1. Einführung

"Klassische Physik" ⟷ "Moderne Physik"

behandelt 'normale Systeme' was Größe, Masse, Geschwindigkeit betrifft

Klassische Mechanik
Newtons Gesetze 1686

Thermodynamik
1780 - 1860 Thompson, Joule, Gibbs, Carnot, Boltzmann

Elektromagnetismus
Maxwell Gleichungen ca. 1860
→ **Optik**

Relativitätstheorie
Einstein 1905 & 1915

Quantenphysik
1920 - 1930 de Broglie, Bohr, Pauli, Schrödinger, Born, Heisenberg, Dirac ...

→ Atomphysik
→ Kernphysik
→ Teilchenphysik
→ Phys. Chemie, Festkörperphysik
...

i) Relativitätstheorie: in Systemen, bei denen hohe* Geschwindigkeiten auftreten, müssen Gesetze der klassischen Mechanik modifiziert werden.

*hoch: nicht vernachlässigbar klein gegenüber Lichtgeschwindigkeit $c = 3.0 \cdot 10^8$ m/s

ii) Quantenphysik: Wenn sehr kleine Systeme betrach-

ket werden, die aus wenigen Teilchen bestehen (Atome, Elektronen ...), werden Gesetze der klassischen Physik ersetzt durch neue Gesetze:

Newton'sche Mechanik → Quantenmechanik
" relativistische "

1.1. Einheiten

Generell SI-Einheiten m, kg, s, C
aber

- für Teilchen von Beschleunigern bequemer statt Energieeinheit J das Elektronvolt zu benutzen
  $1\,eV = 1.6 \cdot 10^{-19}\,J$
  kinetische Energie, die ein einfach geladenes Teilchen beim Durchqueren einer Potentialdifferenz von 1 Volt gewinnt

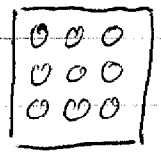
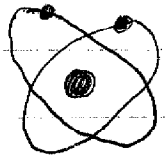
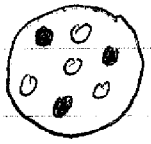
- Einheitsladung $e = 1.6 \cdot 10^{-19}\,C$

$$e^2/4\pi\varepsilon_0 = (1.6 \cdot 10^{-19}\,C)^2 \left(8.988 \cdot 10^9 \frac{Nm^2}{C^2}\right)$$
$$= \underbrace{1.440\ eV \cdot nm}_{\text{Atomphysik}} = \underbrace{1.440\ MeV \cdot fm}_{\text{Kern u. Teilchenphysik}}$$

" Energie × Länge "

- Masse: kg Masse · (Geschwindigkeit)^2 = Energie
  Wir werden sehen, daß es nützlich ist Massen mit der Lichtgeschwindigkeit zum Quadrat zu multiplizieren, mc^2, und in dieser Energieeinheit zu messen.
  z.B. $m_e c^2 = 9.11 \cdot 10^{-31}\,kg \cdot 9 \cdot 10^{16} \frac{m^2}{s^2} = 8.199 \cdot 10^{-14}\,J = 0.511\,MeV$
  $m_p c^2 = 1.673 \cdot 10^{-27}\,kg \cdot 9 \cdot 10^{16} \frac{m^2}{s^2} = 1.505 \cdot 10^{-10}\,J = 938.3\,MeV$

1.2. Grundbausteine der Materie

Materie	Atom	Atomkern	Nukleon	echte Elementarteilchen
				Quark, Elektron, ...
$(10^{-6}$ - viele$)$ m	$(10^{-9}$-$10^{-10})$ m	$(10^{-14}$-$10^{-15})$ m	$0.5 \cdot 10^{-15}$ m	$< 10^{-18}$ m
Festkörperph. Materialwiss	Atomphysik Chemie	Kernphysik		Teilchenphysik

Das Konzept eines ultimativen Teilchens, das nicht mehr unterteilt werden kann, keine Struktur hat, eines sogenannten 'Atoms' (griechisch ἄτομος) bereits bei Anaxagoras und etwas später Demokrit (5 Jh. vor Chr.).
aber wenig quantitativ bis zu exp. Resultaten der Chemie des 17. u. 18. Jahrhunderts
'Gesch. der definierten Proportionen': Verhältnis der Massen von Elementen, die eine chemische Beziehung eingehen, ist konstant
z.B. H_2O 2:16, NaOH 23:16:1, NaCl 23:35
Dalton 1807: Atome eines jeden Elements haben definierte Masse
großer Schritt vorwärts: Amedeo Avogadro 1811
gleiche Volumina von Gasen bei einer bestimmten Temperatur und bestimmten Druck enthalten eine gleiche Anzahl von Molekülen (Atomen)
"Avogadro Zahl N_A" oder "Loschmidt'sche Zahl"
atomare Massenzahl A, A g eines Elements enthalten gleiche Zahl von Atomen, N_A; wurde aber

erst etwa 50 Jahre später zum ersten Mal abgeschätzt.

Bestimmung:

i) optisch durch Rayleigh Streuung von Licht an kleinsten Teilchen (Molekülen)

$I/I_0 = \exp(-N \cdot V)$ N Anzahl Teilchen pro Volumen
V Volumen

über Dichte ρ und Molekulargewicht M

$N_A = N \cdot M/\rho$ $\frac{\text{Teilchen}}{m^3} \cdot \frac{kg}{mol} \cdot \frac{m^3}{kg} = \frac{\text{Teilchen}}{mol}$

ii) Brown'sche Bewegung (Robert Brown 1827)
mit Mikroskop beobachtet er kleine aber messbare Zufallsbewegung von mikroskopischen Pollenkörnern in Wasser. Eigenschaft organischer Materie?
später selbe Beobachtung für anorganische Suspensionen in Flüssigkeiten und Gasen
korrekte Erklärung durch Einstein 1905
Fluktuationen durch zufällige Zusammenstöße mit Molekülen der Flüssigkeit

⇨ Fig. 1-1

"random walk" Problem $\langle s^2 \rangle = N l^2$

mittl. quad. Auslenkung N Schritte von Länge l

$s_{rms} = \text{const} \sqrt{t/N_A \cdot r}$ mit t Teilchen m. Radius r

Einsteins Gleichung 1908 durch Perrin verifiziert mit Harzkugeln gleichmäßiger Größe (μm) und genaue Vermessung von s_{rms} als Funktion von T für Kugeln versch. Größe und versch. Flüssigkeiten

$N_A = 6 \cdot 10^{23}$

⇨ Fig. 1-2

Später genauer $N_A = 6.022137 \cdot 10^{23}$

damit kann man Massen einzelner Atome aus Atom- und Molekulargewicht abschätzen.

atomare Massenmaßeinheit: definiert als 1/12 der Masse eines ^{12}C-Atoms.

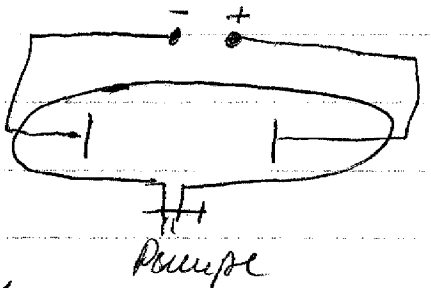
$1/12\ m_{^{12}C} = 1.66 \cdot 10^{-27}\,kg = 1\,u = 931.494\,MeV/c^2$

einfache Abschätzung der Grösse eines Atoms:
z.B. Blei $A = 207.2\ g/Mol$ $\rho = 11.35\ g/cm^3$
$N_A V_{Atom} = A/\rho \rightarrow V_{Atom} = 3.03 \cdot 10^{-29}\,m^3$
Durchmesser $d_{Atom} \simeq V_{Atom}^{1/3} = 0.3\,nm = 3\,Å$
obere Grenze, da dichte Packung von Würfeln angenommen

⇒ Fig. 1-3

1.3 Das Elektron

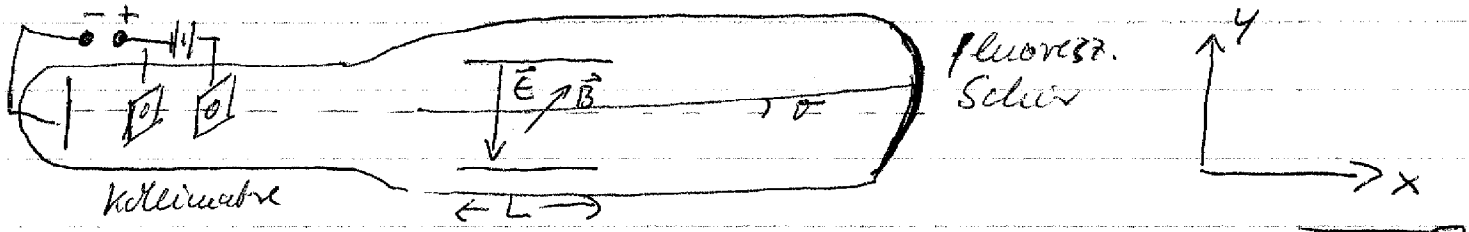
Studium von sogenannt Kathodenstrahlung ein 19. Jh.
Gasentladungsröhren
Gas bei niedrigem
Druck, wenige Torr
typische Spannungen einige
Hundert Volt → Glimmentladung
Strahlung bewegt sich von einer Elektrode zu anderen. Durch Manipulation von Elektroden → Strahlung kommt von der Kathode.



J.J. Thompson 1897: Strahlung besteht aus negativ geladenen Teilchen, bald danach 'Elektronen' genannt (siehe auch Stoney 1874: Ladungsquan-

port ii ionischer Ladung, F/N_A Faraday konst.
div. durch Abschätzung von Avogadro Zahl)

genaue Bestimmung von q/m durch Thompson



gekreuzte $\vec{E}$ und $\vec{B}$ Felder ⇒ Fig. 1-4

nur E-Feld:

durch Beschl. zwischen Kollimatoren haben Elektronen definierte Geschwindigkeit v_x

→ Zeit zwischen Ablenkplatten $t_p = \frac{L}{v_x}$

Vertikale Geschwindigkeit nach Ablenkung $v_y = \underbrace{\frac{q \cdot \Delta V}{m d}}_{a_y} \cdot \underbrace{\frac{L}{v_x}}_{t_p}$

$q/m = v_x v_y \frac{d}{\Delta V} \cdot \frac{1}{L}$ (1) $v_x / v_y = \tan \vartheta$ Ablenkwinkel gemessen auf Schirm

Messung von v_x mit gekreuzten $\vec{E}$ und $\vec{B}$ -Feldern (Wien Filter):

$B = B_z$ $q v_x B_z = q \frac{\Delta V}{d}$ keine Ablenkung (2)

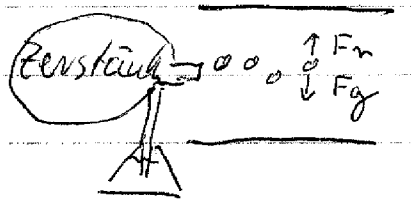
v_x von (2) in (1) $\frac{q}{m} = \frac{\Delta V}{d} \frac{1}{L B^2} \tan \vartheta$

⇒ Fig 1-5

$q/m = 1.76 \cdot 10^{11} \frac{C}{kg}$

Bestimmung der Elementarladung: Millikan 1909

Fallgeschwindigkeit von Öltröpfchen (geladen) im E-Feld

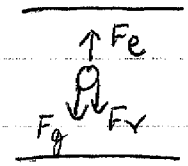


Tröpfchen erreichen konstante Geschw. wenn $F_g = F_r$ $\quad mg = 6\pi\eta r v_T$ ⊛

Dichte von Öl $\rho = 3m/(4\pi r^3)$

$\rightsquigarrow \quad r = \sqrt{\frac{9 v_T \eta}{2 g \rho}}$ Radius d. Öltröpfchen typischer Wert $r \approx 3\mu m$

mit E-Feld



für das gleiche Tröpfchen

$qE = mg + 6\pi\eta r v_E$

mit $6\pi\eta r = mg/v_T$ ⇝

$$q = \frac{mg(1 + v_E/v_T)}{E}$$

Beobachtung für einige Tropfen $q = n \cdot e$

Ladung ist ganzzahliges Vielfaches eines Wertes, der Elementar- oder Elektronenladung e

$e = 1.602 \cdot 10^{-19} C$

elektrische Ladung ist diskret (oder gequantelt) nicht kontinuierlich

Kombination von Thompson und Millikan ergibt Masse des Elektrons $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} kg$

$= 0.511 MeV$

⊛ für die sehr kleinen Tröpfchen musste Stokes'sches Gesetz von Millikan korrigiert werden: (einige %)

$6\pi\eta r \longrightarrow 6\pi\eta r (1 + b/pr)^{-1}$ $\quad p$ Druck (cm Hg) r in m

$b = 6.17 \cdot 10^{-6}$

1.4. Atomkern, Proton, Neutron

Im Studium der Kathodenstrahlung beobachtet: es gibt auch Strahlung, die sich entgegengesetzt bewegt "positive Strahlen" (Goldstein 1886) wird auch von E- und B-Feldern abgelenkt daher können ebenfalls v und q/m bestimmt werden → v und q/m viel kleiner als für Elektronen! Die größten Werte werden für Wasserstoff gefunden und stimmen mit denen von q/m aus der Elektrolyse für Wasserstoffionen überein.

1920 nennt Rutherford den Wasserstoffkern "Proton"

$m_p = 1.673 \cdot 10^{-27}\,kg = 0.9383\,GeV/c^2$

Atomkern entdeckt durch Rutherford-Streuung 1912 (Geiger und Marsden auf Vorschlag von Rutherford) → Kapitel 6

Mit Kenntnis der Ladungszahl des Atomkerns und der Massen schloss Rutherford 1920 auf die Existenz eines weiteren neutralen Teilchens mit einer Masse ähnlich der Protonmasse

Neutron, entdeckt 1932 durch Chadwick

$m_n = 1.675 \cdot 10^{-27}\,kg = 0.9395\,GeV/c^2$

wir hatten oben aber gesehen: atomare Massenheit $1u = 931.4\,MeV$. Woher kommt die Differenz? Atomkerne "wiegen" weniger als die Masse ihrer konstituierenden

Bindungsenergie

$E_B/A \simeq (m_p - u)c^2 \simeq 7$ MeV pro Nukleon

also im % Bereich

1.5. Röntgenstrahlung und natürliche Radioaktivität

1895 entdeckt Roentgen beim Studium von Kathodenstrahlung, daß beim Auftreffen der Kathodenstrahlen auf Glaswand des Kolbens und auf eine Platte eine neue, durchdringende Strahlung entsteht. X-Strahlung oder Roentgenstrahlung

Bereits 1896 etabliert daß es sich um elektromagnetische Strahlung mit Wellenlängen sehr viel kürzer als UV-Strahlung handelt.

→ Kapitel 8

Wenige Monate nach Roentgens Entdeckung entdeckt H. Bequerel beim Studium von fluoreszierenden Objekten die natürliche Radioaktivität - innerhalb kurzer Zeit nach Durchdringfähigkeit und Verhalten im Magnetfeld charakterisiert als α-, β-, γ-Strahlen

2. Spezielle Relativitätstheorie

Wird erlauben, Beobachtungen, die in verschiedenen Bezugssystemen gemacht werden, zu vergleichen
z.B. System in Ruhe relativ zur Erde "Laborsystem" und ein relativ zur Erde bewegtes System (z.B. PKW) Illustration ⇨ Fig 2-1

Wir werden hier nur Bezugssysteme betrachten, die sich mit konstanter Geschwindigkeit bewegen
"Inertialsysteme"
Definition: Ein Inertialsystem ist ein Bezugssystem in dem das Newton'sche Trägheitsgesetz gilt - Teilchen erfährt nur Beschleunigung wenn eine Kraft auf es wirkt.
In Abwesenheit realer Kräfte (F_g, F_r) und von Scheinkräften ($F_{Zentrifugal}$)
$\vec{a} = 0$ $\vec{v} = konst.$

2.1. Behandlung in der klassischen Physik

Galilei Transformation: Geschwindigkeiten addieren sich vektoriell

Beispielsysteme ⇨ Fig. 2-2

Beobachter O in Ruhesystem 1 misst Geschwindigkeit eines Objekts $\vec{u}$; Beobachter O' in Ruhesystem 2, das sich mit konst. Geschwindigkeit $\vec{v}$ in x-Richtung relativ zu O bewegt, misst Geschwindigkeit desselben Objekts als $\vec{u}' = \vec{u} - \vec{v}$

Definition: Richtung der relativen Bewegung zwischen Bezugssystemen ist die x-Achse

dann ist die Galilei Transformation

Geschwindigkeit	Ort	Beschleunigung
$u_x' = u_x - v$	$x' = x - vt$	$a_x' = a_x$
$u_y' = u_y$	$y' = y$	$a_y' = a_y$
$u_z' = u_z$	$z' = z$	$a_z' = a_z$

2.2 Elektromagnetismus und Galilei Transformation

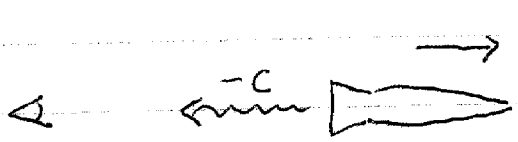
EM definiert durch 4 Maxwell Gleichungen. Sehr erfolgreiche Theorie. Existent - unter anderen Wissenschaftlern - war gestört durch die Tatsache, daß Maxells Theorie nicht "kovariant" unter Galilei Transformation ist.

i) elektromagnetische Wellen propagieren im Vakuum mit einer konstanten und endlichen Geschwindigkeit, der Lichtgeschwindigkeit c
$c = 3 \cdot 10^8$ m/s (war zu diesem Zeitpunkt durch verschiedenste Messungen schon gut bekannt).
ii) in einem bewegten Bezugssystem müßte sich mit Galilei T. c verändern

Gedankenexperiment

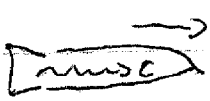
Rakete bewegt sich mit Geschwindigkeit $\vec{v}$ und feuert Lasersignale in Richtung Erde, die dort beobachtet werden. Ruhesystem der Rakete S', Ruhesystem der Erde S

Rakete entfernt sich von der Erde



Beobachter auf der Erde misst für diese Signale Lichtgeschwindigkeit $u_x = u_x' + v = v - c$

Rakete bewegt sich auf die Erde zu



Beobachter auf der Erde misst Lichtgeschwindigkeit $u_x = u_x' + v = c + v$

Wäre das wahr, dann würde nur ein Beobachter, der sich mit derselben Geschwindigkeit, wie die Lichtquelle bewegt, die Lichtgeschwindigkeit als $c = 3 \cdot 10^8$ m/s messen

~~Maxwell falsch? Galilei Transf. für Licht falsch?~~

Um Galilei Transformation für Lichtwellen zu retten müsste man ein absolutes Bezugssystem einführen.

Hypothese: ähnlich wie Schallwellen ein Ausbreitungsmedium benötigen (Luft, Wasser, ...), ist der sogenannte "Äther" Ausbreitungsmedium für Licht. Damit hätte man ein speziell ausgezeichnetes absolutes Bezugssystem in dem die Lichtgeschwindigkeit gleich c ist. In Systemen, die sich relativ zum Äther bewegen wäre Lichtgeschwindigkeit $\neq c$

kann nur durch Messung entschieden werden

da c eine sehr hohe Geschwindigkeit, ist Messung sehr schwierig. Einfacher: kleine Differenz zwischen großen Geschwindigkeiten zu messen, als abs. Geschwindigkeit.

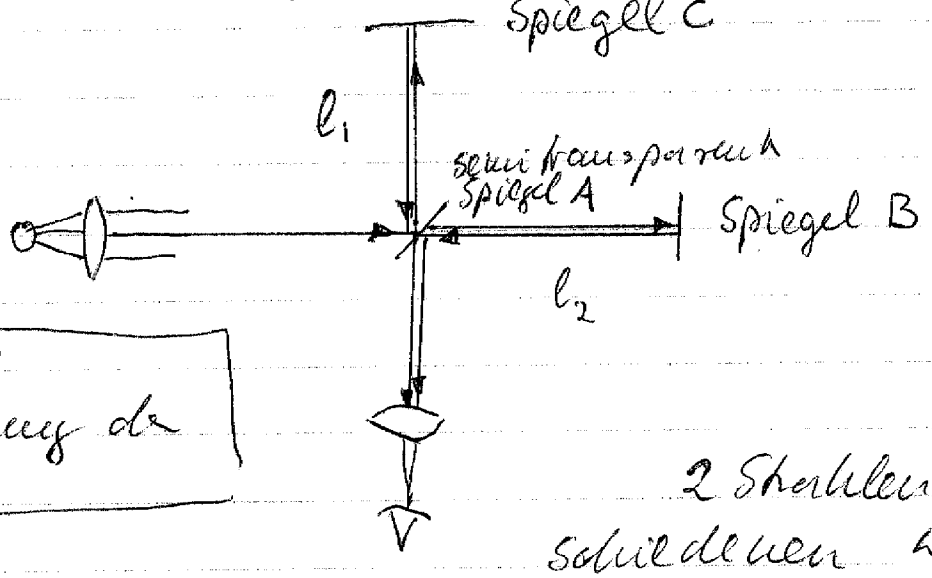
Michelson - Morley Experiment

vorgeschlagen von Maxwell in seinem letzten Lebensjahr (1879), erstmals von Albert Michelson 1881 durchgeführt, genauer zusammen mit Edward Morley 1887.

Idee: Erde ist bewegtes Bezugssystem relativ zum Sonnensystem (in dem der Äther ruht). Messe Lichtgeschwindigkeit in verschiedene Richtungen relativ zur Erdgeschwindigkeit.

