

ISSN 0073-8433

# PUBLIKATIONEN ZU WISSENSCHAFTLICHEN FILMEN

SEKTION  
**TECHNISCHE WISSENSCHAFTEN  
NATURWISSENSCHAFTEN**

SERIE 8 · NUMMER 26 · 1984

FILM C 1548

**Quantenmechanik des Wasserstoffatoms  
Strahlungsübergänge  
im semi-klassischen Modell**



INSTITUT FÜR DEN WISSENSCHAFTLICHEN FILM · GÖTTINGEN

*Angaben zum Film:*

Video-Stummfilm, farbig, ca. 4 min. Hergestellt 1983, veröffentlicht 1984.

Der Film ist für die Verwendung im Hochschulunterricht bestimmt. Veröffentlichung aus dem Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Clausthal-Zellerfeld, Prof. Dr. K. HERMANN, J. CORDES, und dem Institut für den Wissenschaftlichen Film, Göttingen, Dr. H. RUDOLPH; Video-Technik: Th. SPIELBÖCK; Zeichentrickherstellung: H.G. GRASKE.

*Zitierform:*

HERMANN, K., J. CORDES und INST. WISS. FILM: Quantenmechanik des Wasserstoffatoms – Strahlungsübergänge im semi-klassischen Modell. Film C 1548 des IWF, Göttingen 1984. Publikation von K. HERMANN und J. CORDES, Publ. Wiss. Film., Sekt. Techn. Wiss./Naturw., Ser. 8, Nr. 26/C 1548 (1984), 29 S.

*Anschrift der Verfasser der Publikation:*

Prof. Dr. K. HERMANN, Institut für Theoretische Physik der TU Clausthal-Zellerfeld, Leibnizstr. 10, 3392 Clausthal-Zellerfeld.

J. CORDES, Institut für Theoretische Physik der TU Clausthal-Zellerfeld, Leibnizstr. 10, 3392 Clausthal-Zellerfeld.

---

PUBLIKATIONEN ZU WISSENSCHAFTLICHEN FILMEN

Sektion BIOLOGIE

Sektion PSYCHOLOGIE · PÄDAGOGIK

Sektion ETHNOLOGIE

Sektion TECHNISCHE WISSENSCHAFTEN

Sektion MEDIZIN

NATURWISSENSCHAFTEN

Sektion GESCHICHTE · PUBLIZISTIK

Herausgeber: H.-K. GALLE · Redaktion: E. BETZ, I. SIMON

PUBLIKATIONEN ZU WISSENSCHAFTLICHEN FILMEN sind die schriftliche Ergänzung zu den Filmen des Instituts für den Wissenschaftlichen Film und der Encyclopaedia Cinematographica. Sie enthalten jeweils eine Einführung in das im Film behandelte Thema und die Begleitumstände des Films sowie eine genaue Beschreibung des Filminhalts. Film und Publikation zusammen stellen die wissenschaftliche Veröffentlichung dar.

PUBLIKATIONEN ZU WISSENSCHAFTLICHEN FILMEN werden in deutscher, englischer oder französischer Sprache herausgegeben. Sie erscheinen als Einzelhefte, die in den fachlichen Sektionen zu Serien zusammengefaßt und im Abonnement bezogen werden können. Jede Serie besteht aus mehreren Lieferungen.

Bestellungen und Anfragen an: Institut für den Wissenschaftlichen Film  
Nonnenstieg 72 · D-3400 Göttingen  
Tel. (05 51) 20 22 02

FILME FÜR FORSCHUNG UND HOCHSCHULUNTERRICHT

KLAUS HERMANN, JOACHIM CORDES, Clausthal-Zellerfeld, und INSTITUT  
FÜR DEN WISSENSCHAFTLICHEN FILM, Göttingen:

Film C 1548

Quantenmechanik des Wasserstoffatoms  
Strahlungsübergänge im semi-klassischen Modell

Verfasser der Publikation: KLAUS HERMANN und JOACHIM CORDES

Mit 5 Abbildungen

Inhalt des Films:

Quantenmechanik des Wasserstoffatoms - Strahlungsübergänge im semi-klassischen Modell. Elektronische Übergänge im Wasserstoffatom, das an ein Strahlungsfeld gekoppelt ist, werden auf der Basis des semi-klassischen Modells diskutiert. Dabei beschreibt man das elektromagnetische Feld der Strahlung nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik, das Atom dagegen quantenmechanisch. Die Kopplung zwischen Atom und Strahlungsfeld kann man dann in zeitabhängiger Störungsrechnung erfassen. Nach einer kurzen Darstellung der theoretischen Grundlagen des semi-klassischen Modells werden die Strahlungsübergänge  $1s \leftrightarrow 2p$  ( $m=0, \pm 1$ ) im H-Atom diskutiert, wobei insbesondere auf das Zeitverhalten des Elektronenladungsschwerpunkts  $\langle \underline{r} \rangle$  und der Elektronendichte beim Übergang ausführlicher eingegangen wird. Dabei ist auch ein Vergleich der rotating wave-Näherung mit der exakten numerischen Lösung des semi-klassischen Modells möglich. Das Manuskript bildet die theoretische Grundlage zum vorliegenden Film, in dem der Zeitverlauf der Elektronendichte bei den erwähnten Übergängen in Trickaufnahmen auf der Basis von Computergrafiken dargestellt ist.

Summary of the Film:

Quantum Mechanics of the Hydrogen Atom - Radiative Transitions treated by the semi-classical model. Radiative transitions of the hydrogen atom are discussed on the basis of the semi-classical model. Here the radiation is described by classical electrodynamics whereas the H atom is treated quantum mechanically. The coupling between the atom and the radiation field is accounted for by time dependent perturbation theory. After a brief discussion of the theoretical basis of the semi-classical model the radiative transitions  $1s \longleftrightarrow 2p$  ( $m=0, \pm 1$ ) are described in some detail. In particular, results are given for the time dependence of the center of gravity  $\langle \underline{r} \rangle$  of the electron density and of the density itself. Also, comparison of the rotating wave approximation with the exact numerical solution of the semi-classical model is made. This manuscript forms a theoretical basis of the film which shows the time dependence of the electron density for the above transitions using an animation based on computer graphics.

Résumé du Film:

La mécanique quantique de l'atome d'hydrogène: Transitions radiatives traités par le modèle semi-classique. Le modèle semi-classique permet d'étudier les transitions radiatives de l'atome d'hydrogène. Dans ce modèle, le champ de rayonnement est décrit par l'électrodynamique classique alors que l'atome d'hydrogène est traité par la mécanique quantique. Le couplage entre l'atome et le champ de rayonnement est analysé par la théorie des perturbations dépendant du temps. Après une brève discussion des bases théoriques du modèle semi-classique les transitions radiatives  $1s \longleftrightarrow 2p$  ( $m=0, \pm 1$ ) sont décrites en détail. En particulier, des résultats sont donnés pour la dépendance en fonction du temps du barycentre de la charge électronique  $\langle \underline{r} \rangle$  et de la densité électronique elle-même au cours de la transition. On compare également les résultats fournis par l'approximation "rotating wave" avec la solution numérique exacte du modèle semi-classique. Le manuscript fournit la base théorique du film qui montre la dépendance en fonction du temps de la densité électronique au cours des transitions décrites plus haut en utilisant une simulation sur ordinateur.

