewisse Vertrautheit mit Konzepten wie Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Photonen vorausgesetzt. Der Anhang ist jedoch nicht zum Verständnis des restlichen Textes erforderlich.

Zur Beschreibung eines ans quantisierte Strahlungsfeld gekoppelten Atoms betrachten wir ein Modell mit dem folgenden Hamiltonoperator:

$$H = H_0 + H_F + H_{WW}. \quad (9)$$

Dabei ist H_0 der in Gl. (5) angegebene Hamiltonoperator für ein Elektron im Coulombfeld des Kerns. Die Kopplung zwischen Atom und Strahlungsfeld erfolgt, wie schon oben erwähnt, durch den Wechselwirkungs-Hamiltonoperator $H_{WW} = -\vec{d} \cdot \vec{E}$, mit dem Dipolmoment \vec{d} des Atoms und dem elektrischen Feld \vec{E} . Das elektrische Feld kann nach Impulseigenfunktionen entwickelt werden (mit $\vec{g}_{\vec{k}} = i\vec{\epsilon}\sqrt{\hbar\omega}/2\epsilon_0V$ und dem Polarisationsvektor $\vec{\epsilon}$):

$$\vec{E}(t, \vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \vec{g}_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}} + a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k}\vec{x}} \right). \quad (10)$$

Der Operatorcharakter des Feldes zeigt sich dabei in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_{\vec{k}}^\dagger$ und $a_{\vec{k}}$, die bei Anwendung auf einen Zustandsvektor ein Photon mit dem Impuls \vec{k} erzeugen oder vernichten (vgl. z. B. [13]). Für sie gelten die schon von den Auf- und Absteigeoperatoren beim harmonischen Oszillator bekannten Vertauschungsrelationen $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$. Schließlich ist in (9) $H_F = \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$ der Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes.

Korrespondenzen zwischen klassischer Physik und Quantenmechanik lassen sich am einfachsten im Heisenberg-Bild aufzeigen. Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für eine beliebige Observable A lauten $\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)]$. Für den Vernichtungsoperator $a_{\vec{k}}$ nehmen sie die folgende Gestalt an:

$$\frac{d}{dt}a_{\vec{k}}(t) = -i\omega_{\vec{k}}a_{\vec{k}}(t) + \frac{i}{\hbar}\vec{d}[\vec{E}(t, \vec{x}), a_{\vec{k}}(t)]. \quad (11)$$

Auf der rechten Seite dieser Gleichung kann man zwei Beiträge unterscheiden: Der erste Term stammt vom freien Hamiltonoperator des Feldes, während der zweite durch die Wechselwirkung bedingt ist. Entsprechend kann man die Lösungen dieser Gleichung schreiben als

$$\vec{E}(t, \vec{x}) = \vec{E}^f(t, \vec{x}) + \vec{E}^q(t, \vec{x}). \quad (12)$$

Wir können demnach zwei Anteile des Feldes unterscheiden: \vec{E}^f ist das freie Feld, das auch im Vakuum vorhanden ist; es stellt also die *Vakuumfluktuationen* dar. Der zweite Term, der sogenannte Quellanteil, repräsentiert das durch die Anwesenheit des Atoms verursachte Feld.

Durch die Wechselwirkung wird auch das Atom von beiden Beiträgen beeinflusst. Die Heisenberg-Gleichung für eine beliebige Atom-Variable G (z. B. Impuls, Energie) lautet nämlich

$$\frac{d}{dt}G(t) = \frac{i}{\hbar}[H_0, G(t)] + \frac{i}{\hbar}\vec{E}(t, \vec{x})[\vec{d}(t), G(t)]. \quad (13)$$

Indem man das elektrische Feld in Vakuumfeld und Quellanteil aufspaltet, kann man dies schreiben als:

$$\frac{d}{dt}G(t) = \frac{i}{\hbar}[H_0, G(t)] + \frac{i}{\hbar}\vec{E}^f(t, \vec{x})[\vec{d}(t), G(t)] + \frac{i}{\hbar}\vec{E}^s(t, \vec{x})[\vec{d}(t), G(t)]. \quad (14)$$

$$= \frac{i}{\hbar}[H_0, G(t)] + \left(\frac{dG}{dt}\right)_{vf} + \left(\frac{dG}{dt}\right)_{sr} \quad (15)$$

Die zeitliche Änderung von G erfolgt also über drei Mechanismen: Zum einen die freie Änderung, die auch ohne die Kopplung ans Feld stattfindet (also die oben besprochene stabile Bewegung des Elektrons im Coulombpotential des Kerns); zum andern die durch das Vakuumfeld beeinflusste Bewegung (der Anteil der Vakuumfluktuationen) sowie die Änderung, die durch das vom Atom selbst erzeugte Feld verursacht wird (der Anteil der Strahlungsrückwirkung).