H. Bemerkung: Äther ist für diese Betrachtung nicht wirklich relevant. Erde bewegt sich mit $v = 30\ km/s = 3 \cdot 10^4\ m/s$ $\beta = v/c = 10^{-4}$

2 kohärente Lichtstrahlen, einmal optischer Weg parallel zu Bewegung der Erde, einmal senkrecht dazu



l_1 und l_2 sehr ähnlich

2 Strahlen nehmen verschiedenen Weg. Im "Auge" (Detektor, Bildschirm) interferieren sie

ein Interferenzstreifensystem mit abwechselnden hellen und dunklen Ringen entsteht

dunkel: Wegunterschied $n\lambda/2$ n ungerade

hell: " $n\lambda$ n ganzzahlig

geniale Idee: das ganze Experiment wird 90° rotiert, Strahl entlang l_2 jetzt senkrecht zur Erdbewegung, l_1 parallel. Wenn v und c sich addieren müsste Phasendifferenz zwischen den beiden Strahlen sich verschieben ⇝ Verschiebung um ΔN Streifen (Ringen) im Interferenzbild.

mit Annahme Galilei Transformation kann man ausarbeiten (siehe Übungsaufgabe)

für Normalstellung (0°)

$$\Delta\phi_1 = \frac{2\pi}{\lambda}\left[2(l_2-l_1) + \beta^2(2l_2-l_1)\right]$$

für rotierte Stellung (90°)

$$\Delta\phi_2 = -\frac{2\pi}{\lambda}\left[2(l_1-l_2) + \beta^2(2l_1-l_2)\right]$$

hier $\beta = v/c$

und damit eine Verschiebung im Streifensystem um $\Delta N = \frac{\beta^2}{\lambda}(l_1+l_2)$

im 1887 Michelson-Morley Experiment ⇒ Fig. 2-3

$l_1 \simeq l_2 = 10\,m$ $\lambda = 500\,nm = 5\cdot10^{-7}\,m$

erwarte Streifenverschiebung

$$\Delta N_{ew} = \frac{10^{-8}\cdot 20\,m}{5\cdot10^{-7}\,m} = 0.4$$

0.5 wäre einmal hell → dunkel. Instrument konnte $\Delta N = 0.01$ auflösen

experimentell kein Effekt zu sehen.
auch Drehungen um andere Winkel,
Tag- Nacht-Unterschiede, Beobachtung über 1
Jahr : keine Änderung } Fig. 2-4

Schlußfolgerung : Galilei Transformation für Licht nicht anwendbar, $c' = c$ = konstant unabhängig von Bewegungszustand der Quelle

Moderne Version mit Laser 1979 verbesserte Auflösung um Faktor 4000 ~ keine Verschiebung

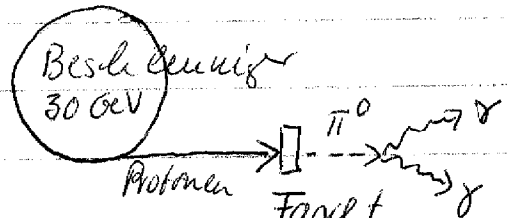
2.3. Einsteins Postulate

i) **Prinzip der Relativität : die Gesetze der Physik sind die gleichen in allen Inertialsystemen**

es gibt kein "absolutes" Bezugssystem. In verschiedenen Inertialsystemen durchgeführte Experimente ergeben alle die selben Resultate
z.B. $\vec{F} = d\vec{p}/dt$ gilt immer
Physikalische Größen können aber in verschiedenen nicht Galilei-invariant sein $\vec{a} \longleftrightarrow \vec{v}, \vec{p}$

ii) **die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum hat in allen Inertialsystemen den gleichen Wert c**

beste experimentelle Bestimmung : Beschleunigerexperiment



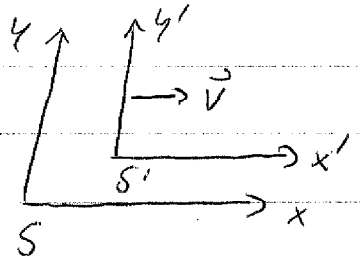
Produktion von sehr schnellen neutralen Pionen mit
$v = 0.9998\,c$
zerfallen nach im Mittel $8.7 \cdot 10^{-17}$ s in 2 Photonen. Messe Flugzeit der 2 Photonen über Flugstrecke von 31 m

Erwartung Galilei Transf. $c' = 0.9998c + c \approx 2c$
Beobachtung $c' = c = 2.9977 \pm 0.0004 \cdot 10^8$ m/s

2.4. Lorentz Transformation

korrekte Transformation von Hendrik Lorentz 1890 entdeckt. diese Form lässt Maxwell Gleichungen unverändert (siehe später).
Für kleine Geschwindigkeiten zwischen Systemen sollte sich Transformation auf Galilei Transformation reduzieren (korrekte Resultate in der makroskopischen Welt). Wahl des Ursprungs sollte keine Rolle spielen ⇝ lineare Transformation. Einfachste Form

$$x' = C(x - vt)$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$



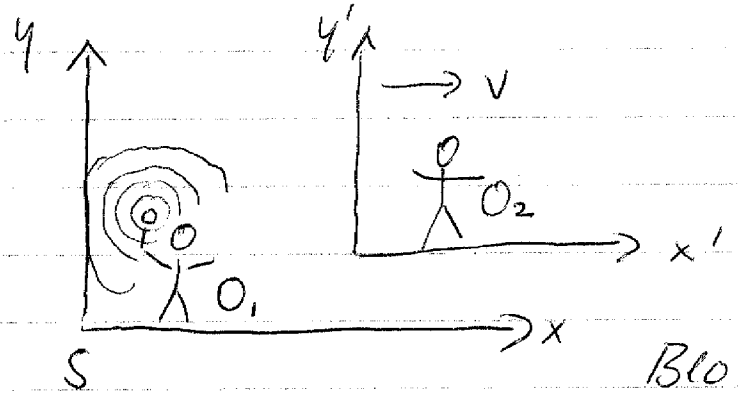
für $v \to 0$ muß sein $C \to 1$ (Galilei)

aber: Forderung daß Lichtgeschwindigkeit in allen Inertialsystemen konstant ist impliziert, daß t' nicht gleich t sein kann

einfaches Gedankenexperiment illustriert in Fig 2-5
Beobachter auf 2 nebeneinander fahrenden Zügen stehen in der Mitte jeweils Wagens und beobachten Lichtblitze, die von Quellen an beiden Enden des einen Wagens kommen. Beobachtung zu verschiedenen Zeiten zeigt, daß Gleichzeitigkeit nicht unabhängig von den Ortskoordinaten definiert werden kann. Resp ob nach Einsteins 1. Postulat erhalten sei. Einzig Ansatz: $t = t'$ und t' muß von Ort abhängen

einfachste Form $t' = At + Bx$ mit $A \to 1, B \to 0$ für $v \to 0$

Bestimmung der Faktoren A, B, C mit Hilfe von Einsteins 1. Postulat.



Beobachter O_1 sieht Lichtblitz und 'sieht' sich sphärisch expandierende Welle. Entfernung der Wellenfront von ihm $x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2$

Beobachter O_2 muß in seinem eigenen Ruhe-System dasselbe beobachten, auch eine sphärisch expandierende Wellenfront, also

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2$$

und $x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2 t'^2$

bzw. mit $x^2+y^2+z^2 = r^2$
$r^2 - c^2t^2 = r'^2 - c^2t'^2$ interessant! Grösse ist gleich in allen Ruhesystemen, d.h. ist invariant (siehe später: Vierervektor Ort-Zeit)

von oben $y=y'$ $z=z'$ ~ mit obigem Ansatz für x' und t'

$$x^2\underbrace{(1 - C^2 + C^2B^2)}_{=0} + t^2c^2\underbrace{(A^2 - 1 - \frac{v^2}{c^2}C^2)}_{=0} + 2xt\underbrace{(C^2v + c^2AB)}_{=0} = 0$$

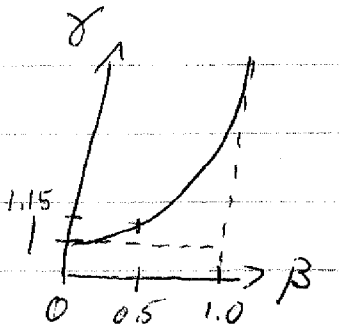
da x und t unabhängige Variable
Lösung der 3 Gleichungen → 3 Faktoren A, B, C

$$A = C = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \qquad B = \frac{-v/c}{c\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

definiere $\beta = v/c$ und $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$

$A = C = \gamma$ $B = -\frac{\beta\gamma}{c}$

Grenzwerte $v \to 0$: $\beta \to 0$ $\gamma \to 1$
$v \to c$: $\beta \to 1$ $\gamma \to \infty$



Lorentz Transformation von Orts- und Zeit-Koordinaten

$$x' = \gamma(x - \beta ct)$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$
$$ct' = \gamma(ct - \beta x)$$

für die inverse Transformation

$$x = \gamma(x' + \beta ct')$$
$$ct = \gamma(ct' + \beta x)$$

analog

Bem.: ct hat Dimension einer Länge, werden grundsätzlich in Rel. Theorie immer in Längeneinh. ausgedrückt

2.5. Längenkontraktion und Zeitdilatation

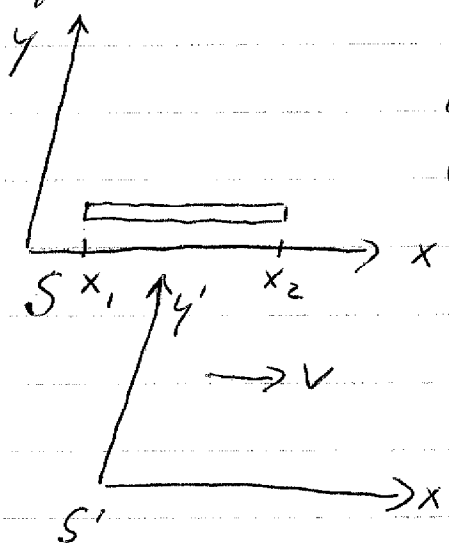
Da Zeit- und Ortskoordinaten systemabhängig sind, müssen auch Intervalle in Zeit (Dauer) und Ort (Länge) sich ändern

Definition: • Länge eines Objekts in einem Bezugssystem, in dem dieses Objekt in Ruhe ist ≡ Eigenlänge L_0

• Zeitintervall gemessen in einem Bezugssystem, in dem Ereignis am selben Ort stattfindet ≡ Eigenzeit τ_0

i) Betrachte Stab einer Länge $x_2 - x_1$ in Ruhe im System S. Beobachter O in Ruhe in diesem System kann Länge z.B. durch Photographieren bestimmen er misst die Länge

$L_0 = x_2 - x_1$ also die Eigenlänge



Beobachter O' im System S' das sich mit $\vec{v}$ in pos. x-Richtung bewegt macht Schnappschuss, während er den Stab passiert, d.h. er 'misst' die beiden Endpunkte x_2' und x_1' gleichzeitig in seinem eigenen Ruhesystem, also $t_1' = t_2' = t'$

$$\rightsquigarrow \quad x_2 = \gamma(x_2' + \beta c t') \quad (2)$$

$$x_1 = \gamma(x_1' + \beta c t') \quad (1)$$

$$(2) - (1) \quad x_2 - x_1 = L_0 = \gamma(x_2' - x_1') = \gamma L'$$

oder

$\boxed{L' = L_0/\gamma \leq L_0}$ Lorentz- oder Längenkontraktion

Die Eigenlänge ist die maximale Länge, die irgendein Beobachter messen kann. Grundsätzlich wird ein Beobachter, der sich relativ zum Objekt bewegt, eine kürzere Länge messen

Beispiel: Lastwagen m. Anhänger hat Eigenlänge 20m und nähert sich einer Brücke von Eigenlänge 18m. Mit welcher Geschwindigkeit müsste er Brücke überqueren, um einem Beobachter in Ruhe relativ zur Brücke gleich lang zu erscheinen

$L_{0L} = 20\,m \quad L_{0B} = 18\,m = L'_L \quad L_{0L} = \gamma L'_L \Rightarrow \gamma = \frac{20}{18} = 1.11$

$\beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2}} = 0.44 \quad v = 0.44\,c = 1.3 \cdot 10^8\,m/s$

(nicht sehr realistisch)

Wie lange erscheint dem Lastwagen fahrer die Brücke? $L_{0B} = 18\,m \quad \gamma = 1.11$ $L'_B = 18\,m/1.11 = 16.2\,m$

Protonradius: $r_p = 0.8\,fm$ } wie Bleikern " : $r_{Pb} = 7.1\,fm$ } aus

daß in seinem Ruhesystem den gleichen Radius hat?

$\beta = 0.994$ Wie erscheint dem Bleikern der Protonradius? $r'_p = 0.8\,fm/8.9 = 0.09\,fm$

schnell um 3 Protonen beschleunigt fliegen, Bleikern scheibenförmig $\gamma = 7.1/0.8 = 8.9$

ii) Zeitintervalle gemessen in verschiedenen Inertialsystemen

Blöcke von Leuchttürmen werden in regelmäßigen Zeitintervallen entsandt, charakterisiert sie durch Orts- und Zeitkoordinaten: $(x_0, t_1), (x_0, t_2) \ldots (x_0, t_N)$

Beobachter in Ruhe relativ zum Laborsystem sollen $t_2 - t_1 = t_n - t_{n-1} = \tau_0$ Eigenuhren gleich zeitlichen Abstand in Systemen, in denen sie am gleichen Ort abgefeuert werden

Beobachter O', bewegt sich mit v in x-Richtung, er misst für 1. Blitz $ct_1' = \gamma(ct_1 - \beta x_0)$ (1)

2. $ct_2' = \gamma(ct_2 - \beta x_0)$ (2)

(2) − (1) $c(t_2' - t_1') = \gamma c(t_2 - t_1)$

$c\tau' = \gamma c \tau_0$ oder

$\boxed{\tau' = \gamma \tau_0 \geq \tau_0}$ Zeitdilatation

kürzest möglichen Zeitintervall wird in dem System gemessen, in dem Ereignisse am selben Ort stattfinden (τ_0). Jede Beobachter in einem anderen Inertialsystem wird ein längeres Zeit beobachten. Uhren die relativ zu einem Beobachter bewegt sind, laufen für diesen Beobachter langsamer. siehe auch Bsp. ⇨ 2-6

Beispiel: Myonzerfall Myon ist ein Teilchen ähnlich einem Elektron, aber etwa 200 mal massiver und instabil. Es zerfällt mit typischer Lebensdauer von $\tau = 2.2 \cdot 10^{-6}$ s $\mu \to e \nu \bar{\nu}$

In System, in dem Myon in Ruhe ist, finden Erzeugung und Zerfall am selben Ort statt, x_0. In diesem System gemessene Lebensdauer ist also Eigenzeit $\tau_0 = 2.2 \cdot 10^{-6}$ s

Typische Situation: Myon wird durch kosmische

Strahlung im Ruhesystem der Erde 20 km über der Erdoberfläche erzeugt und bewegt sich auf Erdoberfläche zu. Wie schnell müssen Myonen fliegen um auf Erdoberfläche anzukommen, bevor es zerfällt.

Im Ruhesystem der Erde $t = \frac{d}{v} \leq \tilde{\tau} = \gamma \tilde{\tau}_0$

↑ Lebensdauer im Ruhesystem d. Erde

mit $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{c}{\sqrt{c^2 - v^2}}$ ⇝

$$\frac{c^2 - v^2}{v^2} \leq \left(\frac{c\tilde{\tau}_0}{d}\right)^2 , \quad \frac{c^2}{v^2} \leq 1 + \left(\frac{c\tilde{\tau}_0}{d}\right)^2 \qquad \frac{v}{c} = 0.9995$$

$$\gamma = 30.3$$

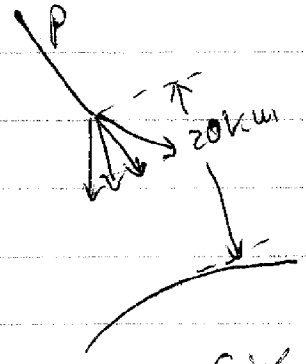
$$\tilde{\tau} = 67\,\mu s$$

Im seinem eigenen Ruhesystem misst Myon für Abstand zur Erdoberfläche $20\,km / \gamma = 660\,m$

⇒ Eq. 2.7

⊛ in der oberen Atmosphäre erzeugt kosmische Strahlung Schauer $p + N \to \pi^+ + \pi^- + \ldots$

$\pi^- \to \mu^- + \nu \qquad \tau_{0\pi} = 26\,ns$



Bem.: nicht alle Myonen zerfallen nach $\tilde{\tau}$, sondern $N(t) = N(t-0)\exp(-t/\tilde{\tau})$

$= N_0 \exp(-t/\gamma\tau_0)$

oder $N(x) = N_0 \exp(-x/\beta\gamma c\tau_0)$

im Ruhesystem e. Beobachter, rel. zu dem sich Myon mit β bewegt, zerfällt es nach typ. Distanz $\beta\gamma c\tau_0$

Direkte Messung durch Vergleich von Uhren 1971:

J.C. Hafele & R.E. Keating Science 177 (1972) 166

Präzise Atomuhren wurden auf kommerziellen Jets 45 Stunden um die Erde geflogen (misgesamt)

$v \simeq 1000$ km/h $= 300$ m/s $\beta \simeq 10^{-6}$ $\gamma = (1 + \frac{1}{2} \cdot 10^{-12})$
Vergleich mit Uhren desselben Typs auf d. Erde;
messen $\tau_0 = 45\,h = 1.62 \cdot 10^5$ s mit Genauigkeit
von 10^{-9} s. Für Uhren im Flugzeug vergeht
Zeit langsamer $\Delta\tau = (\gamma - 1)\,\tau_0 = 0.5 \cdot 10^{-12} \cdot 1.6 \cdot 10^5\,s = 8 \cdot 10^{-8}$ s
mitgenommene Uhren gehen um diesen Betrag
nach (modulo Komplikation: es sind Beschleu-
nigungen im Spiel, also eigentlich generelle Rela-
tivitätstheorie zu Behandlung nötig, korrekturen)
Beschleunigung des Jets am Anfang und Ende
(rel. zu g) macht Unterschied sonst könnte
Argument auch umgedreht werden)
siehe auch Zwillingsparadoxon
neuer Exp. auf dem Space Shuttle in Höhe
von 328 km mit $v = 7712$ m/s $\beta = 2.5 \cdot 10^{-5}$
$(\gamma - 1) = 3.3 \cdot 10^{-10}$; pro Umlauf 1.8 μs Gangunterschied
gemessen mit 0.1 % Genauigkeit (Sapp, Natur-
wissenschaften 77 (1990) 325)

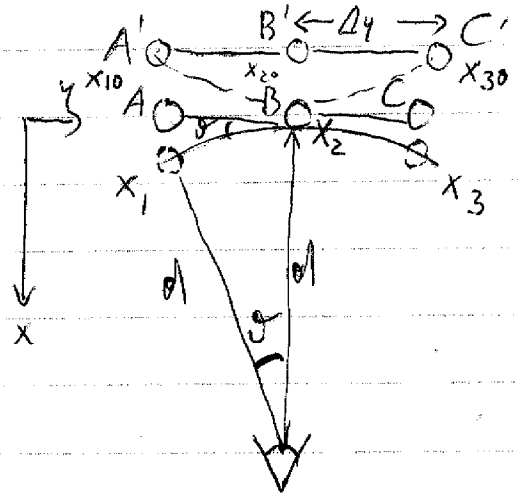
(ii) Wie schnell Objekte, die sich mit klassisch
sehr Geschwindigkeit bewegen, wirklich aus?
zuerst 1959 von J. Terrell kritisch analysiert
siehe auch G.D. Scott & H.J. van Driel, Am. J. Phys.
... (1970) 971

Wenn nur Licht, das sich nicht in Bewegungs-
richtung ausbreitet, das Auge (die Kamera) erreichen
würde → kontraktiertes Objekt (gilt für flache
Objekte)
Aber auch schon Licht auch Winkeln $\neq 90°$

Bild wird kreist durch Licht, das Auge gleichzeitig erreicht. ⇒ Fig. 2-8
Licht von Punkt C kann für bewegtes Gebäude Auge erreichen, um gleichzeitig mit Licht von A und B anzukommen, muß es aber zu einer früheren Zeit emittiert worden sein (Punkt C' im Abbild) → Ordnung für Beobachter.

Bem. Kugeln bleiben Kugeln

Kristall, das sich auf Beobachter zu bewegt ⇒ 2-9



Objekt zu $t=0$ sieht, das Auge zu $t=d/c$ erreicht ist zu Zeit $t=0$ an den Stellen x ab. Licht von A kann noch nicht bei x_1 sein, müßte früh, also an A' emittiert worden sein (Punkte x_{10}, x_{30})

$(x_2 - x_{20})/\beta c = (x_{10} - x_1)/c$

während Objekt von x_{20} nach x_2 fliegt, fliegt Licht von x_{10} nach x_1 $\quad x_{20} = x_{10} = x_{30} \equiv x_0$

für $\beta \ll c$ und $x_1 - x_2 \ll d$

$x_1 - x_2 \approx \Delta y \tan\vartheta \quad \Delta y = d \tan\vartheta$

$\approx x_2 - x_0 \approx \frac{\beta}{1+\beta} d \tan^2\vartheta$

2.6 Dopplereffekt für elektromagnetische Wellen (Licht)

Erinnerung: klassische Schallwellen

Frequenz $\nu = \nu_0 \dfrac{1 \pm v_d/v}{1 \mp v_s/v}$

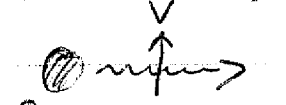
v Schallgeschw.
v_d Gesch. d. Detektors
v_s " Quelle

oben Vorzeichen: Detektor und Quelle bewegen sich aufeinander zu

beobachtete Frequenz hängt davon ab, ob sich Schallquelle, oder Beobachter, oder beide bewegen. Vernünftig, da Schallwellen sich im stationären Medium (z.B. Luft) ausbreiten

Lichtwellen: nach Einstein darf nur relative Geschwindigkeit eine Rolle spielen

Fall 1: Beobachter und/o. Quelle bewegen sich senkrecht zu Lichtwellen

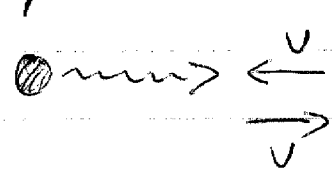


Lichtfrequenz im Ruhesystem der Quelle Q ν_0, Periode $t_0 = 1/\nu_0$

Zeitdilatation für relativ zu Quelle bewegten Beobachter $t = \gamma t_0 \rightsquigarrow \nu = \nu_0/\gamma$

Frequenz immer kleiner als Eigenfrequenz
Wellenlänge immer größer als Eigenwellenlänge

Fall 2: Beobachter und Quelle bewegen sich parallel (aufeinander o. aufeinander zu)



Zwischen benachbarten Maxima der Welle befindet sich Beobachter Distanz vt weg von der Quelle, Wellenmax. benötigt vt/c Länge, ihn zu erreichen

Charakteristische Periode

$$T = t + \frac{vt}{c} = \gamma t_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \longleftrightarrow \nu = \nu_0 / \gamma (1 + v/c)$$

$$\frac{\nu}{\nu_0} = \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}}$$

Beispiel: Expansion des Universums

Sterne emittieren Licht mit charakteristischen Frequenzen (Spektrallinien, gegeben durch atomare Resonanzen). Für entfernte Objekte wird beobachtet, daß alle Linien zu niedrigeren Frequenzen verschoben sind "Rotverschiebung". Diese Sterne, Galaxien, entfernen sich von uns. Aus Rotverschiebung kann man Geschwindigkeit bestimmen (siehe oben) und findet:

Geschwindigkeit ∝ Abstand $\quad v = H_0 \cdot d$

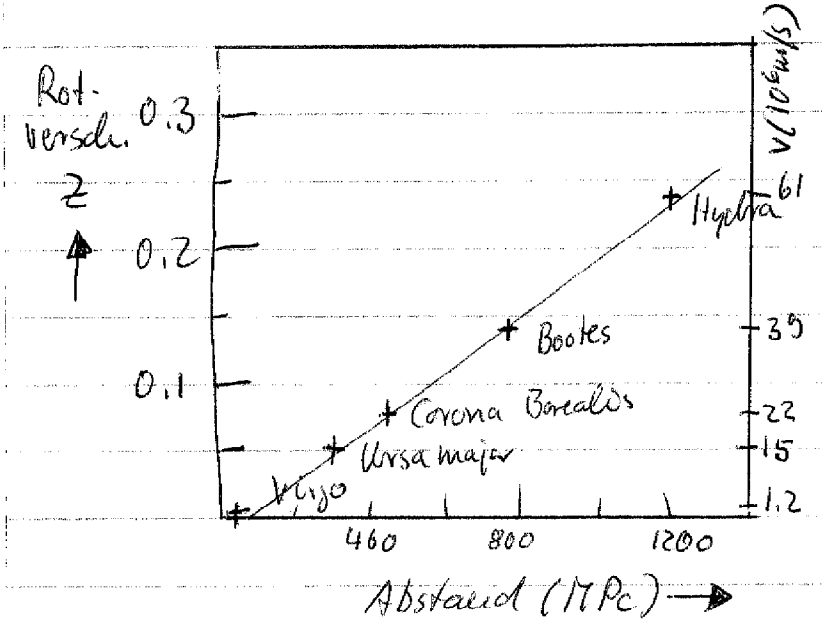
Hubble-Gesetz E. Hubble 1929 — H_0: Hubble-Konst.