## 1. Einleitung

Die Beschreibung der Emission und Absorption elektromagnetischer Strahlung durch Atome ist mit der Entwicklung der Quantenmechanik zu Beginn des 20. Jahrhunderts eng verbunden [1]. Hier stand zunächst die Erklärung von Spektrallinien im sichtbaren bzw. ultravioletten Bereich durch Übergänge im Elektronensystem der Atome im Vordergrund. Dabei zeigte es sich, daß eine Vielzahl experimenteller Befunde im sog. semi-klassischen Modell befriedigend erklärbar sind, in dem das elektromagnetische Feld nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik, die Zustände des atomaren Systems dagegen quantenmechanisch beschrieben werden. Die Kopplung des atomaren Elektronensystems mit dem elektromagnetischen Feld läßt sich dann im einfachsten Fall mit Hilfe von zeitabhängiger Störungstheorie erfassen. In dieser Näherung wurde das semi-klassische Modell in neuerer Zeit zum Beispiel bei der Beschreibung von Strahlungsübergängen in der Lasertheorie [2] eingesetzt.

Die vorliegende Arbeit behandelt elektronische Übergänge im Wasserstoffatom, das an ein elektromagnetisches Strahlungsfeld ankoppelt, auf der Basis des semi-klassischen Modells. Das H-Atom ist für eine theoretische Beschreibung besonders geeignet, da seine quantenmechanischen Elektronenzustände analytisch angebar sind. Weiterhin vereinfacht die Darstellung des Strahlungsfeldes durch eine ebene elektromagnetische Welle die Berechnung von Matrixelementen, die die elektronischen Übergänge charakterisieren, wesentlich. Die hier benutzten Näherungen gestatten natürlich keine quantitative Beschreibung der Lichtemission und Absorption des H-Atoms. Insbesondere lassen sich durch die Vernachlässigung der Strahlungsrückkopplung des Atoms keine spontanen Übergänge darstellen, d.h. die vorliegende Theorie bleibt auf induzierte Übergänge beschränkt. Im Rahmen dieses stark vereinfachten Modells kann man jedoch ein recht

anschauliches Bild des Zeitverlaufs der Elektronendichteverteilung beim Strahlungsübergang im Atom gewinnen, wie im folgenden gezeigt werden soll.

Die folgenden Abschnitte geben eine kurze Darstellung der Grundlagen des semi-klassischen Modells. Hieran schließt sich eine Diskussion der in der konkreten Anwendung benutzten algebraischen und numerischen Näherungsmethoden an. Schließlich werden die berechneten Zeitverläufe der Elektronendichte für Lyman-Übergänge zwischen den 1s- und 2p-Zuständen des H-Elektrons besprochen, wie sie mit Hilfe von Computergrafiken im Film C 1548 dargestellt sind.

## 2. Das semi-klassische Modell für strahlungsinduzierte Übergänge im H-Atom

Die hier im Zusammenhang mit strahlungsinduzierten Übergängen angesprochenen Grundlagen der Quantenmechanik des H-Atoms und der quantenmechanischen Störungstheorie sollen im folgenden nur stichwortartig zusammengefaßt werden. Für eine detaillierte Behandlung der Problematik sei auf die allgemein zugängliche Lehrbuchliteratur [3] verwiesen.

### 2.1. Grundlagen

Die quantenmechanischen Zustände des Elektrons im freien H-Atom ohne äußere Störung lassen sich im nicht-relativistischen Fall darstellen als Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$H_0 \Psi(\underline{r}, t) = i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) \quad (1)$$

zum Hamiltonoperator

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \quad (2)$$

wo  $\hbar$  die Plancksche Konstante,  $m$  die Masse des Elektrons,  $e$  seine Ladung und  $\epsilon_0$  die Influenzkonstante bedeutet. Die Ortsvariable  $\underline{r}$  tritt in (2) in Form des Laplaceoperators  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  sowie des inversen Abstands  $r^{-1} = (x^2 + y^2 + z^2)^{-\frac{1}{2}}$  auf. Für stationäre Zustände führt der Separationsansatz

$$\Psi(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon \cdot t\right) \quad (3)$$

auf die stationäre Schrödingergleichung

$$H_0 \psi(\underline{r}) = \epsilon \cdot \psi(\underline{r}) \quad (4)$$

für den Ortsanteil  $\psi(\underline{r})$  der elektronischen Wellenfunktion, welche man mit (2) und (4) auf analytischem Wege [3] berechnen kann. Für gebundene Zustände (mit negativer Energie  $\epsilon$ ) erhält man dabei

$$\psi(\underline{r}) = \psi_{n\ell m}(\underline{r}) = N_{n\ell} \cdot r^\ell \cdot \exp\left(-\gamma_n \cdot r\right) \cdot L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(2\gamma_n r\right) \cdot Y_{\ell m}(\chi, \phi) \quad (5)$$

$$n=1, 2, \dots, \quad \ell=0, 1, 2, \dots, n-1, \quad m=-\ell, -\ell+1, \dots, \ell$$

zur Energie

$$\epsilon = \epsilon_n = -\frac{\epsilon_R}{n^2} \quad (6)$$

Hier bedeuten  $L_C^b(x)$  die assoziierten Laguerrepolynome und  $Y_{\ell m}(\chi, \phi)$  die (normierten) Kugelflächenfunktionen. Die Konstanten in (5) und (6) lauten

$$N_{n\ell} = \left[ \left(2\gamma_n\right)^{2\ell+3} \cdot \frac{(n-\ell-1)!}{2n \cdot [(n+\ell)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

$$\gamma_n = \frac{1}{n \cdot a} \quad \text{mit} \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} = 0.529177 \cdot 10^{-10} \text{m} \quad (\text{Bohrscher Radius}) \quad (8)$$

und

$$\epsilon_R = \frac{e^4 m}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = 13.605804 \text{ eV} \quad (\text{Rydberg-Konstante}) \quad (9)$$

Damit ergeben sich die energetisch tiefsten gebundenen Elektronenzustände im H-Atom als

$$n=1, \quad \epsilon_1 = -\epsilon_R \quad \psi_{100}(\underline{r}) = \zeta_1 \cdot \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \quad (1s\text{-Zustand}) \quad (10a)$$

$$n=2, \quad \epsilon_2 = -\frac{1}{4}\epsilon_R \quad \psi_{200}(\underline{r}) = \zeta_2 \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \quad (2s\text{-Zustand}) \quad (10b)$$

$$\psi_{210}(\underline{r}) = \zeta_3 \cdot r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \cdot \cos \chi \quad (2p_0\text{-Zustand}) \quad (10c)$$

$$\psi_{211}(\underline{r}) = \zeta_3 \cdot r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \cdot \sin \chi \cdot e^{i\Phi} \quad (2p_1\text{-Zustand}) \quad (10d)$$

$$\psi_{21-1}(\underline{r}) = \zeta_3 \cdot r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \cdot \sin \chi \cdot e^{-i\Phi} \quad (2p_{-1}\text{-Zustand}) \quad (10e)$$

$$\text{mit} \quad \zeta_1 = (\pi \cdot a^3)^{-\frac{1}{2}}, \quad \zeta_2 = 2^{-\frac{3}{2}} \cdot \zeta_1, \quad \zeta_3 = (2a)^{-1} \cdot \zeta_2 \quad (10f)$$

Diese Zustände werden in den Anwendungsbeispielen (vgl. Abschnitt 3) zugrunde gelegt.

Da die Wellenfunktionen (3) der stationären Zustände des H-Elektrons, geschrieben in der Form

$$\psi_\mu(\underline{r}, t) = \psi_{n_\mu, l_\mu, m_\mu}(\underline{r}) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \epsilon_{n_\mu} \cdot t\right) \quad \mu = 1, 2, \dots \quad (11)$$



eine Orthonormalbasis im Ortsraum bilden, ist es sinnvoll, eine allgemeine zeitabhängige Wellenfunktion des Elektrons, wie sie bei Übergängen zwischen stationären Zuständen auftritt, durch eine Linearkombination der Form

$$\Psi(\underline{r}, t) = \sum_{\nu} c_{\nu}(t) \cdot \Psi_{\nu}(\underline{r}, t) \quad (12)$$

mit zeitabhängigen Koeffizienten  $c_{\nu}(t)$  darzustellen.

