

Auswahlregeln, verbotene Übergänge

Gegenstand:

Für das Verständnis des Atoms scheint der Begriff Auswahlregel wichtig zu sein. Was man darunter versteht, geht aus der folgenden, typischen Formulierung hervor:

“Die Frequenzen aller Linien eines Spektrums lassen sich als Differenzen von wenigen Spektraltermen darstellen, die miteinander kombiniert werden. Allerdings treten nicht alle Kombinationen von Termen als Spektrallinien auf: Es gibt gewisse *Übergangsverbote* oder *Auswahlregeln*, deren wahre Bedeutung erst die Quantenmechanik enthüllt.”

Wer bis zur Quantenmechanik vordringt, erfährt dann die “wahre Bedeutung”: Es kann passieren, dass das Matrixelement für einen elektrischen Dipolübergang null wird, weil die beteiligten Wellenfunktionen eine bestimmte Symmetrie haben.

Mängel:

Die Auswahlregel $\Delta\ell = \pm 1$ besagt, dass sich der Drehimpuls des Atoms bei einem Übergang, an dem ein Photon beteiligt ist, um \hbar ändern muss. Die Erklärung ist einfach: Photonen haben einen Drehimpuls vom Betrag \hbar . Die Auswahlregel $\Delta\ell = \pm 1$ ist also Ausdruck der Drehimpulserhaltung.

Statt die Drehimpulserhaltung von vornherein zu berücksichtigen, erzeugt man nun die Erwartung, bestimmte Übergänge könnten schon deshalb stattfinden, weil der Energieerhaltungssatz berücksichtigt ist. Dass sie tatsächlich nicht stattfinden, wird in eine zusätzliche, zunächst unverständliche Regel gepackt. Die Richtigkeit der Regel wird dann über die Berechnung von quantenmechanischen Matrixelementen, d. h. mit einem wohl unangemessen starken Werkzeug, bewiesen. Dass sie nichts weiter ist als Ausdruck eines weiteren Erhaltungssatzes, bekommt man, wenn überhaupt, nur am Rande mit.

Im Grunde ist es aber gar nicht zu erwarten, dass ein gedachter Prozess schon deshalb ablaufen kann, weil der Energiesatz befolgt wird. Wäre das der Fall, so könnten – auch ohne Quantenmechanik – die größten Wunder geschehen.

Herkunft:

Der mühevollste Entstehungsprozess der Quantenmechanik hat überall seine Spuren hinterlassen. Die wichtigste Quelle für die Erkenntnisse der Atom- und Quantenphysik war die Spektroskopie. Regeln, die es gestatteten, Ordnung in das Wirrwarr der Spektrallinien zu bringen, waren bekannt längst bevor es die Quantenmechanik gab. Als Folge davon haben viele Begriffe und Methoden aus der vorquantenmechanischen Spektroskopie Eingang in Atomphysik und Quantenmechanik gefunden.

So erklärt sich auch die sonst in der Physik nicht übliche Sprechweise, ein Vorgang sei verboten, ein anderer erlaubt. Auf Grund der Regeln der Spektroskopie hatte man erwartet, dass man alle Terme miteinander kombinieren kann. Hätte man gleich gewusst, dass die Drehimpulserhaltung die Ursache ist, hätte man sicher nicht von einem Verbot gesprochen. In der klassischen Physik kommt es einem schließlich auch nicht in den Sinn, einen unmöglichen Vorgang zunächst in Betracht zu ziehen, und dann zu erklären, er sei verboten. Ein Vorgang läuft ab, weil er die Naturgesetze befolgt, und nicht, weil er irgendwelchen Verboten aus dem Weg geht.

Entsorgung:

Man sage von Anfang an, dass die Quantenzahl ℓ ein Maß für den Drehimpuls des Atoms in Einheiten von \hbar ist. Da das Photon einen Drehimpuls von \hbar hat, muss sich der Drehimpuls des Atoms bei der Absorption oder Emission eines Photons um \hbar ändern. Der Begriff Auswahlregel, der Bezug auf “Verbote” und die damit zusammenhängende Geheimnistuerei wird überflüssig.

/1/ Herrmann, F.: Erhaltungssätze. – Altlasten der Physik (19). – In: Physik in der Schule 34 (1996) 282

F. H.