Rotverschiebungsparameter $z \equiv \frac{\Delta\lambda}{\lambda}$

von oben finden wir

$$1 + z = \frac{\lambda'}{\lambda} = \sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}}$$

wenn $\beta \ll 1 \quad 1 + z \simeq 1 + \beta$



Astronomen benutzen als Längenmaß den 'Parsek'

1 pc = Abstand mit dem Grad und Sonne eine Bogensekunde aufspannen

$= 3.09 \cdot 10^{16}$ m

1 MPc $= 3.09 \cdot 10^{22}$ m

$= 3.26 \cdot 10^6$ Lichtjahre

$$H_0 \simeq \frac{71 \text{ km}}{\text{s} \cdot \text{MPc}} = 2.3 \cdot 10^{-18} \text{ s}$$

$1/H_0 = 4.3 \cdot 10^{17}$ s $= 13.8 \cdot 10^9$ J

also: Galaxie mit Rotverschiebung $z=1$ hat $\beta = \frac{3}{5}$ und ist nach Hubble Gesch $d = 2600\ Mpc \hat{=} 8{,}5 \cdot 10^9$ Lichtjahre

neueste Daten $\Rightarrow$ **Figs 2-10a,b**

2.7. Lorentz-Geschwindigkeitstransformation

		Differentiale
$x' = \gamma(x - \beta ct)$	$\longrightarrow$	$dx' = \gamma(dx - \beta c\,dt)$
$y' = y$		$dy' = dy$
$z' = z$		$dz' = dz$
$ct' = \gamma(ct - \beta x)$		$dt' = \gamma(dt - \frac{\beta}{c}dx)$

Geschwindigkeiten im Bezugssystem S', das sich mit v relativ zu S in positive x-Richtung bewegt: u_x', u_y', u_z' im System S: u_x, u_y, u_z

$$u_x' = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\gamma(dx - \beta c\,dt)}{\gamma(dt - \frac{\beta}{c}dx)} = \frac{u_x - \beta c}{1 - \frac{\beta}{c}u_x}$$

$$u_y' = \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{\gamma(dt - \frac{\beta}{c}dx)} = \frac{u_y}{\gamma(1 - \frac{\beta}{c}u_x)}$$

$$u_z' = \frac{u_z}{\gamma(1 - \frac{\beta}{c}u_x)}$$

es ist okay, Verhältnis der Differentiale zu nehmen, da Geschwindigkeiten in jedem Bezugssystem konstant. Generell $\frac{dx'}{dt'} = \frac{dx'}{dt}\frac{dt}{dt'}$

für kleine Geschwindigkeit v: $v \to 0$, $\beta \to 0$, $\gamma \to 1$

Nenner geht schneller gegen 1 als Bc gegen 0

dann $u_x' = u_x - v$, $u_y' = u_y$, $u_z' = u_z$ } Galilei Transformation ✓

für inverse Transformation: ersetze wieder β durch $-\beta$ (Richtungsänderung), also

$$u_x = \frac{u_x' + \beta c}{1 + \frac{\beta}{c} u_x'}$$

Beispiel:

u_x/c	β	u_x'/c klassisch	u_x'/c relativistisch	
0.10	−0.01	0.11	0.11	nur wenn
0.90	"	0.91	0.90	u_x und
0.10	−0.20	0.30	0.29	β nicht
0.90	"	1.10	0.93	klein gegen
0.10	−0.60	0.70	0.66	ist rel.
0.90		1.50	0.97	Transform anders als klassische

Grenzfälle:

a) $u_x = c$ $\quad u_x' = \frac{c - \beta c}{1 - \beta} = c$

b) $\beta = 1$

$$u_x' = \frac{u_x - c}{1 - \frac{u_x}{c}} = -c \, \frac{-\frac{u_x}{c} + 1}{1 - \frac{u_x}{c}} = -c$$

$\beta = -1$ $\quad u_x' = \frac{u_x + c}{1 + \frac{u_x}{c}} = c$

⇒
- Lichtgeschwindigkeit konstant gleich c in allen Bezugssystemen (Gilt 2. Postulat)
- c ist limitierende Geschwindigkeit es kann keine grössere Geschwindigkeit geben

Beispiel: Im Ruhesystem eines Elektrons nähert sich ein anderes Elektron mit Geschwindigkeit u. Was ist relative Geschwindigkeit eines Beobachters, der gleiche, aber entgegengesetzte Geschwindigkeit für die zwei Elektronen mißt?

Bezugssystem S: $\overset{u}{\longrightarrow}$ 2 ● ● 1 $\quad u_1 = 0 \quad u_2 = u$

" S': $\xrightarrow{\beta c}$ Beobachter O'

2 ● $\longrightarrow$ $\longleftarrow$ ● 1 $\quad u_1' = -u'$

$u' \quad -u' \quad u_2' = u'$

Elektron 1 $\quad u_1' = \dfrac{0 - \beta c}{1 - 0} = -\beta c$ also $u' = \beta c$ ✓

Elektron 2 $\quad u_2' = \dfrac{u - \beta c}{1 - \frac{\beta}{c} u} = u'$

$$= \frac{u - u'}{1 - \frac{u u'}{c^2}} \approx \frac{u'}{1 + \frac{u'^2}{c^2}} = \frac{u}{2}$$

nach Lösen der quadratischen Gleichung

$$u' = \frac{1 \mp \sqrt{1 - u^2/c^2}}{u/c^2} \qquad \text{(nur "−" sinnvolle Lösung)}$$

2.8. Der invariante Orts-Zeit Vierervektor

Definiere Größe $s^2 = c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2$

$s^2 = \gamma^2 (ct' + \beta x')^2 - \gamma^2 (x' + \beta c t')^2 + y'^2 + z'^2 \qquad$ mit $\beta^2 \gamma^2 = \gamma^2 - 1$

$= c^2 t'^2 - x'^2 - y'^2 - z'^2 = s'^2$

Größe s^2 ist gleich in allen Bezugssystemen "Lorentzinvariant" (Siehe oben für Lichtwelle)

sehr praktisch; Längen- und Zeitintervalle nicht invariant, aber es gibt eine Linearkombination s, die invariant ist, d.h. in allen Bezugssystemen die gleiche Länge hat.

s ist Intervall zwischen zwei Ereignissen, die sich mit räumlicher Entfernung r und Zeitabstand t ereignen

z.B. zwei Ereignisse finden im System S am gleichen Ortspunkt $r = (x, y, z)$ statt (also im ihrem eigenen Ruhesystem $\rightarrow$ dann ist ihr zeitlicher Abstand die Eigenzeit τ_0

$$s^2 = c^2t^2 - r^2 = c^2\tau_0^2 - 0 \quad \sim \quad t^2 = \tau_0^2 + \frac{r^2}{c^2}$$

d.h. τ_0 ist in der Tat das kürzeste (Zeit) Intervall, das irgendein Beobachter messen kann

$$s^2 = c^2\tau_0^2 = c^2t^2 - r^2 \quad \sim \quad \text{3 Fälle}$$

a) $s^2 > 0$, $\tau_0^2 > 0$ $\sim$ τ_0 ist reell, Intervall ist "zeitartig": es läßt sich immer ein Bezugssystem finden (mit Geschwindigkeit $v < c$) in dem zwei Ereignisse am gleichen Ort ($r = 0$), aber zu verschiedenen Zeiten passieren. Hier gilt Kausalität (siehe unten)

b) $s^2 < 0$, $\tau_0^2 < 0$ $\sim$ τ_0 ist imaginär, Intervall ist "ortsartig": es läßt sich immer ein Bezugssystem finden (mit Geschwindigkeit $v < c$) in dem die zwei Ereignisse zur gleichen Zeit ($t = 0$), aber an verschiedenen Orten passieren $\leftrightarrow$ es gibt kein System, in dem sie am gleichen Ort passieren!

c) $s^2 = 0$ $\tau_0^2 = 0$ $\sim$ in allen Bezugssystemen passieren

die zwei Ereignisse am selben Ort und zur selben Zeit

* hier Minkowski-Diagramm von 2-23/24 einschieben

Kausalität: eine Ursache ereignet sich in Punkt 1 (x_1, t_1) und erzeugt einen Effekt in Punkt 2 (x_2, t_2). Wie sieht der zeitliche Abstand in einem rel. dazu bewegten System S' aus? Insbesondere: kann man durch Wechsel des Bezugsystems Ursache und Effekt (Wirkung) umdrehen? $t_2' - t_1'$?

Signal zwischen Ursache und Effekt kann sich höchstens mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten. $\rightsquigarrow$ $x_2 - x_1 \leq c(t_2 - t_1)$

$$\left.\begin{aligned} t_1' &= \gamma\left(t_1 - \tfrac{\beta}{c} x_1\right) \\ t_2' &= \gamma\left(t_2 - \tfrac{\beta}{c} x_2\right) \end{aligned}\right\} \quad t_2' - t_1' = \gamma\left((t_2 - t_1) - \tfrac{\beta}{c}(x_2 - x_1)\right)$$

$$\geq \gamma\left((t_2 - t_1) - \beta(t_2 - t_1)\right)$$

für $\beta \leq 1$ ist $t_2' - t_1'$ immer positiv, bzw $t_2' \geq t_1'$! also keine Vertauschung von Ursache und Wirkung durch Wahl des Bezugsystems

Definiere Raum-Zeit-Vierervektor

$$r = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

kennzeichnet ein Ereignis durch einen "Weltpunkt" in Orts- und Zeitraum. Terminologie und Konzept entspricht von Minkowski

Konzept: definiere eine Grösse, deren Länge lorentz-invariant ist. Metrik: $r^2 = c^2t^2 - \vec{r}^2$

"Länge des 4-er Vektors"

Bemerkung: in der Literatur gibt es auch die

Notation $r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ ct \end{pmatrix}$

"Minkowski-Metrik"
$r^2 = \vec{r}^2 - c^2t^2$
je nach Metrik ändert sich Vorzeichen von 4er Vektoren also aufpassen.

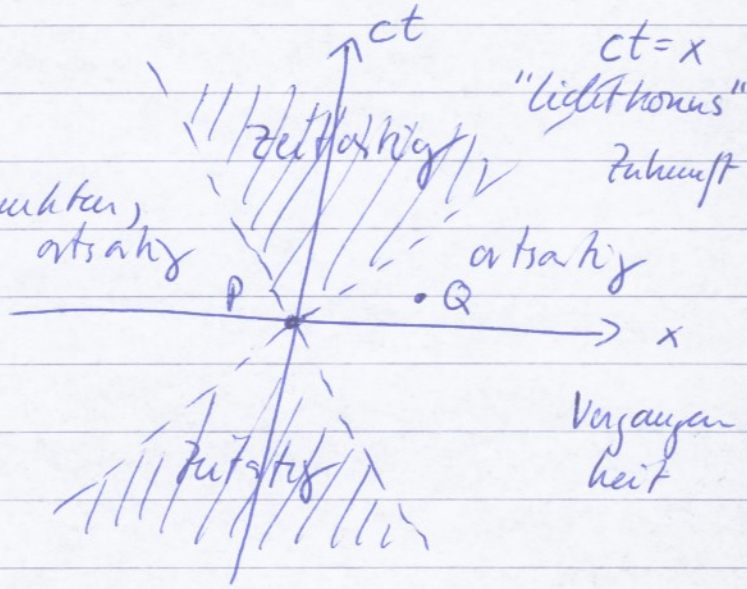
eine Lorentztransformation kann auch als Matrix-Multiplikation angesehen werden

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

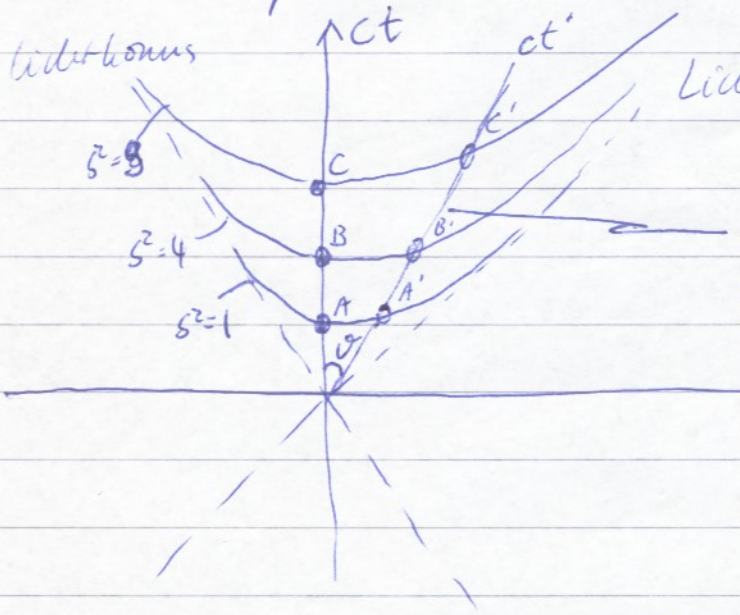
$r' = (\quad " \quad) \, r$

Notation: 4er Vekt ohne Vektzeichen $r = (ct, \vec{r})$
wir werden sehen, daß es andere 4er Vektoren gibt, z.B. $(E, \vec{p}c)$, die der gleichen Transformation gehorchen

Minkowski Diagramm:
Weltpunkt, Trajektorie von Weltpunkten, die "Weltlinie" von Signalen, die P verlassen, heisst der "Lichtkegel" (light cone)
"ortsartige" Intervalle: P zu allen Punkten innerhalb des Lichtkegels (z.B. Q)
"zeitartig": oberhalb



alle Lorentztransformationen liegen auf Hyperbeln ($c^2t^2 - x^2 = \text{konstant}$) im Ort-Zeit Diagramm, die sich entweder im orts-artigen oder im zeit-artigen Sektor befinden. Keine Lorentz-Transformation führt von einem in den anderen Sektor



⇒ Abb 2-11

zeit-artige "Weltlinie eines Beobachters O' im System S' mit Winkel ϑ gegeben durch Relativgeschwindigkeit von S' und S

Punkte A, B, C charakterisieren Ereignisse am selben Ort in S in zeitlichem Abstand $\tau_0^2 = s^2/c^2$, also zu Zeiten $t = \tau_0, 2\tau_0, 3\tau_0 \ldots$

Anmerkung: im euklidischen Raum ist Abstand definiert durch pythagoräische Beziehung, also z.B. $r^2 = x^2 + y^2$. In Raum-Zeit ist Intervall gleich $s^2 = c^2t^2 - x^2$. Raum-Zeit ist nicht euklidisch sondern hyperbolisch. Nennt man 'pseudo-euklidisch'

In Analogie zu Raum-Zeit Vierervektor definieren wir allgemeinen Vierer-Vektor A mit Komponenten (A_0, A_1, A_2, A_3) welche physikalische Grössen repräsentieren, die sich unter Lorentztransformation wie Komponenten des Raum-Zeit Vierervektors verhalten.
oft verwendete Notation, um klarzumachen, daß es sich um Vierervektor handelt

$A_\mu = (A_0, A_1, A_2, A_3)$ mit $\mu = 0,1,2,3$

Notation wird essentiell wenn wir Betrachtung auf Tensoren ausdehnen

Skalarprodukte von Vierervektoren: wichtig, da invariant unter Lorentztransformation des Inertialsystems und auch unter Rotation des Bezugssystems.

$A_\mu B_\mu = A_0 B_0 - A_1 B_1 - A_2 B_2 - A_3 B_3$

z.B. zwei Raum-Zeit Vierervektoren

$r_1 \cdot r_2 = c^2 t_1 t_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2 - z_1 z_2 = c^2 t_1 t_2 - \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2$

(Länge des Raum-Zeit Vierervektors ist Spezialfall)

2.9. Vierer-Geschwindigkeit eines Teilchens

betrachte Teilchen, das sich in System S mit Geschwindigkeit $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ bewegt. Was ist seine Vierergeschwindigkeit?

Naiver Versuch: $dr/dt = (c, u_x, u_y, u_z)$

aber $c^2 - \vec{u}^2$ ist nicht konstant in verschiedenen Bezugssystemen

korrekt: Ableitung des Raum-Zeit Vierervektors r nach der invarianten Eigenzeit des Teilchens

also $\frac{dr}{d\tilde{\tau}_0} = \frac{dr}{dt} \cdot \frac{dt}{d\tilde{\tau}_0} = \gamma \cdot \frac{dr}{dt}$ und damit

4er Vierergeschwindigkeit $u = (\gamma c, \gamma u_x, \gamma u_y, \gamma u_z)$

$u^2 = \gamma^2 c^2 - \gamma^2 \vec{u}^2 = c^2$ = invariant

komplizierte relativistische Geschwindigkeitstransformation kann leicht aus Lorentztransformation der Vierergeschwindigkeit bei Übergang von System S zu mit Geschwindigkeit v relativ dazu bewegtem System S' abgeleitet werden.

ohne weitere Diskussion:

Vierer-Beschleunigung $a = du/d\tilde{\tau} = \frac{dt}{d\tilde{\tau}} \frac{du}{dt}$

$a = \left(\gamma^4 \vec{\beta} \cdot \vec{a},\ \gamma^2 \vec{a} + \gamma^4 \vec{\beta}(\vec{\beta} \cdot \vec{a})\right)$ mit $\vec{a} = \left(\frac{du_x}{dt}, \frac{du_y}{dt}, \frac{du_z}{dt}\right)$

im Ruhesystem mit $\gamma = 1$, $\beta = 0$ $a = (0, \vec{a})$

2.10. Relativistische Dynamik

Einsteins 1. Postulat impliziert, daß Erhaltungssätze in allen Bezugssystemen gelten
→ impliziert neue Definitionen von p, T, E
(Impuls, kin. Energie, totale Energie)

2.10.1. Impulserhaltung

Beispiel: Beobachter O in System S (Labor) sieht Kollision zweier identischer Teilchen mit Massen $m_1 = m_2 = m$ mit gleicher, aber entgegengesetzter Geschwindigkeit

vor Kollision: v → ● ← $-v$ (1, 2)

nach Kollision: ●● $V = 0$

Impulserh.: $p_i = mv - mv = 0$, $p_f = 2mV = 0$ ✓

O': bewegt sich mit v in x-Richtung, also vor Kollision mit Masse 1

1 ● $v_1' = 0$ ← v_2' 2 ● ← $-v$ ●●

Lorentztransformation:

$$v_1' = 0$$

$$v_2' = \frac{-v - v}{1 + v^2/c^2} = \frac{-2v}{1 + v^2/c^2}$$

$$V' = \frac{V - v}{1 - Vv/c^2} = -v$$

Impulse:

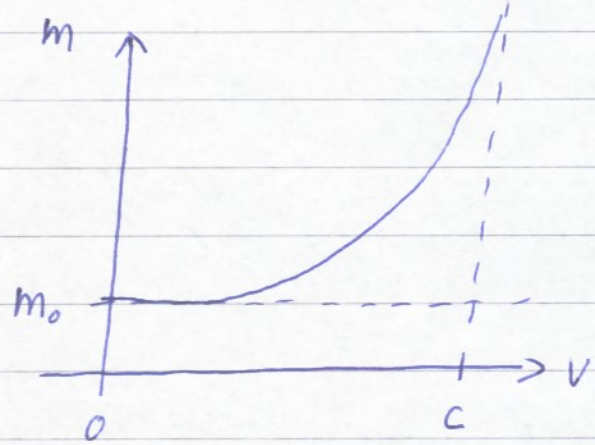
$$p_i' = 0 - \frac{2mv}{1 + v^2/c^2}$$

$$p_f' = -2mv$$

$\Rightarrow$ nicht gleich!!