Ein Übergang des Elektrons von  $\Psi_{\nu_0}(\underline{r}, t)$  bei  $t=0$  nach  $\Psi_{\nu_1}(\underline{r}, t)$  bei  $t=\tau$  wäre dann durch die Koeffizientenwerte

$$c_{\nu_0}(t=0) = 1, \quad c_{\nu}(t=0) = 0 \quad (\nu \neq \nu_0)$$

und (13)

$$c_{\nu_1}(t=\tau) = 1, \quad c_{\nu}(t=\tau) = 0 \quad (\nu \neq \nu_1)$$

realisiert. Wird nun der Übergang durch eine äußere (zeitabhängige) Störung am Atom, charakterisiert durch einen Störoperator  $W(\underline{r}, t)$ , verursacht, so muß die Wellenfunktion  $\Psi(\underline{r}, t)$  Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$(H_0 + W) \Psi(\underline{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) \quad (14)$$

sein. Verwendet man hier die Darstellung (12) für  $\Psi(\underline{r}, t)$ , multipliziert (14) mit  $\Psi_{\mu}^*(\underline{r}, t)$  und integriert über den Ortsraum aus, so folgt wegen der Orthogonalität der H-Elektronenfunktionen, d.h. wegen

$$\int \Psi_{\mu}^*(\underline{r}, t) \cdot \Psi_{\nu}(\underline{r}, t) d^3r = \delta_{\mu\nu} \quad (15)$$

ein lineares Differentialgleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten  $c_{\nu}(t)$  in der Form

$$i\hbar \cdot \frac{d}{dt} c_{\mu}(t) = \sum_{\nu} W_{\mu\nu} \cdot c_{\nu}(t) \quad \text{für alle } \mu \quad (16)$$

wobei  $W_{\mu\nu}$  die Matrixelemente des Störoperators in der Basis der Funktionen (11) sind, d.h. es gilt

$$W_{\mu\nu} = \int \Psi_{\mu}^*(\underline{r}, t) \cdot W \Psi_{\nu}(\underline{r}, t) d^3r \quad . \quad (17)$$

Das in (16) angegebene Gleichungssystem soll im folgenden Ausgangspunkt für die Behandlung von strahlungsinduzierten Übergängen im H-Atom sein.

## 2.2. Kopplung des H-Atoms an das elektromagnetische Strahlungsfeld

In der einfachsten Näherung stellt man das Strahlungsfeld, das mit einem Atom in Wechselwirkung tritt, durch eine ebene elektromagnetische Welle dar. Dann ist das elektrische Wechselfeld schreibbar als

$$\underline{E}(\underline{r}, t) = \underline{E}_0 \cdot \cos(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t) \quad , \quad (18)$$

wo  $\underline{k}$  der Wellenzahlvektor und  $\omega$  die (Kreis-)Frequenz der Welle bedeutet. Entsprechendes gilt für das begleitende Magnetfeld  $\underline{H}(\underline{r}, t)$ . Die Darstellung (18) setzt voraus, daß das Strahlungsfeld beliebig lange eingeschaltet ist und für alle Zeiten bestehen bleibt. Dadurch sind Einschwing- und Abklingvorgänge bei Strahlungsübergängen von der hier gewählten theoretischen Behandlung ausgeschlossen. Nun läßt sich mit einfachen Mitteln zeigen, daß die Kopplung des Magnetfeldes an das H-Elektron deutlich schwächer ist als diejenige des elektrischen Feldes. Daher wird im folgenden die Wirkung des Magnetfeldes vernachlässigt. Eine weitere Näherung geht von der Überlegung aus, daß der Wellenlängenbereich von Strahlungsfeldern, die für elektronische Übergänge im H-Atom interessant sind, bei  $\lambda \sim 100$  nm liegt. Damit ist das in (18) auftretende Produkt

$$\left| \underline{k} \cdot \underline{r} \right| \leq k \cdot r = 2\pi \cdot \frac{r}{\lambda}$$

für Orte  $\underline{r}$  des H-Atoms, bei denen die elektronischen Wellenfunktionen (10) deutlich von null verschieden sind ( $\sim 0,1$  nm), stets in der Größenordnung  $10^{-3}$ , d.h. im allgemeinen klein gegenüber  $\omega \cdot t$  in (18). Dies erlaubt für den Atombereich eine Näherung von (18) in der Form

$$\underline{E}(\underline{r}, t) = \underline{E}(t) = \underline{E}_0 \cdot \cos(\omega t) = \frac{1}{2} \underline{E}_0 \cdot [e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}] \quad (19)$$

und das resultierende skalare Potential  $U(\underline{r}, t)$  durch das Strahlungsfeld kann man schreiben als

$$U(\underline{r}, t) = -\underline{r} \cdot \underline{E}(t) \quad (20)$$

Die Wirkung dieses äußeren Potentials auf das H-Atom läßt sich im Hamiltonoperator durch einen Zusatzterm

$$W(\underline{r}, t) = -e \cdot \underline{r} \cdot \underline{E}(t) = -\underline{m} \cdot \underline{E}(t) \quad (21)$$

mit

$$\underline{m} = e \cdot \underline{r} \quad (21a)$$

berücksichtigen, wobei man im Rahmen einer störungstheoretischen Behandlung  $W(\underline{r}, t)$  als Störoperator interpretieren kann. Die im Gleichungssystem (16) auftretenden Matrixelemente von  $W(\underline{r}, t)$  lauten dann

$$\begin{aligned} W_{\mu\nu} &= - \int \psi_{\mu}^*(\underline{r}, t) \cdot \underline{m} \cdot \underline{E}(t) \cdot \psi_{\nu}(\underline{r}, t) d^3r = \\ &= - \underline{E}(t) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot [\epsilon_{n_{\nu}} - \epsilon_{n_{\mu}}] \cdot t\right) \cdot \int \psi_{n_{\mu} \ell_{\mu} m_{\mu}}^*(\underline{r}) \cdot e \cdot \underline{r} \cdot \psi_{n_{\nu} \ell_{\nu} m_{\nu}}(\underline{r}) d^3r = \\ &= - \underline{E}(t) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot [\epsilon_{n_{\nu}} - \epsilon_{n_{\mu}}] \cdot t\right) \cdot \langle \underline{m} \rangle_{\mu\nu} \quad (22) \end{aligned}$$

Das in (22) auftretende Volumenintegral

$$\langle \underline{m} \rangle_{\mu\nu} = \int \psi_{n_{\mu} l_{\mu} m_{\mu}}^*(\underline{r}) \cdot \underline{m} \cdot \psi_{n_{\nu} l_{\nu} m_{\nu}}(\underline{r}) d^3 r \quad (23)$$

stellt physikalisch gerade das Dipolmatrixelement zwischen den durch  $\mu$  und  $\nu$  gekennzeichneten stationären Zuständen des H-Elektrons dar und läßt sich auf einfachem Wege analytisch auswerten [4]. Insbesondere kann man leicht zeigen, daß  $\langle \underline{m} \rangle_{\mu\nu}$  nur dann von null verschieden ist, wenn die sog. Dipol-Auswahlregeln gelten:

$$\begin{aligned} \langle \underline{m} \rangle_{\mu\nu} \neq 0 & \quad \text{nur falls } l_{\mu} = l_{\nu} \pm 1 \\ \langle m_z \rangle_{\mu\nu} \neq 0 & \quad \text{nur falls } m_{\mu} = m_{\nu} \\ \langle m_{x,y} \rangle_{\mu\nu} \neq 0 & \quad \text{nur falls } m_{\mu} = m_{\nu} \pm 1 \end{aligned} \quad (24)$$

Diese Auswahlregeln vereinfachen das Gleichungssystem (16) zur Berechnung von elektronischen Übergangszuständen des H-Atoms wesentlich, wie im folgenden gezeigt wird.