Um die Stabilität eines Atoms zu untersuchen, interessieren wir uns konkret für die zeitliche Änderung der mittleren atomaren Anregungsenergie $\langle H_0 \rangle$. Ist sie kleiner als Null, so verliert das Atom Energie und geht in einen niedrigeren Zustand über. Eine positive Variationsrate der Anregungsenergie entspricht einem Zugewinn an Energie und somit einer Anregung. Wenn $\langle H_0 \rangle$ konstant ist, bleibt das Atom in seinem Zustand.

Da H_0 mit sich selbst vertauscht, wird aus Gleichung (14):

$$\left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle_{vf} + \left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle_{sr}. \quad (16)$$

Die expliziten Rechnungen, deren Wiedergabe den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden, zeigen nun, daß für ein Atom im Grundzustand

$$\left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle_{vf} = - \left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle_{sr}. \quad (17)$$

Die Anteile von Vakuumfluktuationen und Strahlungsrückwirkung zur Energie-Änderungsrate heben sich für ein Atom im Grundzustand gerade auf. Der Grundzustand eines Atoms ist also *stabil*, selbst wenn die Kopplung ans elektromagnetische Feld einbezogen wird. Darin liegt der große Unterschied zur klassischen Physik.

Für ein Atom in einem angeregten Zustand sieht die Situation anders aus. Hier gilt nämlich

$$\left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle_{vf} = \left\langle \frac{dH_0}{dt} \right\rangle_{sr} = -\frac{1}{2}\Gamma\langle H_0 \rangle, \quad (18)$$

wobei $\Gamma = e^2\omega^3 d^2 / (3\pi\epsilon_0\hbar c^3)$ die Rate der spontanen Emission ist. Damit wird aus (16)

$$\frac{d}{dt}\langle H_0 \rangle = -\Gamma\langle H_0 \rangle. \quad (19)$$

Das Atom zerfällt somit exponentiell in den Grundzustand (Übergänge in andere Zustände wurden außer Acht gelassen). Dies ist die quantenelektrodynamische Erklärung der spontanen Emission.

Literatur

- [1] R. Müller, H. Wiesner, *Von der Unzulänglichkeit des Einfachen – konkrete und abstrakte Vorstellungen in der Quantenphysik*, Physik in der Schule **33**, 452 (1995).
- [2] A. Gabriel, W.-D. Garber, *Möglichkeiten zur Behandlung des Wasserstoffatoms in der Schule*, PhD **9** (4), 273 (1981).
- [3] H. Wiesner, *Elementarisierung der Quantenphysik: Didaktische Erfordernisse und fachliche Bedenken*, in: H. Fischler (Hrsg.): *Quantenphysik in der Schule*, IPN Kiel (1992), S. 184.

- [4] F. Dorn, F. Bader, *Physik, Oberstufe Gesamtband 12/13*, Hannover 1986.
- [5] A. Berg, H. Fischler, M. Lichtfeldt, M. Nitzsche, B. Richter, F. Walther, *Einführung in die Quantenphysik. Ein Unterrichtsvorschlag für Grund- und Leistungskurse*, Pädagogisches Zentrum Berlin (1989).
- [6] A. Brachner, R. Fichtner, *Quantenmechanik für Lehrer und Studenten*, Schroedel, Hannover (1977).
- [7] A. Brachner, R. Fichtner, *Quantenmechanik*, Schroedel, Hannover (1980).
- [8] K. Gottfried, V. F. Weisskopf, *Concepts of particle physics Vol. I*, Clarendon Press, Oxford (1984).
- [9] W. R. Theis, *Begründung diskreter Energiewerte für gebundene Zustände ohne Lösung der Eigenwertgleichung*, *PhuD* **22** (3), 198 (1994).
- [10] J. Dalibard, J. Dupont-Roc, C. Cohen-Tannoudji, C., *Vacuum fluctuations and radiation reaction: identification of their respective contributions*, *J. Physique* **43**, 1617 (1982).
- [11] V. F. Weisskopf, *Probleme der neueren Quantentheorie des Elektrons*, *Naturwiss.* **23**, 41 (1935).
- [12] J. Audretsch, R. Müller, *Spontaneous excitation of an accelerated atom: the contributions of vacuum fluctuations and radiation reaction*, *Phys. Rev. A* **50**, 1755 (1994).
- [13] F. Mandl, G. Shaw, *Quantenfeldtheorie*, Aula-Verlag Wiesbaden, 1993; W. Kuhn, J. Strnad, *Quantenfeldtheorie – Photonen und ihre Deutung*, Vieweg, Braunschweig 1995.

Adressen der Autoren

Hartmut Wiesner, Sektion Physik der Universität München, Schellingstr. 4, 80333 München.
 Rainer Müller, Sektion Physik der Universität München, Theresienstr. 37, 80333 München,

Bildbeschriftungen

Abb. 1: Potentialmodell beim Ansatz von Theis.