Problem liegt in der Masse; muß auch transformiert werden, wenn in ein anderes Inertialsystem transformiert wird, d.h. Masse nicht Lorentz-invariant

Bemerkung von $\boxed{m = \gamma m_0 = \sqrt{\frac{1}{1-v^2/c^2}}\, m_0}$ erhält Impuls.
hier ist m_0 die "Ruhemasse" ≡ Masse gemessen im Bezugssystem, in dem Teilchen in Ruhe ist (analog zu Eigenzeit τ_0 und $\tau = \gamma\tau_0$)



Objekte werden mit wachsender Geschwindigkeit massiver Möglich, um zu garantieren, daß $v = c$ limitierende Geschwindigkeit ist. Sonst könnte unendlich große Kraft eine endliche Masse m auf unendliche Geschwindigkeit beschleunigen. So wird Objekt massiver je mehr sich v an c annähert und Kraft wird daher wenig effektiv im Reduzieren von Beschleunigung $a = F/m$ mit $v \to c$ geht $m \to \infty$, d.h. $a \to 0$

Massenzuwachs um 1% bei welcher Geschwindigkeit?
$m = 1.01\, m_0$ $\gamma = 1.01 \Rightarrow \beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2}} = 0.14$ $v = 4 \cdot 10^4$ km/s
Faustregel: bei $v < 0.1\,c$ kann Massenänderung ignoriert werden. $m \simeq m_0$ genau auf besser 0.5 %.

relativistischer Impuls $\boxed{p = mv = \gamma m_0 v}$

Test Impuls - Geschwindigkeitsbeziehung durch Kaufmann 1901 mit β-Strahlen und Krümmung im Magnetfeld á la Thompson

$\Rightarrow$ Fig 2-12

2.10.2. Energieerhaltung

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad \Longleftrightarrow \quad m^2c^2 - m^2v^2 = m_0^2c^2$$

Differential $d(m^2c^2 - m^2v^2) = \frac{\partial(m^2c^2-m^2v^2)}{\partial m} dm + \frac{\partial(m^2c^2-m^2v^2)}{\partial v} dv$

$$= (2mc^2 - 2mv^2)dm + (0 - 2m^2v)dv = d(m_0^2c^2) = 0$$

da m_0, c konst.

$$c^2 dm = v^2 dm + mv\,dv$$

Klassisch ist kinetische Energie T definiert als Arbeit, die von einer äußeren Kraft F geleistet wird um die Geschwindigkeit v eines Objekts zu ändern.

$$\Delta T = W = \int F dx = T_f - T_i$$

wenn Objekt anfangs in Ruhe, $T_i = 0$ $T_f = T$

Newtons 2. Gesetz soll nach wie vor gültig sein:

$$F = \frac{dp}{dt} = \frac{d(mv)}{dt} = m\frac{dv}{dt} + \left(v\frac{dm}{dt}\right) \longrightarrow \text{neuer relativistischer Term}$$

$$T = \int \left(m\frac{dv}{dt}dx + v\frac{dm}{dt}dx\right) = \int \left(m\,dv\frac{dx}{dt} + v\,dm\frac{dx}{dt}\right)$$

$$= \int (mv\,dv + v^2 dm) = \int c^2 dm \quad \leftarrow \text{(von oben)}$$

damit neue Bezeichnung für kin. Energie

$$\boxed{T = c^2 \int_{m(v=0)}^{m(v)} dm = c^2(m - m_0) = mc^2 - m_0c^2 = \gamma m_0 c^2 - m_0 c^2 = (\gamma - 1)m_0c^2}$$

relativistische kinetische Energie

$(\gamma - 1)$: dimensionslose Zahl m_0c^2: dimensionsmäßig Energie

physikalische Bedeutung: die Energie, wenn Teilchen mit 'Ruhemasse m_0' sich nicht bewegt also $\beta = 0$, $\gamma = 1$; dann hat es keine kinetische Energie. Nenne m_0c^2 die 'Ruheenergie' oder 'Ruhemassenenergie'

relativistische kinetische Energie: Differenz von zwei Energien, der Energie mc^2 ← Energie des bewegten Objekts und Energie m_0c^2 ← Energie des Objekts in Ruhe

dies entspricht genau der Definition der klassischen kinetischen Energie!

weiter

$$mc^2 = T + m_0c^2 = E \quad \text{totale relativistische Energie}$$
$$= \gamma m_0c^2 \quad = \text{relativistische kin. "} + \text{Ruheenergie}$$

Energie und Masse ($\cdot c^2$) sind äquivalent

Beispiele zur Illustration:

a) Elektron wird von Ruhe in einer Potentialdifferenz von 5 MV beschleunigt. Endgeschwindigkeit?

$V = 5\,MV \quad q = e \rightarrow T_e = 5\,MeV$

$T_e = (\gamma - 1) m_{0e}c^2 \quad m_{0e}c^2 = 0.511\,MeV$ Elektron-Ruheenergie

$\rightsquigarrow \gamma - 1 = 10 \quad \gamma = 11 \quad \beta = \sqrt{1 - 1/\gamma^2} = 0.996$

b) Proton wird durch dieselbe Potentialdiff. beschleunigt $\quad m_{0p}c^2 = 938.4\,MeV \quad T_p = 5\,MeV$

$\gamma - 1 = \frac{5}{938.4} \quad \gamma = 1.005 \quad \beta = 0.103$ viel träger als Elektr.

c) Was ist Fehler, wenn man klassische Formel benutzt hätte?

Elektron $T = \frac{1}{2} m_{0e} v^2 = \frac{1}{2} m_{0e} c^2 \left(\frac{v}{c}\right)^2$

$v/c = \sqrt{\frac{2T}{m_0 c^2}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 5\ \mathrm{MeV}}{0.5\ \mathrm{MeV}}} = \sqrt{20} = 4.4$! Fakt 4.5 zu groß

Proton $\frac{v}{c} = \sqrt{\frac{2 \cdot 5\ \mathrm{MeV}}{938.4\ \mathrm{MeV}}} = 0.103$ bis auf 3 Stellen ok

Kriterium: wenn kinetische Energie klein im Vergleich zur Ruhemassenenergie, können klassische Beziehungen ohne Probleme benutzt werden.
Aber: selbst dann brauchen wir nicht Masse in kg sondern können mit $m_0 c^2$ in MeV leben.

genaue Überprüfung ⇒ 2-13

Beweis der Äquivalenz von Masse und Energie:
"Paarbildung" $\gamma \to e^+ e^-$ wenn Energieerhaltung es erlaubt.
+ (braucht Partner um Impulserhaltung zu garantieren $\gamma + M \to e^+ e^- + M$)

⇒ Fig. 2-14

1932 wurde in kosmischer Strahlung Positron entdeckt (C. Anderson) in 1300 Spuren kosmischer Strahlung wurden in einer Nebelkammer 15 positiv geladene Teilchen über gekrümmte Spuren (B-Feld) entdeckt. 6mm Eisenplatte in weg in Richtung zu identifizieren.
Aufnahme: Positron mit 63 MeV = p·c von Platte, 23 MeV danach. Spuren sehen aus wie Elektronspuren, aber positive Ladung $\leftrightarrow e^+$
Könnten es Protonen sein? kinetische Energie eines Protons mit $pc = 63$ MeV $\ll m_0 c^2$, nicht relativistisch ok $T = \frac{p^2 c^2}{2 m_0 c^2} = \frac{63^2\ \mathrm{MeV}^2}{2 \cdot 938\ \mathrm{MeV}} \approx 2$ MeV

würde auf jeden Fall in 6mm Eisen gestoppt.
Teilchen muß sehr leicht sein, um Durchdringkraft zu haben

Verknüpfung relativistischer Impuls und totale relativistische Energie

Wir hatten gesehen: $p = mv = \gamma m_0 v$

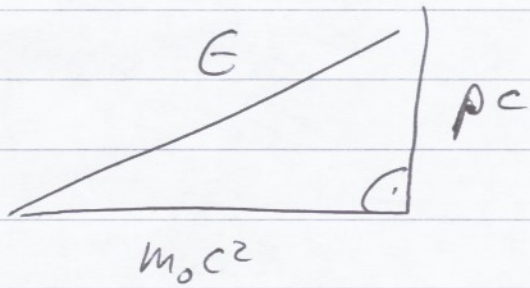
$$pc = \gamma m_0 c^2 \frac{v}{c} = \gamma \beta m_0 c^2$$
$$= \beta E$$

d.h. pc ist immer kleiner als E, aber für $\beta \to 1$ ist alle Energie eines Teilchens als Impuls vorhanden $pc \simeq E$; dagegen kann Ruhemassenenergie vernachlässigt werden.

$$E^2/\gamma^2 = E^2 \underbrace{(1-\beta^2)}_{\hookrightarrow (pc/E)^2} = (m_0 c^2)^2$$

$$\rightarrow \quad E^2 = (m_0 c^2)^2 + (pc)^2 \quad \text{oder} \quad E = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + (pc)^2}$$

Satz d. Pythagoras für rechtwinkliges Dreieck mit Seiten pc und $m_0 c^2$ und Hypothenuse E



Manchmal nützlich:

$$E^2 = (T + m_0 c^2)^2 = T^2 + 2 T m_0 c^2 + (m_0 c^2)^2 = (pc)^2 + (m_0 c^2)^2$$

Bemerkung: für alle Teilchen mit Ruhemassenenergie gleich Null gilt

$$T = pc = E \qquad \text{z.B. Photonen}$$

Beispiele: 1) Ein Teilchen mit Ruhemassenenergie $m_0 c^2 = 140$ MeV bewegt sich mit Geschwindigkeit $\beta = \frac{v}{c} = 0.80$. Finde relativistischen Impuls und totale Energie

$\beta = 0.80 \qquad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-0.8^2}} = 1.67$

$E = \gamma m_0 c^2 = 233\ \mathrm{MeV}$

$T = E - m_0 c^2 = 93\ \mathrm{MeV}$

$pc = \beta E = 186\ \mathrm{MeV}$ oder $p = 186\ \frac{\mathrm{MeV}}{c}$ ← neue Dimension f. p!

genauso $pc = \sqrt{E^2 - (m_0 c^2)^2} = \sqrt{233^2 - 140^2} = 186\ \mathrm{MeV}$

2) Finde Geschwindigkeit eines Teilchens mit Ruhemasse $m_0 c^2$ dessen kinetische Energie gleich der Ruhemassenenergie ist.

$E = m_0 c^2 + m_0 c^2 = 2 m_0 c^2 \qquad \gamma = 2 \qquad \beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2}} = 0.87$

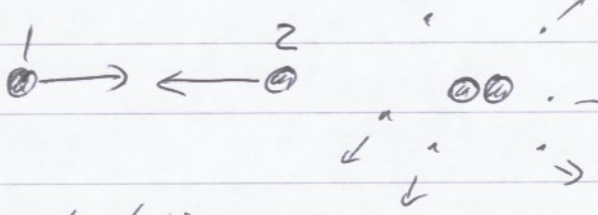
$v = 2.6 \cdot 10^8\ \mathrm{m/s}$

Impuls? $pc = \beta E = \beta \cdot 2 m_0 c^2 = 1.73\ m_0 c^2$

Kann Äquivalenz von Masse und Energie direkt demonstriert werden?

Direkte Konsequenz ist Teilchenproduktion in Kollisionen schneller Teilchen.

z.B. Kollider

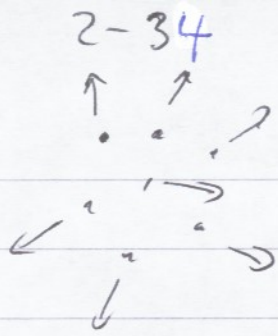


Energie, die für Produktion neuer Teilchen zur Verfügung steht $E_{av} = 2E_1 - 2m_0^p c^2$

(zwei Teilchen mit identischer Masse m_0^p und Energien $E_1 = E_2 = E$ kollidieren; totale Energie $2E$

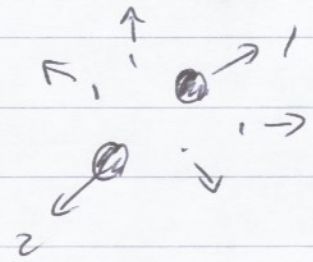
2-34

Aktuation 1



Teilchen annichilieren
$E_{av} = 2E_1$

Aktuation 2



$E_{av} = 2E_1 - E_1^a - E_2^a$
$= 2(E_1 - m_0^p c^2) - T_1^a - T_2^a$

z.B. ein Elektron und ein Positron (e^+) gleicher Energie kollidieren. Welche kin. Energie im Labor ist nötig für die Reaktion

$e^+ + e^- \rightarrow \pi^+ + \pi^-$

$m_0^\pi c^2 = 140$ MeV Energieerhaltung fordert, daß totale Energie nach Kollision ist größer als mindest $2 m_0^\pi c^2 = 280$ MeV (Pionen in Ruhe)

d.h. vor Kollision $2(m_0^e c^2 + T_e) = 280$ MeV oder

$T_e = 140 - 0.5 = 139.5$ MeV

2. Protonen p und Antiprotonen $\bar{p}$, je mit totaler Energie von 50 GeV kollidieren und annihilieren. Wieviele Pionen können maximal produziert werden? Nehmen Sie an, daß die produzierten Pionen im Mittel einen Impuls von 300 MeV/c haben. $p + \bar{p} \rightarrow n\pi$

$E = 2 \cdot 50$ GeV $= 100$ GeV $= n E^\pi = n \sqrt{(m_0^\pi c^2)^2 + (pc)^2}$

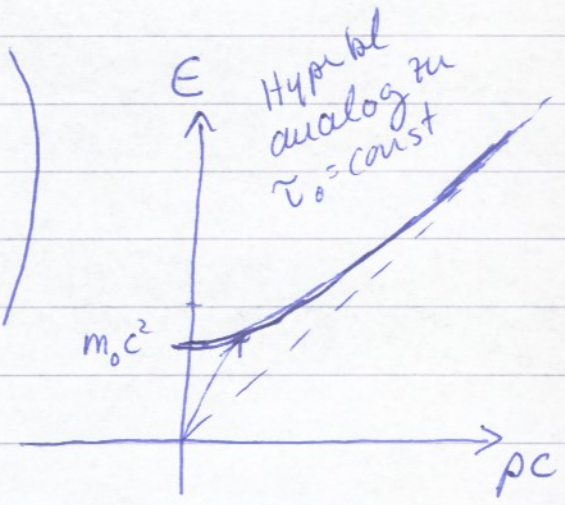
$$n = \frac{100 \text{ GeV}}{\sqrt{0.14^2 + 0.3^2}\ \text{GeV}} = 302$$

2-10.3 Energie - Impuls vierervektor p

Invariante: $E^2 - p^2c^2 = (m_0c^2)^2$ ist Lorentzinvariante Konst.

$p = (E, \vec{p})$ transformiert analog zu $(ct, \vec{r})$

$$\begin{pmatrix} E' \\ p_x'c \\ p_y'c \\ p_z'c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ p_xc \\ p_yc \\ p_zc \end{pmatrix}$$



also $E' = \gamma E - \gamma\beta p_x c$

$p_x'c = \gamma p_x c - \gamma\beta E$

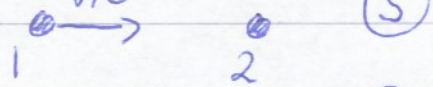
Speziell im Ruhesystem eines Teilchens sind

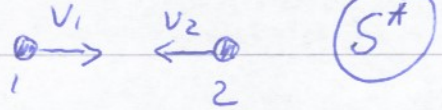
$pc = 0 \quad T = 0 \quad E = m_0c^2$ und $p = (m_0c^2, 0, 0, 0)$

2.11. Relativistisches Schwerpunktsystem

Zur Betrachtung von Teilchenkollisionen

es gibt zwei ausgezeichnete Koord. systeme: Labor- und Schwerpunktsystem oder cm-System

z.B. Labor 

cm 

Schwerpunktsystem S^* bewegt sich relativ zu Labsystem S mit Geschwindigkeit β^*

Behalte klassische Definition: im Schwerpunktsystem ist Vektorsumme der Impulse Null

einfacher Fall: zwei Teilchen identischer Masse, eines in Ruhe im Labor

$m_a = m_b = m_0$ $\quad T_a$ im Labor, $T_b = 0$

Labor: $p = p_a + p_b = p_a$ totaler Impuls im Labor

$E = E_a + E_b = T_a + 2m_0c^2$ totale Energie im Labor

Lorentztransf. in cm-System mit β^*

$p^* = \gamma^*\left(p - \frac{\beta^* E}{c}\right) = 0$ totaler Impuls im cm

$$\beta^* = \frac{pc}{E} = \frac{p_a c}{T_a + 2m_0c^2} = \frac{\beta E_a}{E_a + m_0c^2}$$

$$\beta^* E_a = \beta E_a - \beta^* m_0 c^2$$

$$p_a^* = \gamma^*(p_a - \beta^* E_a/c) = \gamma^*(\beta E_a/c - \beta^* E_a/c) = \gamma^*\beta^* m_0 c$$

$$p_b^* = \gamma^*(-\beta^* m_0 c^2/c) = -\gamma^*\beta^* m_0 c$$ ✓ okay

was ist totale Energie im cm-System E^*?

$$E^* = E_a^* + E_b^* = \frac{p_a^* c}{\beta^*} + \frac{p_b^* c}{-\beta^*} = \gamma^* m_0 c^2 + \gamma^* m_0 c^2 = 2\gamma^* m_0 c^2$$

Relation für totale Energie im Labor-System E?

$$E = \sqrt{(p_a c)^2 + (m_0 c^2)^2} + m_0 c^2$$

$$(E - m_0c^2)^2 = (p_a c)^2 + (m_0c^2)^2 \quad \text{benutze } \beta^* = \frac{pc}{E}$$

$$= (\beta^* E)^2 + (m_0c^2)^2$$

$$E^2 - 2m_0c^2 E + (m_0c^2)^2 = (\beta^* E)^2 + (m_0c^2)^2$$

$$E(1 - \beta^{*2}) = 2m_0c^2 \quad \text{oder} \quad E = 2\gamma^{*2} m_0 c^2 = \gamma^* E^*$$

$$\boxed{\beta^* = \frac{pc}{E} \quad \text{und} \quad \gamma^* = E/E^*}$$

Rekonstruktion der invarianten Masse

Teilchen $X \rightarrow A + B$

$p_X = (E_X, \vec{p}_X c)$ $\quad p_X^2 = E_X^2 - |\vec{p}_X c|^2 = (m_{X0} c^2)^2$

m_{X0}: invariante Masse

Beispiel: $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$

messe Identität (Photon) und Viererimpulse der Zerfallsphotonen

Viererimpuls $p_{\gamma 1} = (E_{\gamma 1}, \vec{p}_{\gamma 1} c)$

$p_{\gamma 2} = (E_{\gamma 2}, \vec{p}_{\gamma 2} c)$

$p_{\gamma 1} p_{\gamma 2} = E_{\gamma 1} E_{\gamma 2} - \vec{p}_{\gamma 1} c \cdot \vec{p}_{\gamma 2} c = E_{\gamma 1} E_{\gamma 2} (1 - \cos\vartheta)$

Viererimpuls^2 Pion = (Summe Viererimpulse Photonen)^2

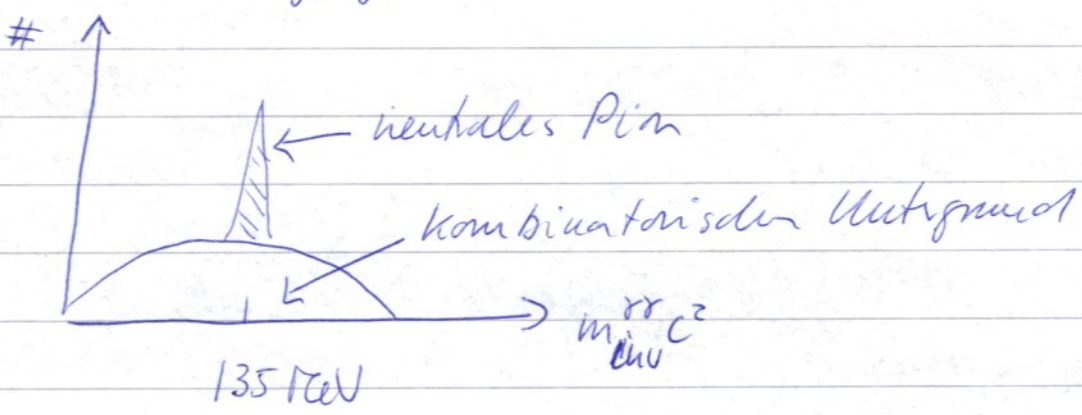
$(m_{\pi 0} c^2)^2 = (p_{\gamma 1} + p_{\gamma 2})^2 = \underbrace{p_{\gamma 1}^2}_{0} + \underbrace{p_{\gamma 2}^2}_{0} + 2 p_{\gamma 1} p_{\gamma 2} = 2 E_{\gamma 1} E_{\gamma 2} (1 - \cos\vartheta)$ für Photonen

oder: $p_{\pi 0}^2 = (m_{\pi 0} c^2)^2 = (p_{\gamma 1} + p_{\gamma 2})^2 \equiv (m_{inv}^{\gamma\gamma} c^2)^2$

$= (E_{\gamma 1} + E_{\gamma 2})^2 - (\vec{p}_{\gamma 1} c + \vec{p}_{\gamma 2} c)^2$

$= E_{\gamma 1}^2 + 2 E_{\gamma 1} E_{\gamma 2} + E_{\gamma 2}^2 - |\vec{p}_{\gamma 1} c|^2 - 2 \underbrace{|\vec{p}_{\gamma 1}||\vec{p}_{\gamma 2}| c^2}_{|\vec{p}_{\gamma 1} c||\vec{p}_{\gamma 2} c| \cos\vartheta} - |\vec{p}_{\gamma 2} c|^2$

$= 2 E_{\gamma 1} E_{\gamma 2} (1 - \cos\vartheta)$



2.12 Bewegte Ladungen und Felder

relativistische Verallgemeinerung des 2. Newton-schen Gesetzes

klassisch $\vec{F}_k = \frac{d\vec{p}}{dt} = m\dot{\vec{v}} = m\vec{a}$

definiere relativistischen Kraftvierervektor

$F = (F_0, \vec{F})$ Relation zu klassischer Kraft?