### 2.3. Berechnung von zeitabhängigen Zuständen beim Strahlungsübergang

Zur Berechnung von zeitabhängigen Wellenfunktionen beim Strahlungsübergang des H-Elektrons auf störungstheoretischem Weg muß man nun das Gleichungssystem (16) mit den entsprechenden Funktionen für die Matrixelemente der Störung,  $W_{\mu\nu}$ , nach (22) lösen. In der einfachsten Näherung, die hier ausschließlich behandelt werden soll [5], nimmt man an, daß beim Übergang des Elektrons von einem stationären Zustand, gekennzeichnet durch  $\Psi_1(\underline{r}, t)$ , in einen zweiten,  $\Psi_2(\underline{r}, t)$ , nur diese beiden Zustände in der Darstellung (12) des Übergangszustands wesentlich sind. Dann läßt sich (12) näherungsweise ersetzen durch

$$\Psi(\underline{r}, t) = c_1(t) \cdot \Psi_1(\underline{r}, t) + c_2(t) \cdot \Psi_2(\underline{r}, t) \quad (25)$$

Für ein solches Zwei-Zustandssystem erhält man als Bestimmungsgleichungen für die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten nach (16)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t) &= W_{11}(t) \cdot c_1(t) + W_{12}(t) \cdot c_2(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t) &= W_{21}(t) \cdot c_1(t) + W_{22}(t) \cdot c_2(t) \end{aligned} \quad (26)$$

Setzt man hier die in Abschnitt 2.2. angegebenen Störmatrixelemente (22) ein und berücksichtigt die Dipol-Auswahlregeln (24), so erhält man nach einfachen Umformungen das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_1(t) &= \kappa(t) \cdot c_2(t) \\ \frac{d}{dt} c_2(t) &= -\kappa^*(t) \cdot c_1(t) \end{aligned} \quad (27)$$

mit

$$\kappa(t) = \frac{i}{\hbar} \underline{E}_0 \cdot \langle \underline{m} \rangle_{12} \cdot \cos(\omega t) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} [\epsilon_{n_2} - \epsilon_{n_1}] \cdot t\right) \quad (28)$$

Das Gleichungssystem (27) läßt sich mit der allgemeinen Kopplungsfunktion  $\kappa(t)$  aus (28) nicht analytisch geschlossen lösen. Man muß daher entweder weitere Näherungen in  $\kappa(t)$  machen oder das System (27) auf numerischem Wege lösen. Beide Vorgehensweisen sollen im folgenden kurz angesprochen werden.

Für das analytische Näherungsverfahren schreibt man (28) in der Form

$$\kappa(t) = \eta \cdot [e^{i\Omega_- \cdot t} + e^{i\Omega_+ \cdot t}] \quad (29)$$

mit

$$\eta = \frac{i}{2\hbar} \cdot \underline{E}_0 \cdot \langle \underline{m} \rangle_{12} \quad (30a)$$

und

$$\Omega_{\pm} = \frac{1}{\hbar} \cdot [\epsilon_{n_1} - \epsilon_{n_2} \mp \hbar\omega] \quad (30b)$$

Hieraus erkennt man, daß  $\kappa(t)$  in seiner Zeitabhängigkeit durch zwei Frequenzen,  $\Omega_+$  bzw.  $\Omega_-$ , bestimmt ist. Geht man nun von der experimentellen Situation des Strahlungsübergangs aus, so liegt die Einstrahlungsfrequenz  $\omega$  stets nahe bei  $\frac{1}{\hbar} \cdot |\epsilon_{n_1} - \epsilon_{n_2}|$ , so daß mit  $\epsilon_{n_1} < \epsilon_{n_2}$  die Frequenz  $\Omega_+$  betragsmäßig wesentlich größer ist als  $\Omega_-$ . Dann ist aber der grobe Zeitverlauf des Übergangs hauptsächlich durch den langsam oszillierenden Anteil in  $\kappa(t)$  bestimmt, so daß man  $\kappa(t)$  in guter Näherung ersetzen kann durch

$$\kappa(t) = \eta \cdot e^{i\Omega_- \cdot t} \quad (31)$$

In dieser sog. rotating wave-(RW)-Näherung [2] läßt sich das Gleichungssystem (27) analytisch lösen und man erhält mit den Randbedingungen

$$c_1(t=0) = 1 \quad , \quad c_2(t=0) = 0 \quad (32)$$

und der Normierungsbedingung für die Wellenfunktion (25)

$$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1 \quad (32a)$$

als Lösungen

$$c_1(t) = \alpha_+ \cdot e^{i\beta_+ \cdot t} + \alpha_- \cdot e^{i\beta_- \cdot t}$$

$$c_2(t) = \frac{i}{\eta} \cdot [\alpha_+ \beta_+ \cdot e^{-i\beta_- \cdot t} + \alpha_- \beta_- \cdot e^{-i\beta_+ \cdot t}] \quad (33)$$

mit

$$\alpha_{\pm} = \frac{1}{2} \cdot \left[ 1 \mp \frac{\Omega_-}{2W} \right] , \quad \beta_{\pm} = \frac{\Omega_-}{2} \pm W , \quad (33a)$$

wobei

$$W = \left[ \left( \frac{\Omega_-}{2} \right)^2 + |\eta|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{bedeutet.} \quad (33b)$$

Für die Betragsquadrate der Koeffizienten erhält man schließlich

$$|c_1(t)|^2 = 1 - \left[ 1 - \left( \frac{\Omega_-}{2W} \right)^2 \right] \cdot \sin^2 Wt$$

bzw.

(34)

$$|c_2(t)|^2 = \left[ 1 - \left( \frac{\Omega_-}{2W} \right)^2 \right] \cdot \sin^2 Wt .$$

Diese Größen lassen sich als quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten interpretieren, wobei  $|c_i(t)|^2$  gerade die Wahrscheinlichkeit angibt, das H-Elektron bei einer Beobachtung zur Zeit  $t$  im stationären Zustand  $\Psi_i(\underline{r}, t)$  vorzufinden. Man erkennt aus (33), (34) sofort, daß ein Übergang

$$\Psi_1(\underline{r}, t) \Big|_{t=0} \longrightarrow \Psi_2(\underline{r}, t) \Big|_{t=\tau} ,$$

d.h.

$$\left. \begin{array}{l} c_1(t=0) = 1 \\ c_2(t=0) = 0 \end{array} \right\} \longrightarrow \left. \begin{array}{l} c_1(t=\tau) = 0 \\ c_2(t=\tau) = 1 \end{array} \right\} , \quad (35)$$

nur dann stattfindet, wenn die Resonanzbedingung

$$\Omega_- = 0 \quad \text{oder} \quad \hbar\omega = \epsilon_{n_2} - \epsilon_{n_1} \quad (36)$$

gilt. Die zugehörige Übergangszeit  $\tau$  ergibt sich dann zu

$$\tau = \frac{\pi}{2 |\eta|} \quad (37)$$

und ist somit im vorliegenden Modell nach (30a) durch die elektrische Feldstärke  $\underline{E}_0$  des Strahlungsfeldes und das wirksame Dipolmoment  $\langle \underline{m} \rangle$  festgelegt. Die Übergangszeit  $\tau$  ist im allgemeinen groß gegenüber der Schwingzeit  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  des Strahlungsfeldes. Im Experiment findet man  $\tau/T \approx 10^7$ . Im Gegensatz hierzu wurde in den Modellrechnungen (vgl. Abschnitt 3) die Feldstärke  $\underline{E}_0$  so groß gewählt, daß gilt  $\tau/T \approx 10$ . Hierdurch lassen sich oszillatorische Effekte in der Elektronendichte, charakterisiert durch die Strahlungsfrequenz  $\omega$ , über den Gesamtbereich des Übergangs anschaulich darstellen. Für die Elektronendichte  $\rho(\underline{r}, t)$  des H-Elektrons gilt nämlich im Resonanzfall (36) nach (25), (33)