2. Newton'sches Gesetz gilt: $F = \frac{dp}{d\tau} = m_0 \frac{du}{d\tau} = m_0 a$ (F, p / u, a Vierervektoren)

hier Vierergeschwindigkeit mit $u = \frac{dx}{d\tau} = (\gamma c, \gamma \vec{v})$

$$a = \frac{du}{d\tau} = \underbrace{\frac{dt}{d\tau}}_{\gamma} \frac{du}{dt} = \left(\frac{(\vec{v}/c)\,\vec{a}}{(1-(v/c)^2)^2} \cdot \frac{\vec{a}}{(1-(v/c)^2)} + \frac{(\vec{v}/c)\,((\vec{v}/c)\cdot\vec{a})}{(1-(v/c)^2)^2} \right)$$

mit $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt}$

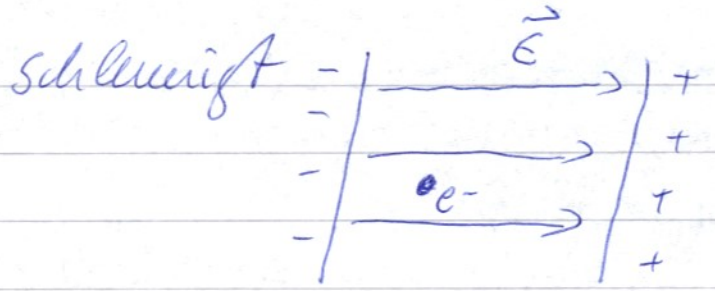
damit $\vec{F} = m_0 \frac{dt}{d\tau} \frac{d\gamma \cdot \vec{v}}{dt} = m_0 \gamma \frac{d\gamma\vec{v}}{dt} = \gamma \frac{d\vec{p}}{dt} = \gamma \vec{F}_k$

$$F_0 = \frac{1}{c}\frac{dE}{d\tau} = \frac{1}{c}\frac{dt}{d\tau}\frac{dE}{dt} = \frac{\gamma}{c}\frac{dE}{dt}$$

$$\boxed{F = \gamma\left(\frac{1}{c}\frac{dE}{dt}, \frac{d\vec{p}}{dt}\right) = \gamma\left(\frac{1}{c}\frac{dE}{dt}, \vec{F}_k\right)}$$ relativistischer Kraftvierervektor

F_0: pro Zeiteinheit vom Körper abgegebene od. aufgenommene Energie, d.h. Leistung; ist proportional zu der Energie, die ein beschleunigter Körper - von einem rel. dazu ruhenden Inertialsystem beobachtet - pro Zeiteinheit aufnimmt oder abgibt.

Beispiel: Elektron wird in homogenem el. Feld be-



kann zeigen (hier ohne Beweis), daß $a \cdot u = 0$

also auch $Fu = 0 = c\frac{dt}{d\tau} \vec{F}_0 - \frac{d\vec{x}}{d\tau} \cdot \vec{F}$ | : γ

mit $F_0 c = \gamma \frac{dE}{dt}$ ↝ $\gamma \frac{dE}{dt} - \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{F} = 0$ | : γ

mit $\vec{F}/\gamma = \vec{F}_K$ ↝ $\frac{dE}{dt} - \vec{v} \cdot \vec{F}_K = 0$

im kons. Kraftfeld $\frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{F}_K = \frac{d\vec{x}}{dt}(-\vec{\nabla}V) = -\frac{dV}{dt}$

also $\frac{d(E+V)}{dt} = 0$ Summe aus kinetisch und wie eben definiert pot. Energie ist erhalten

$\vec{F} = -\gamma \vec{\nabla} V$ und damit gilt unverändert

$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V$ auch relativistisch

→ da hier Summe $E+V$ auftaucht, muß sich auch Lorentztransformation V wie E verhalten. Es ist ebenfalls die Nullkomponente eines Vierervektors

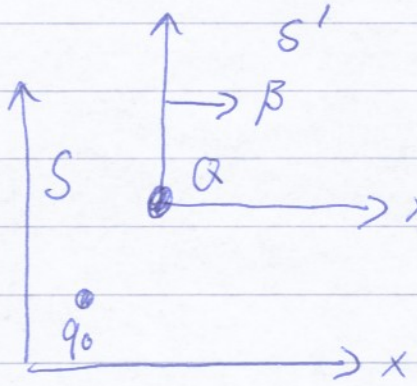
$A = (V, \vec{A})$ speziell: im Ruhesystem $A = (V, \vec{0})$

$A' = \Lambda \cdot A$

↳ 4×4 Transformationsmatrix wie gehabt

2.12.1. E- und B-Feld, ruhende und bewegte Ladung

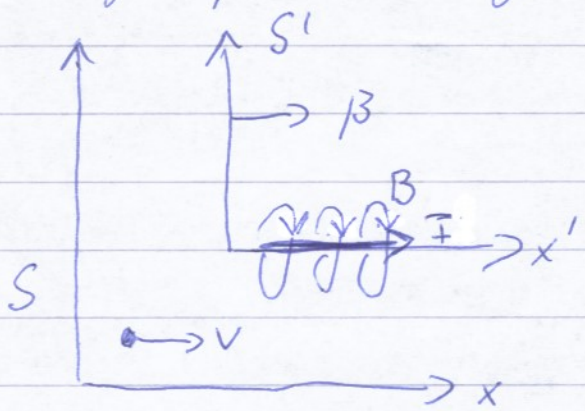
Betrachte Ladung Q in Ruhe in System S'
erzeugt Feld $\vec{E}'$
in S: el. Feld $\vec{E}$ gemessen durch Kraft auf Probeladung q_0 am Ort $\vec{r}$, $\vec{F} = q \cdot \vec{E}$
Messung zeigt: Gauss'scher Satz gilt unabhängig davon ob Q relativ zu S bewegt ist oder nicht



$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{A} = \oint \vec{E}' d\vec{A}' = Q/\varepsilon_0$$

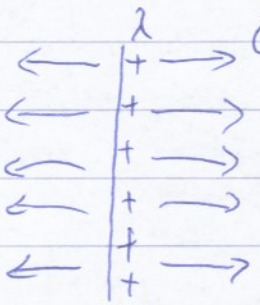
Q ist lorentzinvariante Erhaltungsgröße

Magnetfeld erzeugt durch bewegte Ladung (Strom)



Messung von B-Feld in System S durch Lorentzkraft $\vec{F}_L$ auf bewegte Ladung q
$\vec{F}_L = q \vec{v} \times \vec{B}$

elektrisches Feld einer Linienladung mit Ladungsdichte λ (Ladung / Länge):



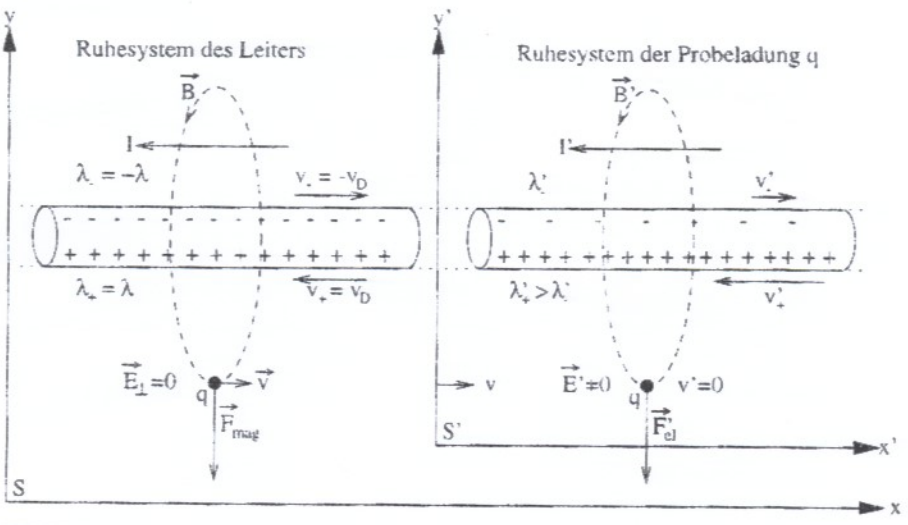
Gaußscher Satz: $|\vec{E}| = \frac{1}{2\pi\varepsilon_0} \frac{\lambda}{r}$

Magnetfeld eines Stroms I:

Ampèresches Gesetz: $|\vec{B}| = \frac{\mu_0 I}{2\pi r}$
$= \frac{1}{2\pi\varepsilon_0 c^2} \frac{I}{r}$

Form sehr ähnlich. Es besteht enge Beziehung zwischen E- und B-Feldern. Durch Wechsel des Bezugsystems wandeln sich elektrische in magnetische Felder (und umgekehrt), also besser: "elektromagnetisches Feld". War, was Einstein zur Formulierung der spez. Relativitätstheorie motiviert hat (siehe unten)

Illustration an einem Beispiel: gerader, stromführender Leiter. Zur Vereinfachung nehmen wir an, daß Strom sich aus Bewegung von pos. und neg. ladungsträgern mit entgegengesetzten, aber gleichen Geschwindigkeiten zusammensetzt.



im System S: Probeladung q bewegt sich mit $\vec{v}$, elektrischer Strom I hat Beiträge aus pos. und neg. Ladungsträgern, die sich mit Geschw.
$v_+ = v_0$ und $v_- = -v_0$ bewegen

$$I = \lambda_+ v_+ - \lambda_- v_- = 2\lambda v_0 \qquad (\lambda \text{ ist Ladung/Länge} = Q/L)$$

erzeugt Magnetfeld $B = \frac{\mu_0 I}{2\pi r}$

da effektive Längenladung $\lambda_{eff} = \lambda_+ + \lambda_- = 0$
ist das elektrische Feld $E = E_\perp = \frac{\lambda_{eff}}{2\pi\varepsilon_0 r} = 0$
also Kräfte auf Probeladung q

$$F_{magn} = q \cdot v \cdot B = q \cdot v \frac{\mu_0 I}{2\pi r} \quad \text{und} \quad F_{el} = q \cdot E_\perp = 0$$

für q pos. repulsiv

im System S': bewegt sich mit v in pos x-Richtung so daß Probeladung in S' ruht;
jetzt keine Lorentzkraft, da $v' = 0$. Widerspruch mit Betrachtung in S? Hier Verletzung des Relativitätsprinzips. Kann durch repulsive Kraft eines elektrischen Feldes vermieden werden.

$v'_+ > v_0$, $v'_- < v_0$ (Lorentzgeschwindigkeitstransf)
λ_+ wird größer als λ_-, da System S' in dem pos. Ladungsträger ruhen sich rel. zu S' schneller bewegt als System S, in dem neg. Ladungsträger ruhen;
also stärkere Lorentzkontraktion der Länge für pos. Ladungsträger in S', also größere Längenladung λ'_+ im Vergleich zu λ'_-.
korrekte Geschwindigkeitstransformation ergibt

$$\lambda'_{eff} = 2\lambda \frac{v_0 v}{c^2}\gamma = I\frac{v}{c^2}\gamma \quad \text{und damit}$$

$$E_\perp' = \frac{\lambda_{eff}'}{2\pi\varepsilon_0 r} = \frac{v I \gamma}{2\pi \varepsilon_0 c^2 r} = \frac{v \mu_0 I \gamma}{2\pi r}$$

$F_{el}' = q E_\perp' \neq 0$ repulsiv für q pos. da λ_{eff} pos.

Transformation der Kraft nach S (siehe oben)

$$F_\perp = F_\perp'/\gamma = F_{magn} = \frac{F_{el}}{\gamma} = \frac{q v \mu_0 I}{2\pi r} \checkmark \text{(siehe oben)}$$

$= qvB$

el. Kraft $F_{el}' = q E_\perp'$ (in S') nicht transformiert nach S ergibt Lorentzkraft $F_{magn.}$ in S.

also: elektrische und magn. Kräfte haben den gleichen Ursprung; Relativitätstheorie erklärt magn. Kräfte durch Lorentzkontraktion bewegter Ladungsverteilung, gleichen, Lorentzinvarianter Ursprung der Kräfte, die elektrische Ladung Q

Fundamentale Gesetze: Ladungsinvarianz, Coulomb Gesetz, Lorentztransformation

Magnetfeld ist die Folge der Lorentzinvarianz der Ladung, des Coulombpotentials und des Relativitätsprinzips

magn. Kräfte zwischen bewegten Ladungen können als relativistische Effekte beschrieben werden.

Gedankenexperiment 2-43a Einstein

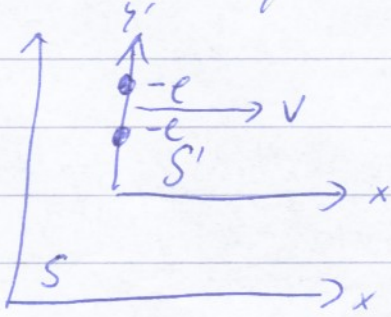
elektrische Kraft sehr stark, aber in der makroskopischen Welt sind Ladungen weitestgehend kompensiert

Illustration: freie Ladungen (Protonen und Elektronen) von 1g Wasserstoff auf Distanz Nordpol - Südpol der Erde $Q = 96000\,C$

$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q^2}{r^2} = 5 \cdot 10^5\,N$$ equivalent zu Gewicht von 50t

Einstein kurz nach Formulierung d.
spez. Relativitätstheorie: "nichts hat mich so sehr
zur spez. Relativitätstheorie gebracht, wie meine
Überzeugung, daß die Lorentzkraft auf eine
bewegte Ladung in einem Magnetfeld nichts
anderes ist als eine elektrische Kraft"

2 elektrisch einfach neg. geladene Teilchen in Ruhe im System S'



im S' nur Coulombkraft
$F'_{el} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}$ abstossend

im S: $F'_{el}\gamma = F_{el} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}\gamma$ abstossend
F_{magn} analog 2 parallele stromdurchflossene Leiter

$\propto I_1 I_2 = -\frac{e^2\beta^2\gamma}{\text{altr.}\ 4\pi\varepsilon_0 r^2}$ $\quad \frac{F_{magn}}{F_{el}} = \beta^2$ $\quad F_{tot} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}\underbrace{(1-\beta^2)}_{1/\gamma^2}\gamma$

$= F_{el}/\gamma$ ✓ok

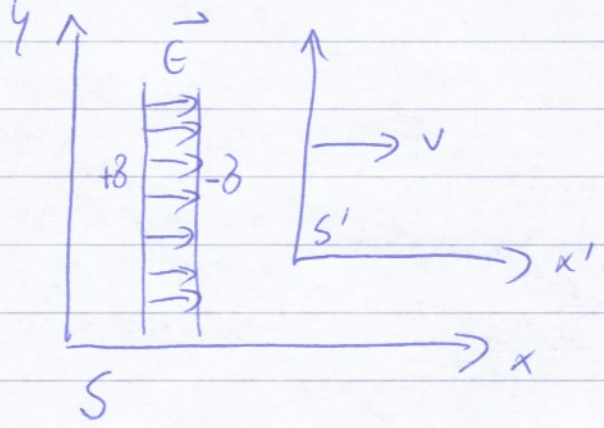
Transformation von E- und B-Feldern

Wollen Gleichungen nicht in λ, I, v_D ausdrücken sondern nur Felder.
Betrachte einige Sonderfälle

a) $\vec{E}=0$ $\vec{B}\neq 0$ stromdurchfloss. Leit. in S von oben
$\vec{E}' = \gamma(\vec{v}\times\vec{B})$

| generell gilt: in jedem System S', das sich relativ zu S (wo $\vec{E}=0$, $\vec{B}\neq 0$) mit $\vec{v}$ bewegt, existiert elektrisches Feld $\vec{E}'\neq 0$ auch $\vec{B}'\neq\vec{B}$

b) $\vec{E}\neq 0$ $\vec{B}=0$ in S
Linienladung ruhend in S, in bewegtem System sieht man Strom I' und daher $\vec{B}'\neq 0$
$\vec{B}' = -\gamma\left(\frac{\vec{v}}{c^2}\times\vec{E}\right)$
wie transformiert sich $\vec{E}$? unterscheide Komponenten parallel und senkrecht zu $\vec{v}$
parallel: denke an bewegten Kondensator mit Flächenladung $\sigma = \frac{Q}{A}$

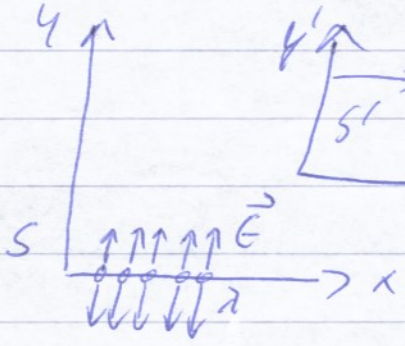


Lorentzkontraktion nur in Bewegungsrichtung, $\perp$ keine Längenänderung, also

$$b' = b$$

$$E_x' = E_\parallel' = E_\parallel = \frac{\sigma}{\varepsilon_0}$$

senkrecht: bewegte Linienladung



$\lambda' = \gamma\lambda$ (siehe oben)

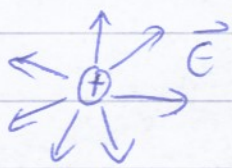
$$E_\perp' = \gamma E_\perp = \frac{\lambda'}{2\pi\varepsilon_0 r} = \frac{\gamma\lambda}{2\pi\varepsilon_0 r}$$

dies gilt generell: $E_\perp' = \gamma E_\perp$

(falls $\vec{B} = 0$ in S) $\vec{E}_\parallel' = \vec{E}_\parallel$

elektrisches Feld einer bewegten Punktladung

in Ruhe in S



$\operatorname{rot}\vec{E} = 0$

radial, sphärisch symm.

in S'

$\operatorname{rot}\vec{E}' \neq 0$

Feld radial ab nicht sphärisch symmetrisch

Zusammenfassend falls $\vec{E} \neq 0$ und $\vec{B} \neq 0$

$$\vec{E}_\parallel' = \vec{E}_\parallel \qquad \vec{B}_\parallel' = \vec{B}_\parallel$$

$$\vec{E}_\perp' = \gamma(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})_\perp \qquad \vec{B}_\perp' = \gamma\left(\vec{B} - \frac{\vec{v}}{c^2}\times\vec{E}\right)_\perp$$

generell gibt es Feldstärketensor der alle Komp von E und B enthält und transformiert wie jede kovariante

siehe J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, Chap. 11.2 12
der Vollständigkeit halber:

Feldstärketensor

$$F'^{\mu\nu} = \Lambda F^{\mu\nu} \Lambda$$

Transf. Matrix von oben

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

übrigens folgen dann die Maxwellgleichungen aus

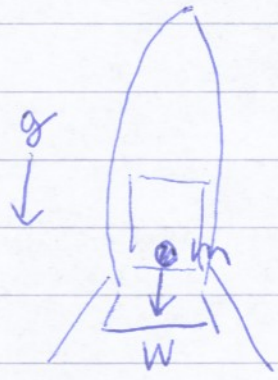
$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0 \qquad \partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

2.13. Ausblick auf Allgemeine Relativitäts-Theorie

von Einstein zwischen 1907 und 1919 formuliert
Einstein rückblickend (1922) über die Idee
Ich saß auf meinem Stuhl im Patentamt Bern.
Plötzlich kam mir ein Gedanke: 'Wenn ein
Mensch frei fällt, dann spürt er sein eigenes
Gewicht nicht'. Ich war verblüfft. Dieses Ge-
dankenexperiment machte einen tiefen Eindruck
auf mich. Das brachte mich auf die Gravita-
tions Theorie.

Das Äquivalenzprinzip: auf einer lokalen Skala
sind die Effekte eines Gravitationsfelds ununterscheid-
bar von den physikalischen Effekten eines beschleu-
nigten Koordinatensystems

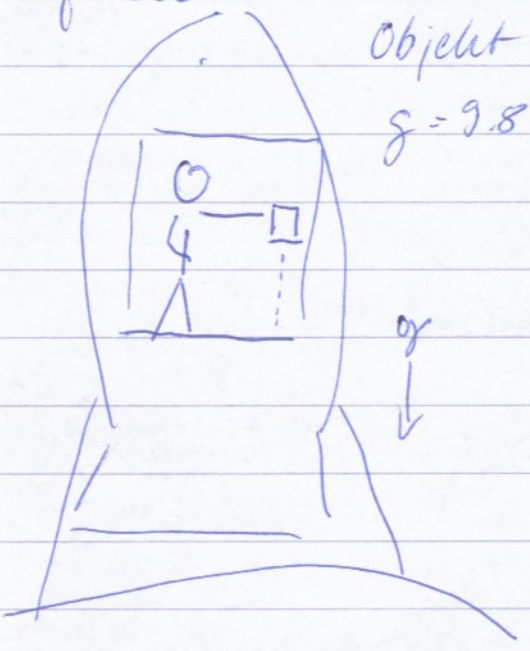
Illustration: a) Rakete in Ruhe auf der Erdoberfläche in einem uniformen Gravitationsfeld.



auf eine Masse m auf dem Boden wirkt Gewichtskraft $mg = w$

b) selbe Rakete in mitbewegtem Raum weit von allen Gravitationsfeldern; Rakete beschleunigt mit $a = g = 9.8\ m/s^2$. Nach 2. Newtonschen Gesetz wirkt Kraft $F = ma = mg$.

2 Experimente in diesen beiden Situationen a), b)
Experimentator lässt Objekt aus seiner Hand fallen

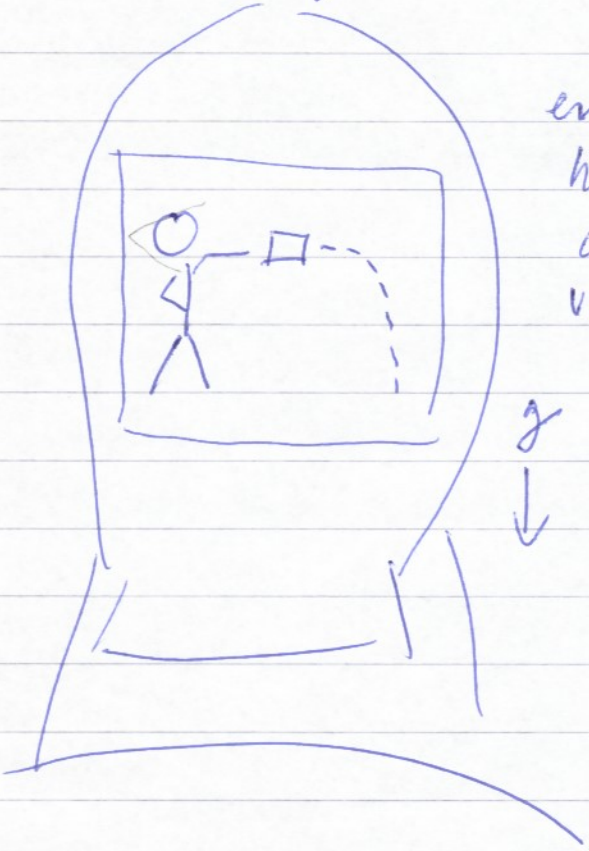


Objekt fällt und er könnte Beschleunigung $g = 9.8\ m/s^2$ messen

G lässt das selbe Objekt in mitbewegtem Raum in nach oben mit $a = g$ beschleunigt Rakete fallen. Nach seiner Beobachtung fällt es mit $a = g$ beschleunigt in Richtung Boden der Rakete

wie Sit. a)

derselbe Astronaut wirft Objekt aus seiner Sicht waagrecht und beobachtet die Bahn



er misst übliche Parabelbahn
horizontal gleichförmige Bewegung
mit Geschwindigkeit v_{x0}
vertikal gleichförmig beschleunigte
Bewegung nach unten mit
$v_y = gt$

er wiederholt das Experiment in Situation b)
jetzt wird er (mit dem Boden der Rakete) mit
a auf das Objekt zu beschleunigt. Innerhalb
seiner Kabine misst er die gleiche Flugbahn
(Parabel) wie auf der Erde.

Grundlage: Masse in Newtons 2. Gesetz m_i,
die 'träge Masse', ist gleich der Masse m_g,
auf die die Gravitationskraft wirkt, also
die 'schwere' oder 'gravitative Masse'

Experimentator in Raumstation (z.B. ISS) mit mitbewegtem Raum
lässt Objekt in seiner Hand los. Es bleibt unverändert an der selben Position. Experimentator auf
der Erde in einem Aufzug, in dem Seil gerissen.

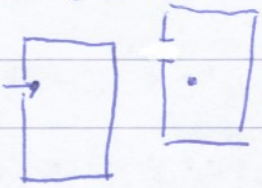
befindet sich im freien Fall. Auch er läßt ein Objekt in seiner Hand los. Es erscheint ihm unbewegt, bleibt auf gleicher Höhe seiner Hand.

Schlußfolgerung: ein frei fallendes Bezugssystem agiert als Inertialsystem (was in Ruhe ist bleibt in Ruhe wenn keine äußere Kraft wirkt) genauso wie die Raumstation. Beschleunigung durch Gravitation wegtransformiert durch Beschleunigung des Inertialsystems.
Äquivalenzprinzip erlaubt beschleunigtes Bezugssystem als äquivalent zu einem Inertialsystem in dem Gravitation existiert zu behandeln.

Weltlinie eines beschleunigten Teilchens in Raum-Zeit ist gekrümmt, also muß auch ein Teilchen in einem Gravitationsfeld sich auf einer gekrümmten Weltlinie bewegen. Masse, die Gravitationsfeld erzeugt muß Raum-Zeit krümmen ('warp')
Hier gibt es beobachtbare Konsequenzen!

Ablenkung von Licht im Gravitationsfeld

Lichtstrahl fällt durch kleines Fenster in schnell nach oben beschleunigten 'Aufzug' und wir vermessen seine Position wie er die Kabine durchquert



etc.

würde als Zeitsequenz gemessen.

Äquivalenzprinzip sagt in einem Gravitationsfeld sollte Licht ebenso von gerade Trajektorie abgelenkt werden. Gravitationsfeld der Sonne zu klein, um das zu beobachten. 1916 schlägt Einstein vor, daß Licht wenn es die Sonne passiert, sichtbar von seiner Bahn abgelenkt werden sollte.* kann man allerdings nur in einer Sonnenfinsternis beobachten

*Einsteins Existenz: Ablenkung um 1.75 Bogensekunden Messe Winkelabstand von zwei Sternen weiters und ganz nah in Winkel zur Sonne.
am 29 Mai 1919 war von der Südhalbkugel eine totale Sonnenfinsternis zu beobachten. Sir Arthur Eddington führt eine Expedition dort hin und misst anhand von Photos von Sternen ein Ergebnis, das Einsteins Vorhersage bestätigt. Das machte Schlagzeilen 'Licht ablenkt bestätigt' um die Ganze Welt und Einstein wurde berühmt. Später genaue Messungen von 2 Quasaren in Virgo Cluster anhand von Radiowellen. Da die Sonne in Radiofrequenzbereich sehr dunkel ist, muß man nicht auf Sonnenfinsternis warten, sondern nur auf Nähe zur Sonne warten. Am 8.10.1972 finden Messungen von Radiowellen dieser 2 Quasare eine Änderung in ihrer Winkelseparation um 1.73 Bogensekunden ← quantitative Bestätigung der allg. Relativitäts Theorie

→ Fig. 2-15/16

Licht hat keine Ruhemasse, aber bewegte Masse $mc^2 = E = pc$ spielt selbe Rolle

andere Observable: • Präzession des Perihels des Merkurs Gravitation (wegen Präsenz anderer Planeten) sagt 531 Bogensch. pro Jahrhundert, beobachtet 574 Effekt Allg. Rel. Theorie +43 Bogensekunden pro Jh.

• gravitative Rotverschiebung: Licht, das im Gravitationsfeld steigt (fällt) leistet Arbeit (gewinnt pot. Energie) → Änderungen der Energie → Änderung d. Frequenz → Uhren gehen in beschleunigten Bezugssystemen bzw in Abh. von der Schwerbeschleunigung langsam (Uhr im Gravfeld langsam als Uhr im feldfreien Raum) → Zeit zwischen Ticks ~~[illegible]~~, ~~[illegible]~~

Atomuhr beruht auf Oszillationen (Spektrallinien) durch Abwesenheit vom Gravitationsfeld wird Frequenz der Oszillation verlangsamt oder Wellenlänge größer

$$\nu_f = \nu_g \left(1 - \frac{gh}{c^2}\right) \qquad \lambda_f = \lambda_g \left(1 + \frac{gh}{c^2}\right)$$ Rotversch.

Messung 1960 Pound & Rebka, Messung von γ-Strahlen auf der Spitze des Turms von Harvard (22m hoch)

$\Delta\nu/\nu = 2{,}5 \cdot 10^{-15}$ nachgewiesen durch Mössbauer Effekt

• Raumkrümmung, Grodaten, kürzeste Verbindung zwischen 2 Punkten nicht mehr Gerade

(schwarze Löcher Gravitationslinsen

gekrümmte Raum-Zeit

escape velocity von der Erde $v_e = \sqrt{\frac{2GM_e}{R}}$

was müsste Radius der Erde sein, daß Lichtgeschwindigkeit gleich v_e?

$R_s = \frac{2GM_e}{c^2}$ Schwarzschild Radius

wenn Masse größer, kann Licht nicht mehr entweichen

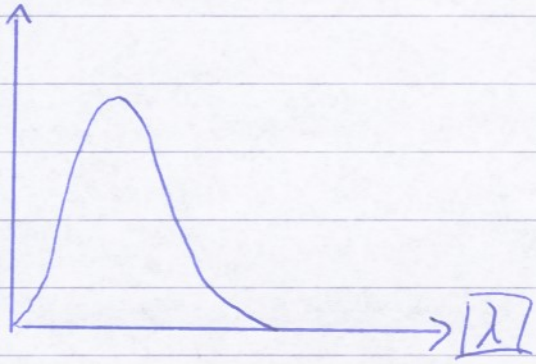
Lichtgeschwindigkeit erreicht für $R < R_s$ in einem schwarzen Loch wegen Raumkrümmung

3. Teilchenartige Eigenschaften elektromagnetischer Wellen – die Quantennatur von Licht

Wir werden sehen, daß sich unter bestimmten Umständen Licht bzw. elektromagnetische Wellen wie Teilchen verhalten. Insbesondere kann die Energie, anstatt über die gesamte Wellenfront verteilt zu sein, als diskretes Bündel oder "Quantum" abgegeben werden.
~ Synonymer Term für elektromagnetische Welle: "Photon" ← drückt Teilchencharakter aus.

3.1. Schwarzkörper- oder Hohlraumstrahlung

Betrachtung elektromagnetischer Wellen, die von heißen Objekten abgestrahlt werden. Wir wissen, daß alle Objekte strahlen und daß das Spektrum der Strahlung $R(\lambda)$ von der Temperatur des Objekts abhängt.
z.B. – wenn ein Metall erhitzt wird, fängt es bei einer bestimmten Temperatur an zu glühen
– Infrarotkameras können Objekte in kompletter Dunkelheit "sehen" auf Grund der von ihnen ausgehenden Strahlung



Wie sieht das Spektrum $R(\lambda)$ aus? Definiere $R(\lambda)$ als abgestrahlte Leistung pro Oberflächeneinheit des strahlenden Körpers und pro Wellenlängeneinheit

Glühen wir Metallfilament fängt es an bei ca 1300°C ≈ 1600K rot zu glühen, wenn die Temperatur erhöht wird geht Farbe nach gelb und schließlich nach weiß ⇒ Fig. 3-1

charakteristische Wellenlänge wird mit steigender Temperatur kürzer.

Um Verhalten quantitativ zu studieren, brauchen wir einen "idealen Strahler"

- soll keine störenden Oberflächeneffekte wie Reflektion haben, sondern alle Strahlung die auf ihn trifft absorbieren. Absorptionsvermögen $A(\lambda)$ = absorbierte Leistung / auffallende Leistung. $A(\lambda)=1$ für idealen Strahler für alle λ. Die übliche Referenz für einen nicht reflektierenden Körper ist der 'schwarze Körper' oder 'schwarze Strahler'. Der 'schwarze Strahler' sendet Wärmestrahlung aus, die für seine Temperatur charakteristisch ist.
- Im thermischen Gleichgewicht ist die absorbierte Leistung gleich der abgestrahlten Leistung; also wird Temperatur durch Strahlung nicht verändert.

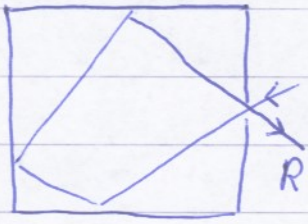
In Realität gibt es natürlich kein Material, das für alle Wellenlängen $A(\lambda)=1$ hat

typische Werte bei Raumtemp. & dafür charakt. Bereich von λ:

Schwarzlichtlampe	$A=0.96$	Messing poliert	0.03
Ruß	0.94	Graphit	0.7
Glas	0.9	Schnee bei 0°C	0.95 !
Messing (stumpf)	0.6	im IR; im sichtbaren sehr klein	

Hb: gute Absorber sind auch gute Strahler
enge Zusammenhang zwischen Absorptions-
vermögen und Emissivität

technische Realisierung um möglichst idealisierte Situation zu realisieren: "Hohlraumstrahler"



der Hohlraum (Kavität) absorbiert alle Strahlung die durch kleine Öffnung emittiert. Innerhalb der Kavität ist Strahlung im Gleichgewicht mit den Wänden der Kavität. Strahlungsspektrum, das durch Loch den Hohlraum verlässt, hängt nur von der Temperatur der Kavität ab.

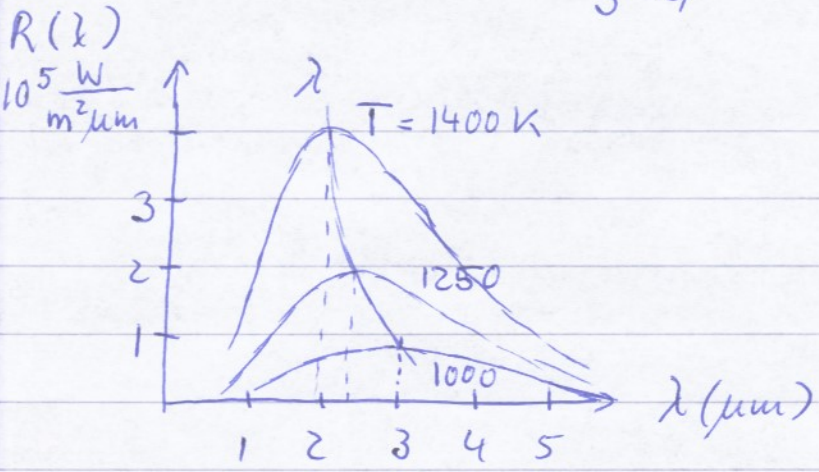
für schwarzen Strahler gilt

$$\frac{R(\lambda,T)}{A(\lambda,T)} = R^S(\lambda,T) \quad \text{mit } A^S(\lambda) = 1$$

Verhältnis von spektralem Emissions und Absorptionsvermögen ist unabhängig von Oberflächenbeschaffenheit und Material und ist gleich dem Emissionsvermögen eines schwarzen Strahlers, charakterisiert durch seine Temperatur

"Kirchhoff'sches Strahlungsgesetz" Gustav Robert Kirchhoff 1824-1887 (von 1854-1875 in Heidelberg im Phys. Inst. der Universität)

Eine genaue Vermessung von Spektren des schwarzen Körpers fand Ende des 19. Jh. durch Lummer und Pringsheim an der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt in Berlin statt.



Beobachtungen:

1. Das Spektrum ist bei einer wahrscheinlichsten Wellenlänge λ_p gepackt. λ_p fällt proportional zu $1/T$ bzw

$$\lambda_p \cdot T = \text{konst.} = 2.9 \cdot 10^{-3}\ m\,K$$

"Wien'sches Verschiebungsgesetz"

d.h. bei 1 K ist Spektrum bei $\lambda_p = 0.29$ cm gepackt
bei Raumtemp ($\simeq 300$ K) $\lambda_p = 10\,\mu m$ (IR)
Oberfläche der Sonne $T = 5800$ K $\lambda_p = 500$ nm (gelb-grün)
(Nobelpreis Wien 1914)

2. Fläche unter Kurve $R(\lambda)$ ist die totale abgestrahlte Leistung pro Oberflächeneinheit

$$R = \int_0^\infty R(\lambda)\,d\lambda \quad \text{in } W/m^2$$

abgestrahlte Leistung wächst mit der vierten Potenz der Temperatur

$$R = \sigma \cdot T^4 \text{ mit } \sigma = 5.67 \cdot 10^{-8}\ W/m^2 \cdot K^4$$

"Stefan - Boltzmann Gesetz"

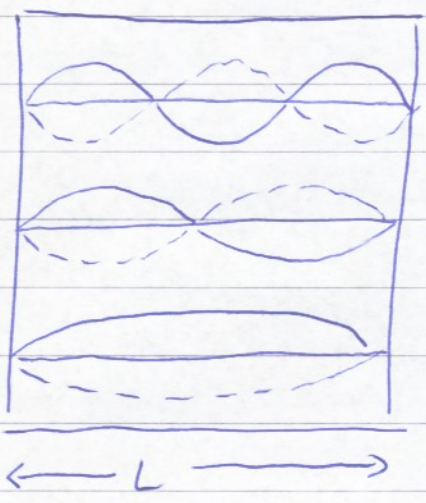
Vgl. von $1\,m^2$ Sonnenoberfläche abgestrahlte Leistung mit selber Fläche bei Raumtemp; Faktor $19^4 = 130\,000$
Nützlich zu wissen: Jahreseinstrahlung der Sonnen

Einstrahlung auf die Erde (Verschiedenes) "Solarkonstante" = 1.37 kW/m²

Berechnung des Spektrums:

Strahlung im Hohlraum im Gleichgewicht mit den Wänden. Bild der Wände: Atome oszillieren in einer für die Temp. charakteristischen Weise und emittieren dadurch Strahlung. Im Hohlraum bilden sich stehende elektromagnetische Wellen, die kontinuierlich absorbiert und wieder emittiert werden. Energiedichte der oszillierenden Atome in den Wänden gleich der Energiedichte der stehenden Wellen im Hohlraum. Gelegentlich entweicht eine elektromagnetische Welle durch kleines Loch und die dann gemessene Strahlung des Hohlraumes ist charakteristisch für Spektrum im Hohlraum und Energiedichte in den Wänden.

Wieviel stehende Wellen passen in den Hohlraum? Unendlich viele? Nein, kann man abzählen. zunächst 1-dimensional:



$u(x) = C \sin(k_x \cdot x)$ mit $k_x \cdot L = n_x \cdot \pi$

n_x ganzzahlig

und da Wellenzahl $k_x = \frac{2\pi}{\lambda}$

$\rightsquigarrow n_x = \frac{2L}{\lambda}$

in 3 Dimensionen:

$u(x,y,z) = C \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z \cdot z)$

$k_{x,y,z} = \frac{n_{x,y,z} \cdot \pi}{L}$ 3-dim stehende Welle

und $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2$

$$\left(\frac{n_x \pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L}\right)^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \quad | \cdot \left(\frac{L}{\pi}\right)^2$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{4L^2}{\lambda^2}$$

Kugel im Raum mit Achsen n_x, n_y, n_z

aber dieser Raum ist nicht kontinuierlich besetzt sondern nur an Punkten, an denen $n_{x,y,z}$ ganzzahlig z.B. (1,0,0) (0,1,1) (2,3,0) ....

$\Rightarrow$ Eq. 3.2

Anzahl der stehenden Wellen mit Wellenlänge zwischen λ und $\lambda + d\lambda$ ist gleich Volumen einer Kugelschale im Raum (n_x, n_y, n_z) zwischen n und $n + dn$

da $n_x, n_y, n_z > 0$ zählt nur ein Oktant

da eine elektromagnetische Welle 2 mögl. Polarisationen hat entspricht jeder Gitterpunkt 2 mögl. Zuständen.

Anzahl der möglichen stehenden Wellen

$$g(n)\,dn = 2 \cdot \frac{1}{8} 4\pi n^2 dn = \pi n^2 dn$$

mit $n^2 = 4L^2/\lambda^2$ und $dn/d\lambda = -\frac{2L}{\lambda^2}$ $\rightarrow$

$$n(\lambda)\,d\lambda = \frac{8\pi L^3}{\lambda^4} d\lambda$$

Anzahl : Volumen = Dichte der elektromagnetischen Wellen $\underbrace{g(\lambda)\,d\lambda}_{} = \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda$

Anzahl von Oszillatormoden pro Volumen und pro Wellenlängeneinheit für Wellenlänge λ

in Frequenzeinheiten: $g(\lambda)\,d\lambda = g(\nu)\,d\nu \Rightarrow g(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$

ab wir benötigen Energiedichte im Hohlraum pro Wellenlängenintervall:
Oszillator hat Energie ϵ je nach Amplitude groß oder klein und Wahrscheinlichkeit p verschiedene Amplituden gegeben durch Boltzmannfaktor

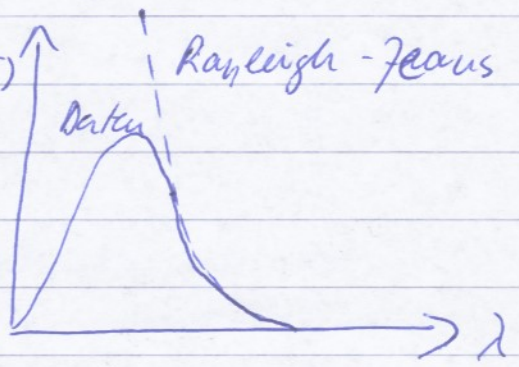
mittlere Energie $\langle \epsilon \rangle = \frac{\int \epsilon \exp(-\epsilon/kT)\,d\epsilon}{\int \exp(-\epsilon/kT)\,d\epsilon} = kT$

pro Flächeneinheit abgestrahlte Leistung:
für ebene Welle ist Energiefluß durch Poynting Vektor gegeben $S = c \cdot \varepsilon$
viele ebene Wellen in alle Richtungen ausgehend von Oberflächenelement, Energiefluß gemittelt über Winkel und nur in eine Richtung (z.B. $+x$) ist $\frac{1}{2}\langle \cos^2\vartheta \rangle c\varepsilon = \frac{1}{4} c \cdot \varepsilon$

damit erhält man als berechnetes Spektrum für strahlenden Körper

$$dR(\lambda, T) = \frac{2\pi c k T}{\lambda^4} d\lambda \quad \text{"Rayleigh-Jeans-Gesetz"}$$

gut für große Wellenlängen aber katastrophe für $\lambda \to 0$:
Divergenz
"UV-Katastrophe"



was ist falsch? für große λ ist Energie in der Tat kT, für kleine Wellenlängen nicht!

basierend auf dem Stefan-Boltzmann Gesetz leitet Wien hypothetisch ab daß $dR/d\lambda = R(\lambda)$ die Form $R(\lambda) = \frac{a \exp(-b/\lambda T)}{\lambda^5}$ haben muß. Dies bestätigt $R \propto T^4$ und Wien'sches Verschiebungsgesetz. Ab in der Form kleine Abweichungen vom Experiment.

Korrekte Lösung durch Max-Planck (1858 – 1947) im Jahr 1900: Planck stellt revolutionäre Hypothese auf, daß Energieverteilung von atomaren Oszillatoren nicht kontinuierlich ist, sondern nur ein Vielfaches eines bestimmten Quantums ist und daher auch nur in bestimmten Bündeln oder Quanten emittiert werden kann (bzw absorbiert).

$$\boxed{\Delta E = h\nu = hc/\lambda}$$ mit Plancksche Konstante h

$h = 6.55 \cdot 10^{-34}$ Js

oder $hc = 1240$ eV nm ← nur diese Zahl merken!

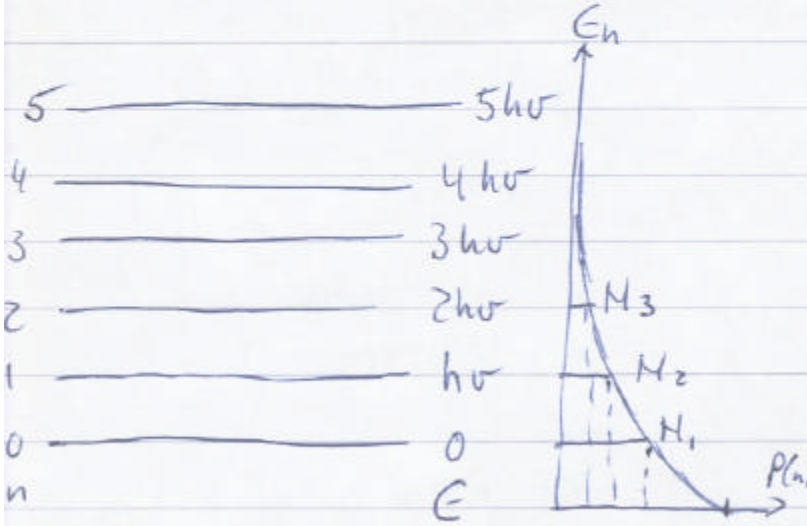
Der Oszillator ist in einem Zustand mit Energie $E_n = nh\nu$ wobei n ganzzahlig positiv

z.B. in Zustand $E_2 = 2h\nu$

kann entweder ① ein Photon der Energie $\Delta\epsilon = h\nu$ emittieren und damit seine Energie auf $\epsilon = (n-1)h\nu = \epsilon_{n-1}$ reduzieren oder ② ein Photon von Energie $\Delta\epsilon = h\nu$ absorbieren und dabei seine Energie auf $\epsilon = (n+1)h\nu = \epsilon_{n+1}$ erhöhen.