$$\begin{aligned} \rho(\underline{r}, t) &= e \cdot |\Psi(\underline{r}, t)|^2 = \\ &= e \cdot \left\{ \left| \psi_{n_1 \ell_1 m_1}(\underline{r}) \right|^2 + \left( \left| \psi_{n_2 \ell_2 m_2}(\underline{r}) \right|^2 - \left| \psi_{n_1 \ell_1 m_1}(\underline{r}) \right|^2 \right) \cdot \sin^2 |\eta| t + \right. \\ &\quad + c_1(t) \cdot c_2^*(t) \cdot \psi_{n_1 \ell_1 m_1}(\underline{r}) \cdot \psi_{n_2 \ell_2 m_2}^*(\underline{r}) \cdot e^{i\omega t} + \\ &\quad \left. + c_1^*(t) \cdot c_2(t) \cdot \psi_{n_1 \ell_1 m_1}^*(\underline{r}) \cdot \psi_{n_2 \ell_2 m_2}(\underline{r}) \cdot e^{-i\omega t} \right\} \quad (38) \end{aligned}$$

Die RW-Näherung liefert somit eine einfache analytische Darstellung des Absorptionsvorgangs, bei dem das H-Elektron vom Zustand  $\Psi_1(\underline{r}, t)$  bei  $t=0$  in den energetisch höher liegenden Zustand  $\Psi_2(\underline{r}, t)$  übergeht. Die dazu notwendige Energie  $\Delta E = \epsilon_{n_2} - \epsilon_{n_1} = \hbar\omega$  nimmt das Elektron aus dem Strahlungsfeld. Verfolgt man die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten  $c_1(t)$ ,  $c_2(t)$  von  $t=\tau$  ausgehend weiter, so erkennt man aus (33), (34), daß das Elektron zwischen  $t=\tau$  und  $t=2\tau$  von  $\Psi_2(\underline{r}, t)$  wieder zum Ausgangszustand  $\Psi_1(\underline{r}, t)$  zurückgeht, wobei es die Energie  $\Delta E$  an das Strahlungsfeld zurückgibt. Hierdurch wird gerade ein



Emissionsvorgang beschrieben. Im weiteren Zeitablauf wiederholen sich dann Absorption und Emission periodisch. Dieser Vorgang, der in der Natur nicht realisiert ist, kommt durch die Vernachlässigung der Strahlungsrückkopplung im semi-klassischen Modell zustande [2] und ist nicht durch die RW-Näherung verursacht. Auf weitere Ergebnisse der RW-Näherung wird in Abschnitt 3 eingegangen.

Für eine direkte numerische Lösung des Gleichungssystems (27) lassen sich die Standardverfahren der numerischen Mathematik wie z.B. die Runge-Kutta-Methode einsetzen. In der vorliegenden Arbeit wurde die Methode der Transfermatrix zur Lösung von (27) gewählt, deren Implementierung im Computer besonders einfach ist. Hierzu wird die Funktion  $\kappa(t)$  in einem genügend feinen  $t$ -Raster durch eine Treppenfunktion genähert, was bereichsweise analytische Lösungen von (27) erlaubt. Die Gesamtlösung erhält man schließlich aus der Forderung des stetigen Übergangs der analytischen Lösungen von benachbarten Bereichen. Für eine ausführliche Diskussion der Methode sei auf [5] verwiesen.

### 3. Ergebnisse der numerischen Modellrechnungen

Im folgenden sollen die Ergebnisse aus dem semi-klassischen Modell am Beispiel der Übergänge zwischen dem  $1s$ - und den  $2p$ -Zuständen des H-Atoms erläutert werden. Diese Übergänge, die für die Absorptions- bzw. Emissionslinie größter Frequenz in der Lyman-Serie des H-Atoms verantwortlich sind, lassen sich rechnerisch leicht behandeln, da die zugehörigen Wellenfunktionen, beschrieben durch (10a,c-e), besonders einfache Form haben. Insbesondere läßt sich das Dipolmatrixelement  $\langle \underline{m} \rangle_{12}$  in diesen Fällen leicht berechnen. Es gilt

$$n_1 l_1 m_1 = 1 \ 0 \ 0 \quad , \quad n_2 l_2 m_2 = 2 \ 1 \ 0$$

$$\langle \underline{m} \rangle_{12} = \frac{128}{243} \cdot \sqrt{2} \cdot (0, 0, 1) \cdot (ea) \quad (39a)$$

und

$$n_1 \ell_1 m_1 = 1 \ 0 \ 0, \quad n_2 \ell_2 m_2 = 2 \ 1 \ \pm 1$$

$$\langle \underline{m} \rangle_{12} = \frac{128}{243} \cdot (1, \pm i, 0) \cdot (ea) \quad . \quad (39b)$$

### 3.1. Der Übergang $1s \leftrightarrow 2p$ ( $m=0$ )

Die Elektronendichteverteilung  $\rho_{1,2}(\underline{r}) = e \cdot |\Psi_{1,2}(\underline{r}, t)|^2$  der beiden stationären Zustände des H-Elektrons,  $n_1 \ell_1 m_1 = 1 \ 0 \ 0$  ( $1s$ ) bzw.  $n_2 \ell_2 m_2 = 2 \ 1 \ 0$  ( $2p_0$ ), ist in Abb. 1a,b als "Ladungswolke" in einem Schnitt durch die  $xz$ -Ebene mit dem Atomzentrum im Ursprung wiedergegeben. Hier sind die Funktionswerte von  $\rho_{1,2}(\underline{r})$  längs der  $xz$ -Ebene mit Hilfe eines Computerprogramms in Graustufen umgewandelt

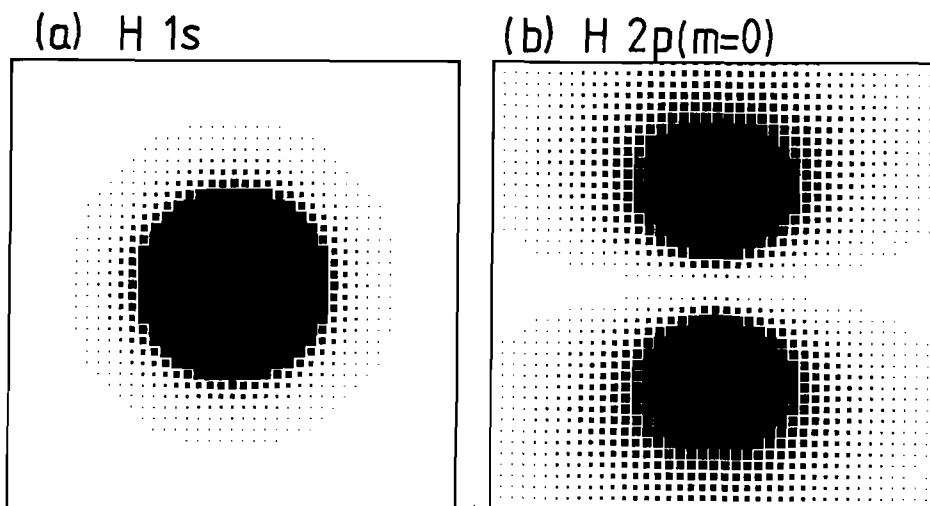


Abb. 1. Rastergrafische Darstellung der Ladungsverteilung im H-Atom längs der  $xz$ -Ebene (a) für den  $1s$ -Zustand, (b) für den  $2p$  ( $m=0$ )-Zustand. Das Atomzentrum befindet sich jeweils in der Bildmitte

und in einem einfachen Raster - größere Rasterpunkte entsprechen höheren Funktionswerten - dargestellt [ 6 ]. Diese Darstellung wird bei allen in der vorliegenden Arbeit wiedergegebenen Dichteverteilungen verwendet, auch in den Dichteverläufen des Films. Eine ähnliche Graustufendarstellung von Elektronendichteverteilungen im H-Atom auf der Basis eines statistischen Punktrasters ist in einer Arbeit über Teilaspekte des semi-klassischen Modells [ 7 ] zu finden.