Energie d. absorbierten od. emittierten Photonen ist gleich dem Abstand zwischen den Energieniveaus des Oszillators $h\nu$, d.h. ist (auch) gequantelt.
→ alle stehenden Wellen im Hohlraum sind Photonen mit Energie $\epsilon = h\nu = hc/\lambda$ und relativistischem Impuls $pc = \sqrt{\epsilon^2 + (m_0c^2)^2} = hc/\lambda$
m_0 ist ein. Welle od. Photon

Für jede Wellenlänge / Frequenz gibt es im schwarzen Strahler einen Oszillator d. Frequenz ν.
Was ist mittlere Energie des Oszillators bei Temperatur T? Im Gleichgewicht ist das auch die mittlere Energie im Form von Strahlung im Hohlraum



Besetzungswahrscheinlichkeit des Niveaus mit Energie ϵ_n:
$P(n) \propto \exp(-\epsilon_n/kT) = \exp\left(-\frac{nh\nu}{kT}\right)$
wenn Grundzustand N_0 Teilchen hat ~

$N_1 = N_0 \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right)$

$N_2 = N_0 \exp\left(-\frac{2h\nu}{kT}\right)$ ...

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{E_{tot}}{M_{tot}} = \frac{\epsilon_0 M_0 + \epsilon_1 M_1 + \epsilon_2 M_2 + \dots}{M_0 + M_1 + M_2 + \dots} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n h\nu \exp\left(-\frac{n h\nu}{kT}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n h\nu}{kT}\right)}$$

substituiere $\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) \equiv x$

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{h\nu (0 + x + 2x^2 + 3x^3 + \dots)}{(1 + x + x^2 + \dots)} = h\nu x \frac{(1 + 2x + 3x^2 + \dots)}{(1 + x + x^2 + \dots)} \quad \leftarrow (1-x)^{-1}$$

$\swarrow (1-x)^{-2}$

$$= h\nu x \frac{1-x}{(1-x)^2} = h\nu \frac{1}{\frac{1}{x} - 1} = h\nu \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} = \frac{hc}{\lambda} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}$$

$$\boxed{R(\lambda, T) = \frac{c}{4} g(\lambda) \langle \epsilon(\lambda, T) \rangle = \frac{2\pi h c^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}}$$

Planck'sches Strahlungsgesetz Nobelpreis 1918

Expansion von $\exp(\dots)$ für kleine Argumente $\frac{hc}{\lambda kT}$
d.h. für große $\lambda \rightarrow$ Rayleigh-Jeans Formel

$\Rightarrow$ Fig. 3-3

Forderung diskreter Oszillator Energieniveaus ergibt korrektes Spektrum der Schwarzkörperstrahlung.
Alle Planck hatte keine Begründung / Rechtfertigung für Quantisierung der Energie. → 5 Jahre später d. Einstein

Exkursion 1: Kosmische Mikrowellenstrahlung. 1964 entdeckt von Arno Penzias und Robert Wilson: eine Antenne, die in willkürliche Himmelsrichtung zeigt, fängt immer Strahlung von ≈ 1 mm Wellenlänge auf. Vergleich mit in flüssiges Helium getauchte Antenne → Strahlung kommt von einer Quelle mit etwa 3K = Temp. Genaue Messungen des Strahlungsspektrums ≈ Schwarzkörperstrahlung entsprechend $T = 2.74$K; Überrest der Abkühlung nach dem Big Bang von ca 15 Milliarden Jahren (Nobelpreis Penzias/Wilson 1978)

NASA Satellitenmission COBE (Cosmic Background Explorer) 1989 gestartet zur Präzisionsmessung des gesamten Himmels bei mehreren Wellenlängen $\sim T = 2.735$ K
geringe Unterschiede auf Niveau $\Delta T/T = 10^{-4}$ durch Bewegung unseres Sonnensystems relativ zum Universum (Dopplerverschiebung). Nach Korrektur mit Daten von 1992 noch geringe Fluktuationen auf $\Delta T/T = 10^{-5}$ Niveau
⇨ Fig. 3-4
(Bild in galaktischen koord: Ebene d Milchstraße ↔ Äquator, Zentrum d Milchstraße in Mittelpunkt)
jetzt noch viel genauere Daten WMAP 2005
Temp-Fluktuationen auf kleiner Winkelskala ⇨ Fig 3-5
Ursprung: Dichtefluktuationen ganz junges Univ. → Schallwellen
Wo kommen Photonen her? Im frühen Universum werden thermische Photonen ständig absorbiert (Ionisation von Wasserstoff $\gamma + H \rightleftarrows p + e^-$).
Wenn Universum soweit abgekühlt, dass dieser Prozess nicht mehr möglich ist → neutralem Wasserstoff + Photonen, die entkoppeln
die Photonen, die wir heute sehen kommen von Zeitpunkt etwa 200 000 Jahre nach Urknall als Universum auf etwa 3000 K abgekühlt war → $\lambda_p = 1\,\mu m$ $E = \frac{hc}{\lambda} \approx 1.3$ eV (1/10 Ionisationsenergie Wasserstoff).
Heute ist Universum auf 2.74 K abgekühlt durch Expansion ↔ λ_p Größenordnung 1mm
strahlungsdominiertes Universum → Materiedom. U.

Kosmische Hintergrundstrahlung füllt das ganze Universum mit Dichte von $n_\gamma = 400/cm^3$
$\rightsquigarrow$ Energiedichte $\varepsilon = 2.5 \cdot 10^5 \, eV/m^3$ 1 pro every 10^9 Photonen
$\triangleq 0.01\%$ der Energiedichte des Universums

Exkursion 2: Treibhauseffekt $\Rightarrow$ Fig. 3-6

Sonnenstrahlung $\lambda_p^S = 500 nm$
Erd " $\lambda_p^E = 10 \mu m$
Atmosphäre wird nach oben kälter. Warum?
Resp Absorption von Licht / Photonen in Atmosphäre verstehen.

- Sauerstoff und Ozon absorbieren alles Licht mit $\lambda < 300 nm$, also das meiste UV Licht.
- Wasser absorbiert für $\lambda > 700 nm$

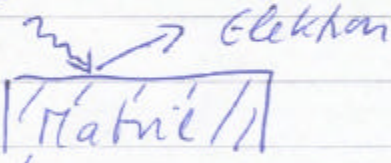
$\rightarrow$ da Peakintensität der Sonne dazwischen (500nm), ist Atmosphäre transparent für größten Teil der Sonnenstrahlung "offenes Fenster für Sonnenlicht"

- Strahlung der Erde im mittleren und weiten IR wo Atmosphäre stark absorbiert. $\rightsquigarrow$ Atmosphäre wird geheizt durch Absorption der IR Strahlung der Erde (also unten wärmer)
  Konvektion verteilt thermische Energie in Atmosphäre

"Treibhauseffekt": Heizen der Atmosphäre der Erde durch Erdstrahlung. Idee hinter Namen: Treibhausgase lassen Sonnenlicht ungehindert ein Abstrahlung von Pflanzen und Erde im IR wo Glas opak.
unsere Temp durch delikates Gleichgewicht Ein- und Abstrahlung. CO_2 Problematik, 'global warming'

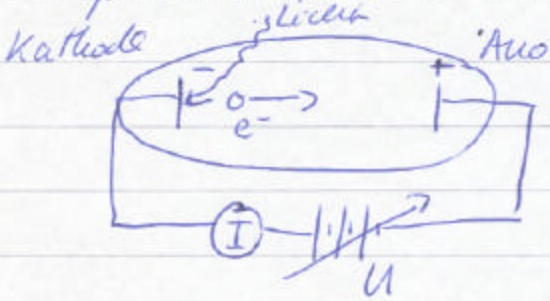
3.2. Photoelektrischer Effekt

Licht, das auf ein Material (z.B. Metall) fällt, kann Elektronen herausschlagen. Entdeckt von Heinrich Hertz 1887. Nachweis, daß es sich um Elektronen handelt: Thompson



Demonstration:
Kohlenstofflampe & Entladung
Elektrometer — neg. geladen

experimenteller Aufbau, um Effekt zu studieren:

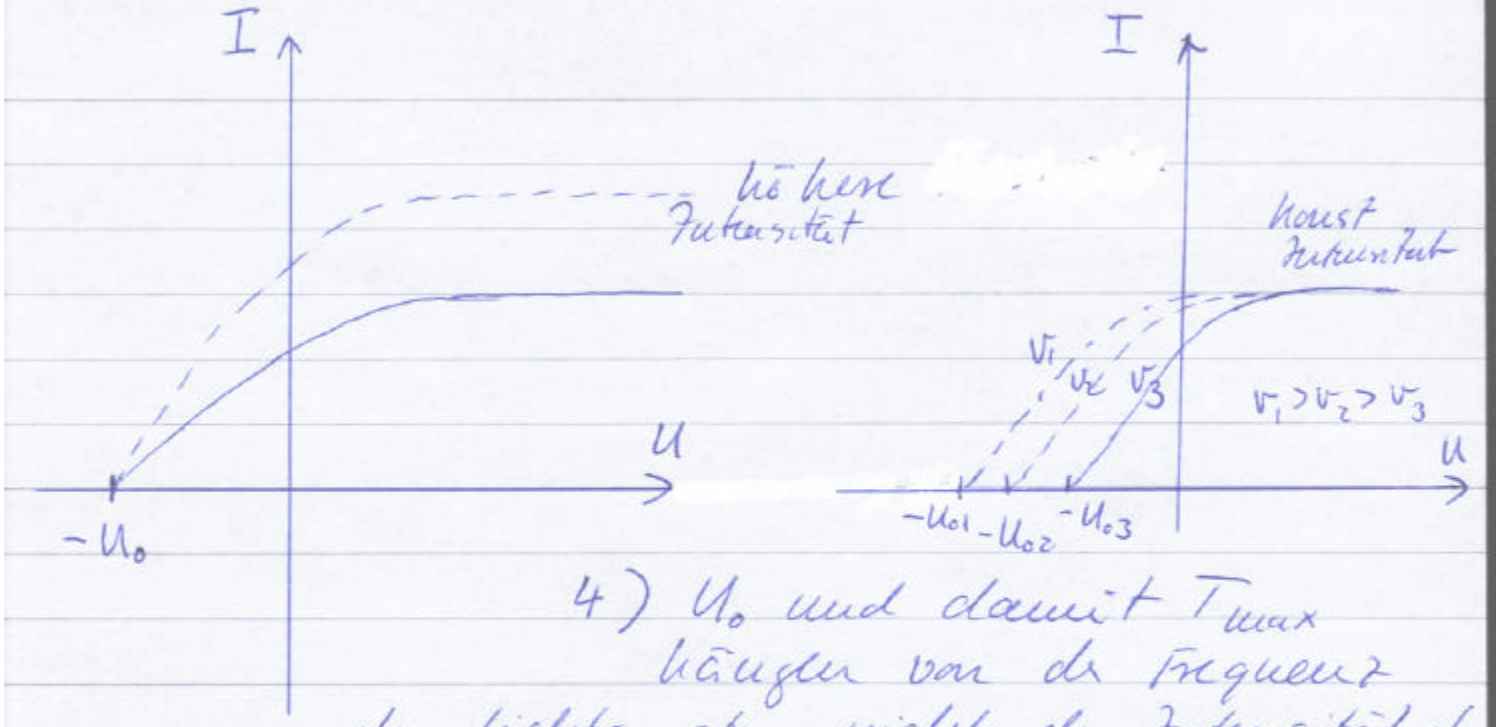


Philip Lenard 1902
(Nobelpreis 1905, kurz danach in Heidelberg bis 1947)

⇨ Fig. 3-7

Messungen ergeben:

1) Strom $I \propto$ einfallende Photonenintensität
2) mit wachsende Spannung U saturiert Strom (alle herausgeschlagenen Elektronen werden gesammelt)
3) Bestimmung der kinetischen Energie T der Elektronen durch Umkehrung des Potentials → Abbremsung ($-U$); nur Elektronen mit $T \geq eU$ tragen zum Strom bei. Strom fällt je negativer U wird und verschwindet bei Wert $-U_0$. → es gibt eine maximale kinetische Energie d. Elektronen, so daß $T_{max} = eU_0$



4) U_0 und damit T_{max} hängen von der Frequenz des Lichts ab nicht der Intensität ob höchst merkwürdig ?!
bei klassischer Betrachtung: höhere Intensität (Licht heller) größere Amplitude des E- und B-Felds der Welle ⇝ mehr Energie wird pro Zeiteinheit übertragen, U_0 sollte wachsen.
5) Frequenzabhängigkeit: für jedes Material gibt es eine Schwellenfrequenz, unterhalb der kein Strom fließt. ? mit genug Intensität sollte klassisch immer Strom fließen

weiterhin kurios: Zeit zwischen Ankunft von Licht und Emission von Elektronen beliebig kurz (< 3ns) die Wellenfront übertrug Energie sollte zu lange Dauer bis Elektron emittiert (Sch. o. Lange)

Erklärung durch A. Einstein (1905 vor spez. Rel. theorie, Nobelpreis 1921): Plancks Idee der Quantelung bezieht sich nicht nur auf Oszillatoren, sondern ist

generelle Eigenschaft elektromagnetischer Wellen. Eine em. Welle der Frequenz ν und Wellenlänge λ hat Energie $\boxed{E = h\nu = hc/\lambda}$. Da em. Welle keine Ruhemasse hat, gilt auch $pc = E$. Welle verhält sich wie ein Teilchen mit Ruhemasse 0 "Photon".

Photon trifft Atom; wenn seine Energie $E = h\nu$ größer als Ionisationspotential, dann gibt Photon alle Energie an das Atom ab, das dann ionisiert wird. $\boxed{T_{max} = h\nu - W}$; W ist minimale Energie, um ein Elektron aus dem Atom zu entfernen ($\sim T_{max}$, da es fest gebundene Elektronen gibt mit $BE > W$).
W ist Materialeigenschaft, z.B. $W_{Na} = 2.3\,eV$, $W_{Cs} = 1.8\,eV$, $W_{Pt} = 6.4\,eV$

Genaue Messung von T_{max} für verschiedene Frequenzen (Millikan, 1916; Nobelpreis 1923)

Steigung ist Plancksche Konstante h
Achsenabschnitt $-W$.
kritische Frequenz ν_c:
$h\nu_c = W \sim T_{max} = 0$; für $\nu < \nu_c$ kein Photoeffekt möglich

→ Figure Millikan 3-8

Beispiel: Licht mit Wellenlänge $\lambda = 400\,nm$ trifft 'Photokathode'. Photostrom verschwindet bei Gegen-

Spannung $U_0 = 2.5\,V \approx T_{max} = 2.5\,eV$

Photon-Energie $E = h\nu = hc/\lambda$

$= \frac{1240\,eV\,nm}{400\,nm} = 3.1\,eV$

Austrittsarbeit $W = h\nu - T_{max} = (3.1 - 2.5)\,eV = 0.6\,eV$

Kritische Frequenz, bei der Photoeffekt verschwindet

$h\nu_c = 0.6\,eV$ bzw $\nu_c = \frac{0.6\,eV}{4.1 \cdot 10^{-15}\,eVs} = 1.5 \cdot 10^{14}\,Hz$

Anwendung Photoeffekt: Photomultiplier

Prinzip ⇒ Fig 3-9

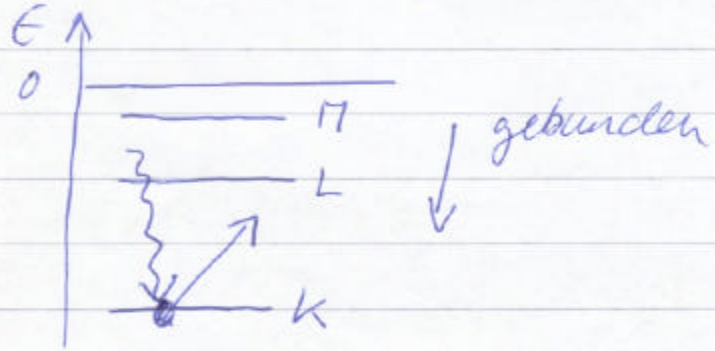
Guter Glas oder Quarzfenster Kathode aus Material mit möglichst geringer Austrittsarbeit (z.B. Bialkalikathode). Mit gewisser Wahrscheinlichkeit wird Photon ein Elektron herausschlagen ("Quanteneffizienz", typ. 20-30 %.) Elektron wird auf weitere Elektrode (positives Potential) beschleunigt, die sogenannte 'Dynode' aus der es durch seine kinetische Energie 1-2,3... weitere Elektronen herausschlägt, 8-12 solcher Dynoden hintereinander: aus einem auftreffenden Photoelektron werden z.B. $3^{12} = 5 \cdot 10^5$ Elektronen → kurzer Stromimpuls, über Widerstand Spannungssignal (typ im mV-Bereich)

ähnlich: in Halbleiter wird Photoeffekt genutzt in Solarzelle, Photodiode, CCD-Kamera

Photoeffekt: Betrachtung auf atomarer Ebene

Photon wird vom Atom absorbiert, in dem es seine ganze Energie auf ein gebundenes

Elektron überhägt (falls zuviel Energie die Bindungsenergie des Elektrons übersteigt)
es gibt verschiedene Elektronbindungszustände im Atom ("Schalen") z.B.



	$^{208}_{82}Pb$	$^{40}_{18}Ar$
E_K	-88 keV	-3.2 keV
E_L	-15.9, -15.2, -13 keV	$= (-0.3\,keV)$
E_M	$\simeq (-3.9\,eV)$ 5 Werte	$\simeq (-0.02\,keV)$

Folge des Photoeffekts: Loch in einer innerer Schale wird aufgefüllt, 2 Effekte

1) Elektron aus höherer (weniger gebundener) Schale fällt herunt, Übergangsenergie wird in Form charakteristischer Strahlung (Röntgenstrahlung) abgegeben "X-ray"

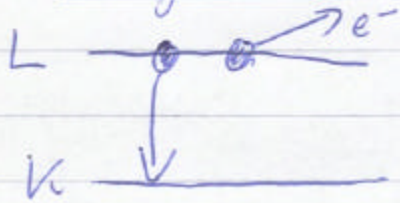
K-Röntgenquant $h\nu = E_L - E_K$

z.B. Pb $88 - 15.9 = 72.1\,eV$

$88 - 15.2 \quad 72.8\,eV$

$88 - 13.0 \quad 75.0\,eV$

2) Übergangsenergie wird auf ein weiteres Elektron übertragen, daß damit emittiert wird "Auger-Elektron" also strahlungslos

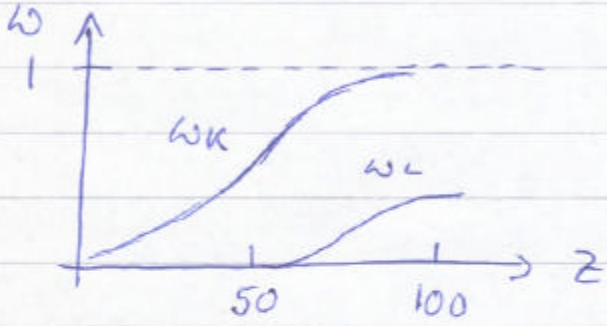


Energie des Auger-Elektrons

$E_{Auger} = 2E_L - E_K$

Konkurrenz zwischen 1) und 2) Fluoreszenz-

ausbeute $\omega = \frac{N_x}{N_x + N_{Auger}}$



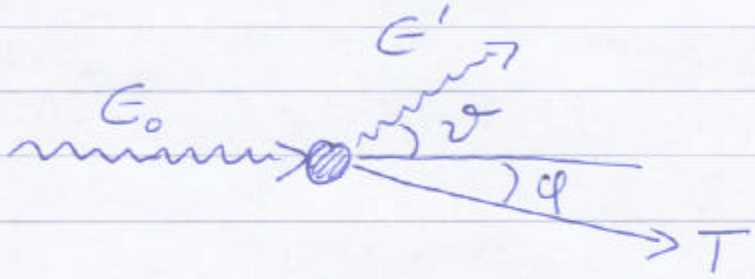
außer bei K-Schale in schweren Atomen dominiert Auger-el. Emission

3.3. Comptonstreuung - Comptoneffekt

Neben Prozess, in dem Photon absorbiert wird gibt es Streuprozesse, in denen Photon mit Elektron oder ganzem Atom wechselwirkt, seine Richtung ändert, ab seine Energie behält oder nur teilweise verliert. Werden zunehmend wichtig insbesondere wenn $E = h\nu \gg W$

in diesem Fall Streuung des Photons an quasi-freiem Elektron. Analog elastischen Streuung von 2 Billiardkugeln
Erste Messung: Arthur Compton 1922 (Nobelpreis 1927) $\gamma + e^- \rightarrow \gamma + e^-$
betrachte Streuung im Laborsystem mit Annahme, daß Elektron anfangs in Ruhe

(MB: falls man kin. Energie des anfänglichen Elektrons nicht vernachlässigen will, gilt diese Betrachtung im Ruhesystem des Elektrons und alle Grössen können ins Laborsystem transformiert werden, siehe kap. 2)



einfallendes Photon:
$E_0 = h\nu_0 = \frac{hc}{\lambda_0} = p_0 c$

gestreutes Photon $E' = h\nu' = \frac{hc}{\lambda'} = p'c$

Elektron anfangs: $T_i = 0$ $p_i c = 0$ $E_i = m_0 c^2$
Elektron nach Streuung: T, pc, $E = T + m_0 c^2$

1) Energieerhaltung $E_0 = E' + T$
$T = E_0 - E'$ (1)

Impuls des gestreuten Elektrons pc:
$(T + m_0 c^2)^2 = (pc)^2 + (m_0 c^2)^2$
$T^2 + 2 T m_0 c^2 = (pc)^2$ / setze (1) ein
und benutze $E = hc/\lambda$

$$\left(\frac{hc}{\lambda_0}\right)^2 - \frac{2(hc)^2}{\lambda_0 \lambda'} + \left(\frac{hc}{\lambda'}\right)^2 + 2 m_0 c^2 \left(\frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda'}\right) = (pc)^2 \quad (2)$$

2) Impulserhaltung
a) in Richtung des einfallenden Photons
$p_0 c = p'c \cos\vartheta + pc \cos\varphi$
$pc \cos\varphi = \frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda'} \cos\vartheta$ (3)

b) senkrecht zur Einfallsrichtung des Photons
$p'c \sin\vartheta = pc \sin\varphi$
$\frac{hc}{\lambda'} \sin\vartheta = pc \sin\varphi$ (4)

Quadriere (3) und (4) und addiere unter Benutzung von $\sin^2\vartheta + \cos^2\vartheta = 1$

$$(pc)^2 = \left(\frac{hc}{\lambda_0}\right)^2 - \frac{2(hc)^2}{\lambda_0\lambda'}\cos\vartheta + \left(\frac{hc}{\lambda'}\right)^2 \quad (5)$$

muß gleich (2) sein $\rightsquigarrow$

$$m_0c^2\left(\frac{hc}{\lambda_0} - \frac{hc}{\lambda'}\right) = \frac{(hc)^2}{\lambda_0\lambda'}(1-\cos\vartheta) \;/\cdot \frac{\lambda_0\lambda'}{(hc)^2}$$

$$\frac{m_0c^2}{hc}(\lambda' - \lambda_0) = 1-\cos\vartheta \quad \text{oder}$$

$$\boxed{\lambda' - \lambda_0 = \frac{hc}{m_0c^2}(1-\cos\vartheta)}$$

Comptonstreuformel; verbindet λ_0, λ' und ϑ

die Größe $hc/m_0c^2 = \frac{1240\,\text{eV nm}}{5.1\cdot10^5\,\text{eV}} = 2.4\,\text{pm}$

nennt man die

"Comptonwellenlänge" des Elektrons

sehr Skala bei welchen Lichtwellenlängen man Comptoneffekt beobachten kann:

$\Delta\lambda/\lambda$ ist von Größenordnung der Comptonwellenlänge / λ und darf nicht verschwindend klein sein. Für Röntgenstrahlen $\lambda = 0.1 - 0.01$ nm $\rightsquigarrow$ $\Delta\lambda/\lambda$ Größenordnung % $\rightarrow$ gut meßbar

$\Rightarrow$ Figs 3-10,11

$\vartheta = 0°$ $\lambda' - \lambda_0 = 0$ keine Streuung

$\vartheta = 90°$ $\lambda' - \lambda_0 = 2.4\,\text{pm}$

$\vartheta = 180°$ $\lambda' - \lambda_0 = 4.8\,\text{pm}$ max. Verschiebung

max. Energieverlust Photon

Comptonstreuformel durch Energie des Photons ausgedrückt

$$\boxed{\frac{1}{E_0} - \frac{1}{E'} = \frac{1}{m_0c^2}(1-\cos\vartheta)}$$

oder

$$E' = \frac{E_0 m_0 c^2}{E_0(1-\cos\vartheta) + m_0 c^2}$$

für rückgestreutes Photon ($\vartheta = 180°$)

$$E' = \frac{E_0}{\frac{E_0}{m_0 c^2/2} + 1} \quad \text{und für } E_0 \gg \frac{m_0 c^2}{2} \rightsquigarrow$$

$$E' = \frac{m_0 c^2}{2}$$ "Comptonkante" im gemess. Spektrum

Beispiel: Photon mit Energie $E_0 = 4 m_0 c^2 \simeq 2$ MeV streut an Elektron in Ruhe. Photon verliert 2/3 seiner Energie in der Streuung. ϑ? T? φ?