Aus (27), (28) erkennt man sofort, daß ein Übergang zwischen den beiden angegebenen Zuständen als Folge der Kopplung an das Strahlungsfeld nur möglich ist, wenn das Skalarprodukt  $\underline{E}_0 \cdot \underline{m} >_{12}$  von null verschieden ist. Dies bedeutet insbesondere nach (39a), daß das elektrische Feld eine endliche z-Komponente,  $E_{0z}$ , besitzen muß. Koppelt nun das Strahlungsfeld mit  $E_{0z} \neq 0$  an das H-Atom, wobei die Strahlungsfrequenz  $\omega$  der Resonanzbedingung (36), d.h. im vorliegenden Fall  $\hbar\omega = \frac{3}{4}\epsilon_R$ , genügt, so kommt es zu Übergängen zwischen  $\Psi_1(\underline{r}, t)$  und  $\Psi_2(\underline{r}, t)$ . Der Zeitablauf ist dabei durch (25) bzw. die Lösungen des Gleichungssystems (27) bestimmt. Eine Möglichkeit der Beschreibung des Übergangs liefert die Darstellung des Ladungsschwerpunkts  $\langle \underline{r} \rangle$  der Zustandsfunktion  $\Psi(\underline{r}, t)$  in Abhängigkeit von der Zeit. Hier gilt in der RW-Näherung

$$\begin{aligned} \langle \underline{r} \rangle &= \int \Psi^*(\underline{r}, t) \cdot \underline{r} \cdot \Psi(\underline{r}, t) d^3r = \\ &= \frac{128}{243} \sqrt{2} \cdot \sin\left(\pi \frac{t}{\tau}\right) \cdot \cos\omega t \cdot (0, 0, 1) \cdot a \quad , \quad (40) \end{aligned}$$

wobei

$$\tau = \frac{243 \cdot \hbar \cdot \pi}{128 \cdot \sqrt{2} \cdot E_{0z} \cdot a} \quad (41)$$

die Übergangszeit bedeutet. Der Schwerpunkt der Elektronenverteilung oszilliert somit mit der Frequenz  $\omega$  des Strahlungsfeldes längs der z-Achse, wobei seine Amplitude durch die (langsam variierende) Funktion  $\sin\left(\pi \frac{t}{\tau}\right)$  bestimmt wird. Da der Kern des H-Atoms beim Übergang im Ursprung fixiert bleibt, läßt sich der Vorgang klassisch als li-

neare Oszillation eines Dipols im Strahlungsfeld der Frequenz  $\omega$  interpretieren. (Ohne äußeres Feld würde man durch diese Dipolbewegung ein linear polarisiertes elektromagnetisches Feld erhalten.) Dabei geht die Energie  $\Delta E = \hbar\omega$  im Zeitintervall  $[0, \tau]$  vom Strahlungsfeld zum H-Atom über (Absorptionsprozeß) und wird anschließend in der Zeit zwischen  $\tau$  und  $2\tau$  vom H-Atom an das Strahlungsfeld zurückgegeben (Emissionsprozeß).

Zur Illustration der Bewegung des Ladungsschwerpunkts  $\langle \underline{r} \rangle$  beim Übergang zeigt Abb. 2 die z-Komponente  $\langle z \rangle$  als Funktion der Zeit

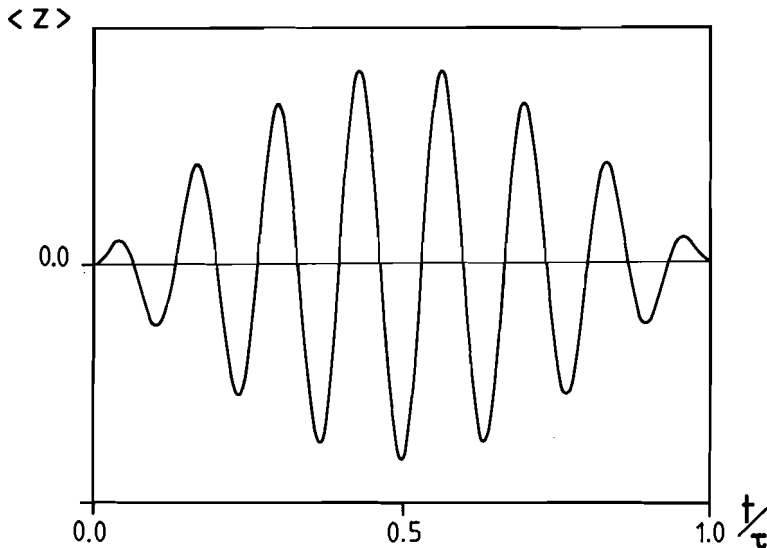


Abb. 2. Schwerpunkt  $\langle z \rangle$  der Elektronendichte als Funktion der normierten Zeit  $\frac{t}{\tau}$  beim Übergang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=0$ ) im H-Atom. Für die numerische Rechnung wurde  $\omega\tau = 16\pi$  angenommen (vgl. Text)

im Bereich  $[0, \tau]$ . Der Verlauf ist Ergebnis der numerischen Lösung des Gleichungssystems (27), wobei die elektrische Feldstärke  $E_{0z}$  so gewählt wurde, daß  $\omega \cdot \tau = 16\pi$  gilt, d.h. das Strahlungsfeld in der Übergangszeit  $\tau$  gerade 8 Oszillationen ausführt. Ein Vergleich der in Abb. 2 dargestellten Funktion mit der analytischen Darstellung (40) aus der RW-Näherung weist auf eine recht gute Übereinstimmung der

beiden Methoden hin. Dies zeigt auch Abb. 3, in der das Zeitverhalten

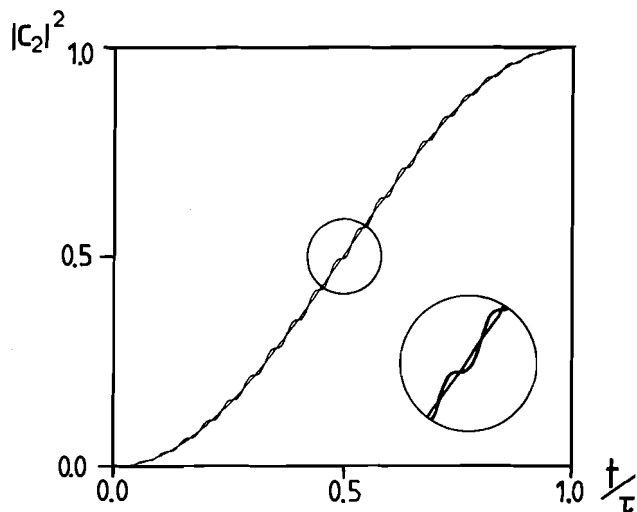


Abb. 3. Zeitverlauf des Koeffizienten  $|c_2(t)|^2$  beim Übergang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=0$ ) im H-Atom. Die glatte Kurve gibt das Ergebnis der rotating wave-Näherung wieder, während die schwach oszillierende Kurve den exakten Verlauf aus der numerischen Rechnung ergibt. Hier wurde  $\omega t = 16\pi$  angenommen (vgl. Text)

des Koeffizientenquadrats  $|c_1|^2$  aus der numerischen Lösung (27) mit dem analytisch gegebenen Verlauf (34) aus der RW-Näherung verglichen wird. Der numerisch bestimmte Verlauf unterscheidet sich von dem der RW-Näherung nur durch Oszillationen geringer Amplitude mit der Frequenz  $2\omega$ , was auf die Vernachlässigung des oszillatorischen Terms

$$\eta \cdot e^{i\Omega_+ \cdot t} \quad \text{mit} \quad |\Omega_+| \approx 2\omega$$

in (29) bei der RW-Näherung zurückzuführen ist.

Eine besonders anschauliche Information über die zeitliche Änderung der Elektronendichteverteilung im H-Atom beim Strahlungsübergang erhält man, wenn man  $\rho(\underline{r}, t) = e \cdot |\Psi(\underline{r}, t)|^2$  als Funktion der Zeit in einem Trickfilm darstellt. Der Film zeigt im ersten Teil den Zeitverlauf von  $\rho(\underline{r}, t)$  in der  $xz$ -Ebene mit Hilfe einer computergrafischen Rasterdarstellung, wie sie auch in Abb. 1 gewählt wurde.

Beim Absorptionsübergang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=0$ ) erkennt man deutlich die lineare Oszillation der Verteilung mit der Frequenz  $\omega$ , wobei die Verteilung von einer Kugelform ( $1s$ -Funktion) in eine Keulenform ( $2p$  ( $m=0$ ) - Funktion) übergeht. Der Emissionsübergang  $2p$  ( $m=0$ )  $\rightarrow 1s$  stellt dann gerade die zeitliche Inversion des Absorptionsübergangs dar.

### 3.2. Der Übergang $1s \rightarrow 2p$ ( $m=\pm 1$ )

Abb. 4 zeigt die Elektronendichteverteilung der am Übergang beteiligten stationären Zustände des H-Elektrons,  $n_1 l_1 m_1 = 1 0 0$  bzw.

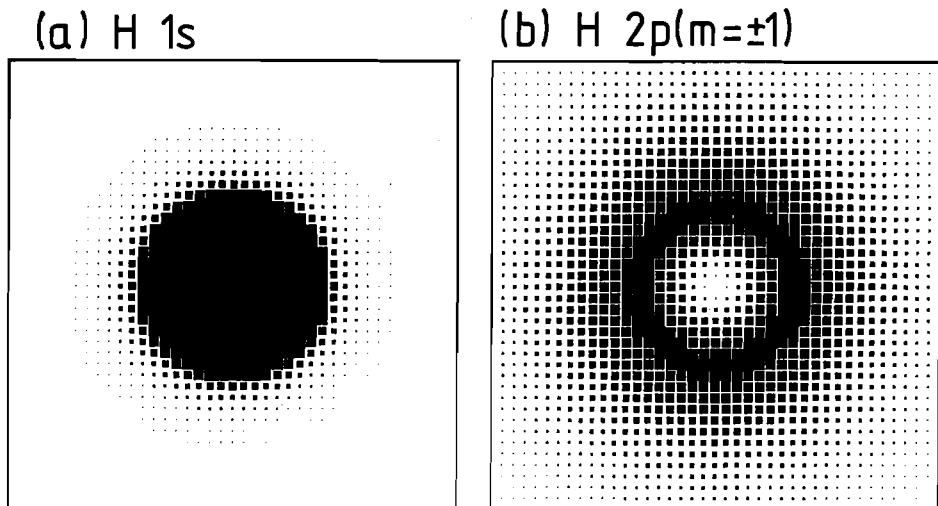


Abb. 4. Rastergrafische Darstellung der Ladungsverteilung im H-Atom längs der  $xy$ -Ebene (a) für den  $1s$ -Zustand, (b) für den  $2p$  ( $m=\pm 1$ )-Zustand. Das Atomzentrum befindet sich jeweils in der Bildmitte.

$n_2 l_2 m_2 = 2 1 \pm 1$  in einem Schnitt durch die  $xy$ -Ebene. Aus (27), (28), (39b) sieht man leicht, daß ein strahlungsinduzierter Übergang zwischen den beiden Zuständen nur möglich ist, wenn das äußere elektrische Feld  $E_0$  von null verschiedene  $x$ - oder  $y$ -Komponenten,  $E_{0x}$  bzw.  $E_{0y}$ , besitzt

und zusätzlich die Strahlungsfrequenz  $\omega$  der Bedingung  $\hbar\omega = \frac{3}{4}e_R$  genügt. Die Zeitabhängigkeit des elektronischen Ladungsschwerpunkts ergibt sich hier in der RW-Näherung als

$$\begin{aligned} \langle \underline{r} \rangle &= \int \Psi^*(\underline{r}, t) \cdot \underline{r} \cdot \Psi(\underline{r}, t) d^3r = \\ &= \frac{128}{243} \cdot \sin\left(\pi \cdot \frac{t}{\tau}\right) \cdot \left( \cos(\gamma \mp \omega t), \sin(\gamma \mp \omega t), 0 \right) \cdot a \quad \text{für } m = \pm 1 \end{aligned} \quad (42)$$

wobei

$$\tau = \frac{243 \cdot \hbar \cdot \pi}{128 \cdot a} \cdot \left[ E_{0x}^2 + E_{0y}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

die Übergangszeit bedeutet und der Drehwinkel durch

$$\cos \gamma = E_{0x} \cdot \left[ E_{0x}^2 + E_{0y}^2 \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad \sin \gamma = E_{0y} \cdot \left[ E_{0x}^2 + E_{0y}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (44)$$

festgelegt ist. Der Schwerpunkt der Elektronenverteilung rotiert nach (42) mit der Frequenz  $\omega$  des Strahlungsfeldes in der xy-Ebene um den Ursprung, wobei sein Abstand vom Ursprung durch die (langsam variierende) Funktion  $\sin\left(\pi \frac{t}{\tau}\right)$  bestimmt ist. Die Rotationsrichtung erfolgt für  $m=+1$  im Uhrzeigersinn, für  $m=-1$  im Gegenuhrzeigersinn. Damit läßt sich der Vorgang klassisch als Rotation eines Dipols im Strahlungsfeld der Frequenz  $\omega$  interpretieren. (Ohne äußeres Feld würde man durch diese Dipolbewegung ein zirkular polarisiertes elektromagnetisches Feld unterschiedlichen Drehsinns, abhängig von  $m$ , erhalten.) Wie beim vorher besprochenen Übergang wird die Energie  $\Delta E = \hbar\omega$  zwischen  $t=0$  und  $t=\tau$  vom Strahlungsfeld an das H-Atom abgegeben, entsprechend einer Absorption, während zwischen  $t=\tau$  und  $t=2\tau$  das H-Atom die Energie  $\hbar\omega$  an das Strahlungsfeld zurückgibt (Emission).

Die Bewegung des Ladungsschwerpunktes  $\langle \underline{r} \rangle$  beim Übergang für  $m=+1$  ist in Abb. 5 in Form einer Bahnkurve in der  $xy$ -Ebene für das

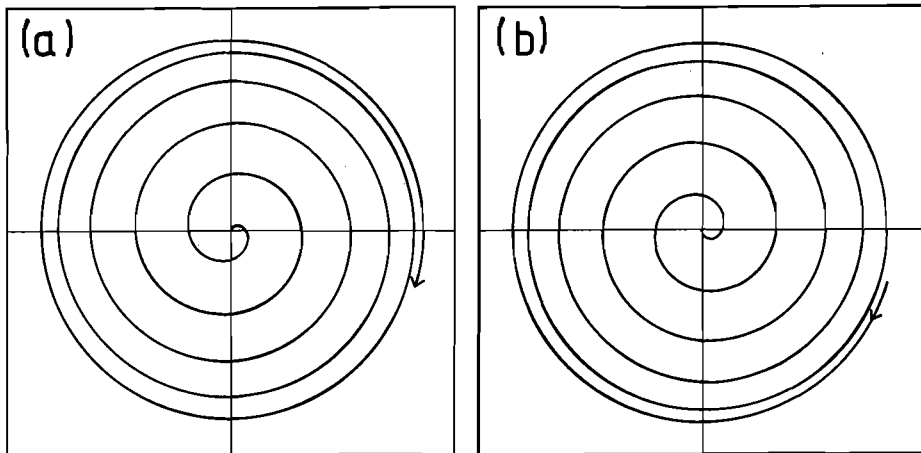


Abb. 5. Bahnkurve des Schwerpunkts der Elektronendichte in der  $xy$ -Ebene beim Übergang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=1$ ) im H-Atom. Teil (a) gibt den Verlauf zwischen  $t=0$  und  $t=\frac{\tau}{2}$  wieder (Spirale nach außen), Teil (b) denjenigen zwischen  $t=\frac{\tau}{2}$  und  $t=\tau$  (Spiralbahn nach innen). Für die Rechnung wurde  $\omega \cdot t = 20\pi$  angenommen (vgl. Text)

Zeitintervall  $[0, \tau]$  dargestellt, wobei ein elektrisches Feld  $\underline{E}_0 = (E_{0x}, 0, 0)$  angenommen wurde, dessen Komponente mit derjenigen,  $E_{0z}$ , bei den Rechnungen am  $1s \leftrightarrow 2p$  ( $m=0$ ) - Übergang übereinstimmt. Damit erhält man  $\omega \cdot t \approx 20\pi$ , d.h. das Strahlungsfeld führt in der Übergangszeit etwa 10 Oszillationen aus. Auch hier stimmt die dargestellte numerische Lösung mit dem oben diskutierten Ergebnis aus der RW-Näherung gut überein.

Im zweiten Teil des Films ist der Zeitverlauf der Elektronendichteverteilung  $\rho(\underline{r}, t)$  in der  $xy$ -Ebene für den Übergang  $1s \leftrightarrow 2p$  ( $m=+1$ ) im H-Atom in einer computergrafischen Rasterdarstellung wiedergegeben. Beim Absorptionsübergang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=1$ ) erkennt man die rotierende



Ladungsbewegung mit der Frequenz  $\omega$ , bei der ein Bereich kleiner Ladungsdichte ("Ladungsloch") auf einer Spiralbahn von außen in das Zentrum wandert. Im Emissionsfall erfolgt die Spiralbewegung von innen nach außen.

Danksagung

Prof. Dr. L. Fritsche sei für wertvolle Diskussion im Zusammenhang mit der Theorie und Interpretation von Strahlungsübergängen gedankt. Das Rechenzentrum der Technischen Universität Clausthal trug durch die sorgfältige Erstellung der umfangreichen Computergrafiken wesentlich zum Gelingen des Films bei. Die Autoren danken den beteiligten Mitarbeitern des Instituts für den Wissenschaftlichen Film Göttingen (IWF) für die bereitwillige Unterstützung bei der Durchführung der Filmarbeiten.

#### 4. Erläuterungen zum Film

Der Film gibt eine Darstellung der zeitlichen Änderung der Elektronendichte bei den Übergängen  $1s \leftrightarrow 2p$  ( $m=0, \pm 1$ ) im H-Atom durch die Kopplung an ein Strahlungsfeld. Das zugrunde gelegte semi-klassische Modell wurde in den Abschnitten 2,3 behandelt. Die Berechnung der Elektronendichte  $\rho(\underline{r}, t)$  erfolgte durch Lösung der Schrödingergleichung in zeitabhängiger Störungstheorie. Zur Darstellung von  $\rho(\underline{r}, t)$  wurde ein computergrafisches Rasterverfahren gewählt.

##### Quantenmechanik des Wasserstoffatoms

##### Strahlungsübergänge im semi-klassischen Modell

Der erste Teil des Films behandelt zunächst den Absorptionsübergang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=0$ ) (vgl. Abschnitt 3.1). Hier ist der Verlauf von  $\rho(\underline{r}, t)$  in der xz-Ebene um das Atomzentrum in Abhängigkeit von der Zeit zwischen  $t=0$  und  $t=\tau$  (=Übergangszeit) als Trickfilm mit 200 Einzelphasen dargestellt. Man erkennt die lineare oszillatorische Bewegung der Dichteverteilung in z-Richtung mit der Strahlungsfrequenz  $\omega$ , wobei die Verteilung von einer Kugelform (1s-Funktion) in eine Keulenform (2p ( $m=0$ )-Funktion) übergeht. Der Bewegungsvorgang wird anschließend durch Wiederholung in dreifacher Zeitdehnung verdeutlicht. Danach folgt die Darstellung des Emissionsübergangs  $2p$  ( $m=0$ )  $\rightarrow$   $1s$  (vgl. Abschnitt 3.1). Der Zeitablauf von  $\rho(\underline{r}, t)$ , wiedergegeben in der xz-Ebene, zeigt das erwartete inverse Verhalten im Vergleich zum Absorptionsvorgang. Der zweite Teil des Films zeigt zunächst den Absorptionsvorgang  $1s \rightarrow 2p$  ( $m=1$ ) (vgl. Abschnitt 3.2). Hier ist  $\rho(\underline{r}, t)$  in der xy-Ebene um das Atomzentrum in Abhängigkeit von der Zeit zwischen  $t=0$  und  $t=\tau$  dargestellt. Man erkennt die rotatorische Bewegung der Dichteverteilung mit der Frequenz  $\omega$ , bei der ein "Ladungsloch" auf einer Spiralbahn von außen in das Zentrum wandert. Der Bewegungsvorgang wird anschließend durch Wiederholung in dreifacher Zeitdehnung verdeutlicht. Der Film schließt mit der Darstellung des Emissionsvorgangs  $2p$  ( $m=1$ )  $\rightarrow$   $1s$  (vgl. Abschnitt 3.2.). Auch hier zeigt der Zeitverlauf von  $\rho(\underline{r}, t)$ , wiedergegeben in der xy-Ebene, das zum Absorptionsübergang inverse Verhalten.

Literatur

- [ 1 ] Sommerfeld, A.: Atombau und Spektrallinien. Braunschweig: Vieweg-Verlag, 1. Aufl., 1919..
- [ 2 ] Paul, H.: Lasertheorie. Berlin: Akademie-Verlag, 1969.
- [ 3 ] vgl. z.B. A. Messiah: Quantum Mechanics, Bd. I, II, North-Holland Publishing 1974.
- [ 4 ] Condon, E. U., und G. H. Shortley: The Theory of Atomic Spectra. Cambridge University Press 1935.
- [ 5 ] Für weiterführende Rechnungen vgl. J. Cordes, Staatsexamensarbeit TU Clausthal 1982 und dort enthaltene Zitate.
- [ 6 ] Das Programmsystem zur Rastergrafik wurde von K. Hermann im Rahmen des Teilprojekts D 24 des Sonderforschungsbereichs 126 Clausthal/Göttingen entwickelt.
- [ 7 ] Henderson, G.: Am. J. Phys. 48 (1980), 604.

Abbildungsnachweis

Abb. 1 - 5: K. Hermann und J. Cordes, unveröffentlicht.

Zur Gliederung des Films sind folgende Zwischentitel eingefügt:

Absorption  $1s \longrightarrow 2p$  ( $m=0$ ); lineare Polarisation; Elektronendichte  
in XZ-Ebene

Wiederholung in 3-facher Zeitdehnung

Emission  $2p$  ( $m=0$ )  $\longrightarrow 1s$ ; lineare Polarisation; Elektronendichte  
in XZ-Ebene

Absorption  $1s \longrightarrow 2p$  ( $m=1$ ); zirkulare Polarisation;  
Elektronendichte in XY-Ebene

Wiederholung in 3-facher Zeitdehnung

Emission  $2p$  ( $m=1$ )  $\longrightarrow 1s$ ; zirkulare Polarisation;  
Elektronendichte in XY-Ebene