$E_0 = 4 m_0 c^2 \quad E' = 1.33 m_0 c^2$

$\cos\vartheta = 1 - m_0 c^2 \left(\frac{1}{E'} - \frac{1}{E_0}\right) = 1 - \left(\frac{1}{1.33} - \frac{1}{4}\right) = 0.50$

$\vartheta = 60°$

$T = (4 - 1.33) m_0 c^2 = 1.36$ MeV ← unmittelbar relativist.

$E = (4 - 1.33 + 1.0) m_0 c^2 = 1.87$ MeV

$pc = \sqrt{E^2 - (m_0 c^2)^2} = m_0 c^2 \sqrt{(4 - 1.33 + 1.0)^2 - 1.0^2}$

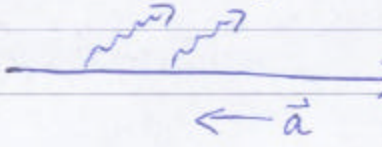
$= 1.80$ MeV

$p' \sin\vartheta = p \sin\varphi \rightsquigarrow \sin\varphi = \frac{p'}{p} \sin\vartheta = \frac{0.68}{1.80} \sin 60° = 0.33$

$\varphi = 19.1°$

3.4. Bremsstrahlung und Paarbildung

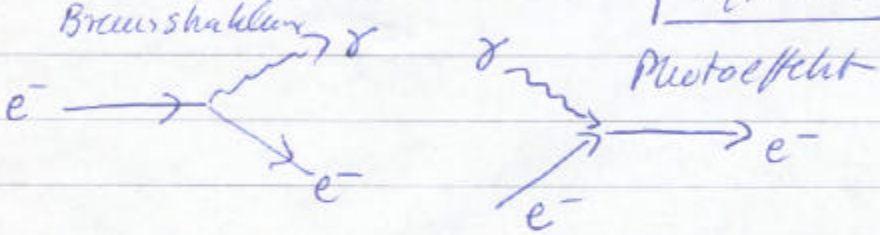
Ein beschleunigtes oder abbremsendes (negativ beschleunigtes) geladenes Teilchen emittiert em. Strahlung (Photonen)



Energieverteilung der Strahlung ist kontinuierlich, maximal wird die gesamte kin. Energie des geladenen Teilchens (Elektrons) als ein einziges Photon abgestrahlt mit minimaler Wellenlänge

$$T_e = \frac{hc}{\lambda_{min}} = h\nu_{max}$$

Umkehr des Photoelektr. Effekts



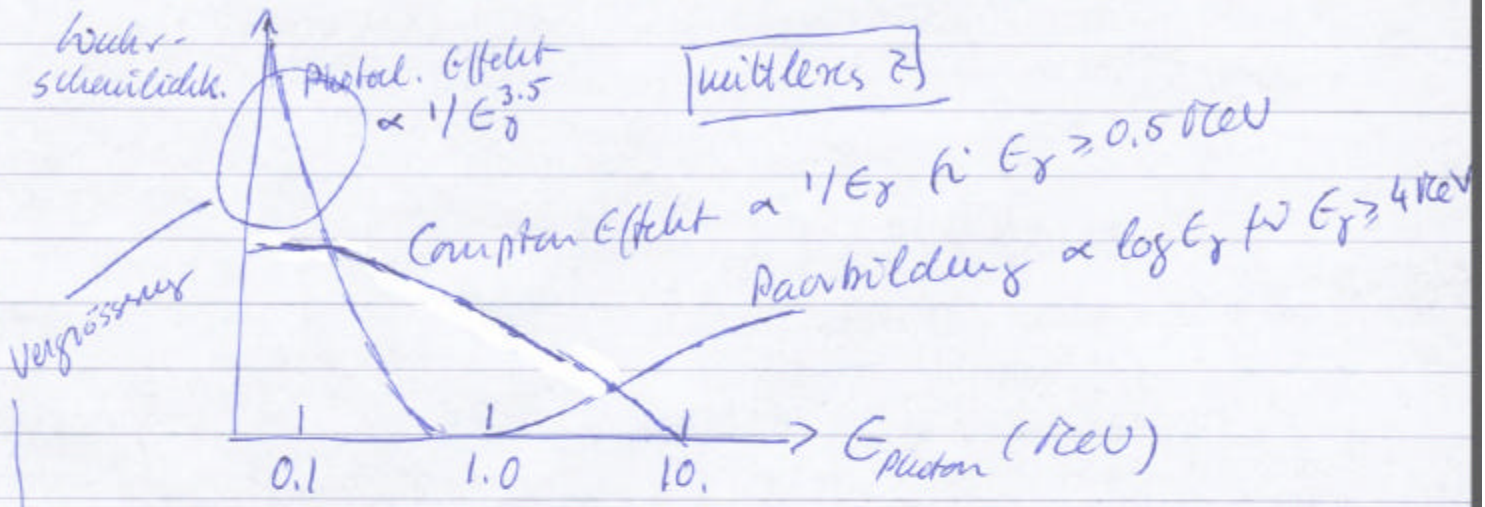
Photon wird emittiert — Photon wird absorbiert

beide können nicht mit 'freien' Elektronen stattfinden; benötigt drittes Teilchen, um gleichzeitig Energie und Impuls zu erhalten. Also keine Bremsstrahlung im Vakuum.

Wenn Photonenergie $E \geq 2m_0c^2 = 1.02$ MeV, kann Photon in ein Paar von Elektron und Positron annihilieren ($\gamma \rightarrow e^+e^-$) wieder Energie und Impuls nur erhalten, wenn Partner (z.B. Atomkern) einen Impuls aufnimmt. → keine Paarbildung im Vakuum

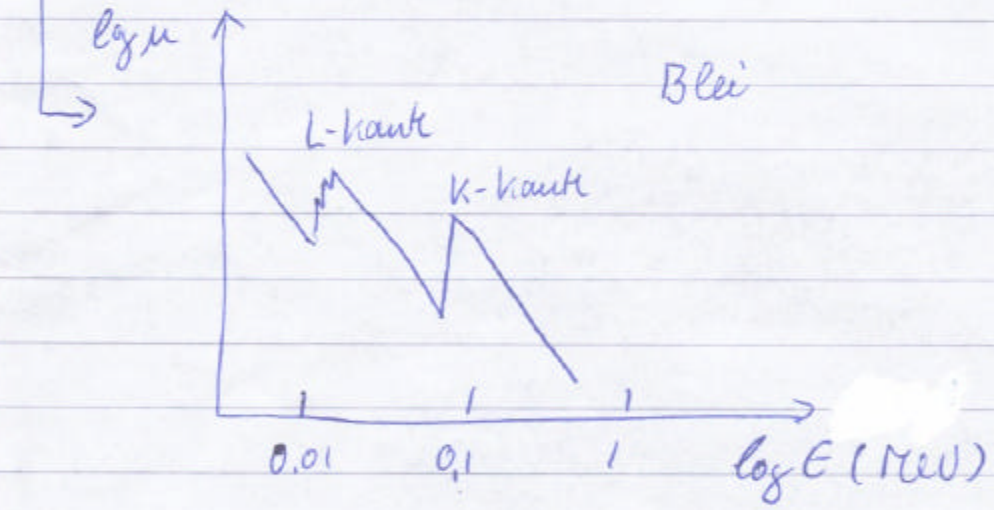
inverser Prozess: $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$ von je 0.51 MeV
"Elektron-Positron Annihilation"

Energieabhängigkeit der Wechselwirkung von Photonen mit Materie



quantifiziert durch Photoabsorptionskoeffizient

$I = I_0 \exp(-\mu x)$ $\quad \mu = \mu_{PE} + \mu_C + \mu_P$ ('/Länge)



4. Welleneharakter von Teilchen

4.1. Allgemeine Eigenschaften von Wellen

Gibt es 3 fundamentale Konzepte: Teilchen, Wellen, Felder

Welle: Ausbreitung eines "Erregungszustands" durch den Raum

1) mechanische Wellen: Störung in Medium
   - 1 dim Seilwellen
   - 2 dim Wasserwellen
   - 3 dim Schallwellen
   - Seismische Wellen
2) elektromagnetische Wellen: kein Medium, osz. elektrisches und magnetisches Feld
3) Quantenmechanik: Teilchenwellen oder Materiewellen

Propagation einer Welle: die 'Störung' des Mediums wandert, nicht das Medium

Störung besitzt Energie → Welle hat Energie $\propto$ Ampl^2

Energietransport einer Welle

elektromagnetische $E = E_m \sin(kx - \omega t)$

ebene Welle: $B = B_m \sin(kx - \omega t)$

$\oint \vec{E} \cdot d\vec{A} = -\frac{d\Phi_B}{dt}$ Faraday'sches Gesetz

$\oint \vec{B} \cdot d\vec{s} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d\Phi_E}{dt}$ Maxwell'sches Gesetz

$E_m / B_m = c$ $\quad c = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}}$ Geschwindigkeit der em. Welle

Rate des Energietransports pro Fläche

$$\boxed{\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B}} \quad [W/m^2]$$ Poynting Vektor

John Henry Poynting 1852-1914

für ebene em. Welle:

$$S = \frac{1}{\mu_0} EB = \frac{1}{c\mu_0} E^2$$

Intensität der Welle = mittlere Rate des Energietransports

$$I = \bar{S} = \frac{1}{c\mu_0} E_m^2 \underbrace{\overline{\sin^2(kx - \omega t)}}_{1/2} = \frac{1}{c\mu_0} \frac{E_m^2}{2}$$

$$= \frac{1}{c\mu_0} E_{rms}^2$$

elektrische Energiedichte $\varepsilon_E = \frac{1}{2} \varepsilon_0 E^2$

magnetische " $\varepsilon_B = \frac{1}{2\mu_0} B^2$

für ebene Welle: Energiedichte $\varepsilon = \varepsilon_E + \varepsilon_B = \frac{E^2}{c^2 \mu_0}$

oder $c(\varepsilon_E + \varepsilon_B) = \frac{E^2}{c\mu_0} = S$

(wie bei Schwarzkörperstr. benutzt)

Wir unterscheiden generell:

- longitudinale Wellen: Oszillation in Ausbreitungsrichtung, z.B. Schallwellen ↔ lokale Druckschwankungen
- transversale Wellen: Wasserwellen
  Schall in Festkörpern (also seismische Wellen)
  elektromagnetische Wellen

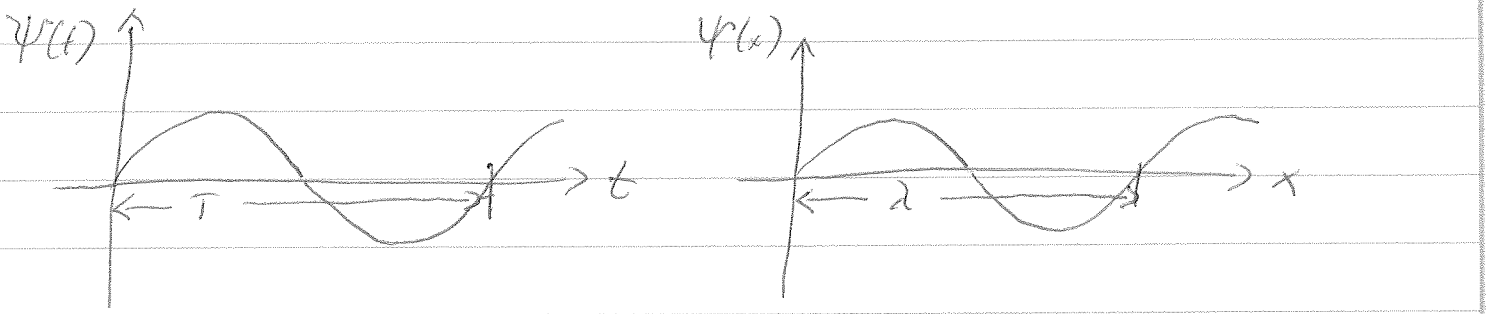
Charakterisierung einer Welle: Amplitude als Funktion von Ort und Zeit, die Wellenfunktion

einfachster Fall: ebene Welle in x-Richtung

$\Psi(x,t) = \Psi_0 \sin(kx - \omega t)$ Ψ_0 = Amplitude

x-Abh. der Amplitude charakterisiert durch Wellenzahl k oder Wellenlänge λ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

zeitl. Abh. der Amplitude charakterisiert durch Frequenz $\nu = 1/T$ bzw Kreisfrequenz $\omega = 2\pi\nu = 2\pi/T$



generell gibt es noch eine Phase, die durch Randbedingungen festgelegt wird. Also z.B. zu Zeit $t=0$ sei am Ort $x=0$ die Amplitude gleich 0 (siehe oben)

Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle

Wie schnell bewegt sich Wellenbild mit t?

d.h. wie schnell wandern Punkte gleicher Phase?

$kx - \omega t = \text{konst}$ $\quad x = \frac{\text{konst}}{k} + \frac{\omega}{k} t$

$dx/dt = \boxed{v_{Phase} = \frac{\omega}{k}} = \lambda \cdot \nu = \lambda / T$

$\Psi = \Psi_0 \sin k(x - v_{Ph} t)$ -: Welle läuft nach rechts, d.h. in pos. x-Richtung

+: Welle läuft in neg. x-Richtung

Superpositionsprinzip: Amplituden von Wellen addieren sich z.B. Seilwellen, Wasserwellen (Bug welle plus andere Wellen) ..., gilt solange linearer Kraftgesetz gültig (kleine Amplituden)

spezielles Superpositionsbeispiel: stehende Welle, ist Superposition von rechts- und linkslaufender Welle gleicher Frequenz und Wellenlänge

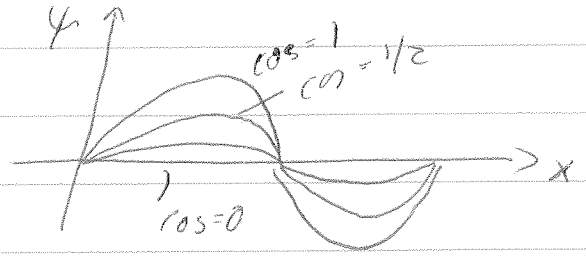
$\Psi(x,t) = \Psi_0 (\sin(kx - \omega t) + \sin(kx + \omega t))$

$= \Psi_0 (\sin kx \cos\omega t - \cos kx \sin\omega t + \sin kx \cos\omega t + \cos kx \sin\omega t)$

$= 2\Psi_0 \sin kx \cos\omega t$

$\Psi_{max}(x) = 2\Psi_0 \sin kx$ ortsfeste Bäuche & Knoten

z.B. Schwingende Seite



Wellengleichung: die Fähigkeit eines Mediums zu harmonischen Wellen ist verknüpft mit einer Differentialgleichung für die Amplitude der Störung von der Form

$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ in 1 Dimension

bzw $v^2 \left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)$ in 3 Dimensionen

$= v^2 \Delta\Psi$ Laplace Operator $\Delta = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}$

↳ Phasengeschw.

eine Klasse von Lösungen $\Psi(x,t) = f(x - vt) + g(x + vt)$

mit beliebigen f, g

linear Wellengleichung → Superposition

ebene Welle in 3 Dimensionen

$\Psi(\vec{r},t) = \Psi_0 \cos(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)$

↳ Wellenvektor $\parallel \vec{v}$

Kugelwelle mit Zentrum bei $\vec{r}=0$

$\Psi(\vec{r},t) = \frac{\Psi_0}{r}\cos(kr-\omega t)$ d.h. Wellenfronten sind Kugeln

↳ $\vec{k}\parallel\vec{r}$

wegen Energieerhaltung

Wellengleichung für elektromagnetische Wellen:

Maxwell Gleichungen im Vakuum $\vec{\nabla}\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$ ← Vakuum: $\rho = 0$, $j = 0$

$=0$

$\vec{\nabla}\vec{B} = 0$

$\vec{\nabla}\times\vec{E} = -\frac{d\vec{B}}{dt}$

$\vec{\nabla}\times\vec{B} = \mu_0\left(j + \varepsilon_0\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}\right)$

$\vec{\nabla}\times(\vec{\nabla}\times\vec{E}) = -\vec{\nabla}\times\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$ $\quad a\times(b\times c) = b(ac) - c(ab)$

$\vec{\nabla}(\vec{\nabla}\vec{E}) - (\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla})\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\times\vec{B}$

$-\Delta\vec{E} = -\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}$

bzw $\boxed{\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = \frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\Delta\vec{E}}$

und analog $\boxed{\frac{\partial^2\vec{B}}{\partial t^2} = \frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\Delta\vec{B}}$

Typische Wellenphänomene:

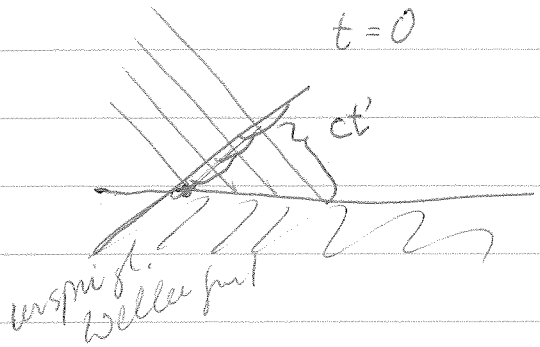
Reflektion und Brechung (Refraktion) ↔ an Trennflächen

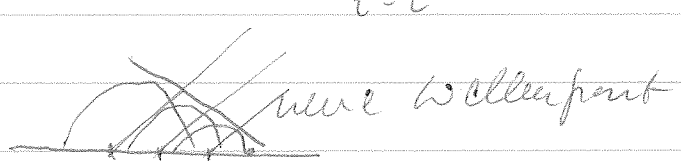
Dispersion (wenn k von ω abhängt, Dispersionsrelation $\omega(k)$)

Beugung (Diffraktion) und Interferenz ↔ an Hindernissen

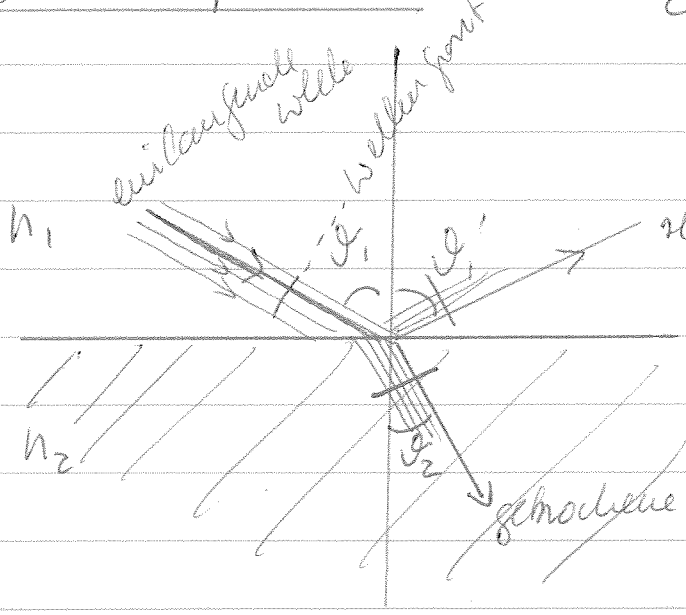
Huygenssches Prinzip (in der Version von Fresnel):
jeder Punkt einer Wellenfront (Ort gleicher Phase) kann als Ausgangspunkt einer Kugelwelle betrachtet werden. Die Wellenamplitude zu einem späteren Zeitpunkt erhält man durch Superposition aller dieser Kugelwellen.
vereinfacht: Einhüllende der Kugelwellen → neue Wellenfront

Reflektion $\beta_E = \beta_A$ wenn Welle nicht in Medium eindringen kann (z. B. Metalle)





an Grenze zwischen Medien mit unterschiedlichen Brechungsindex $n = \frac{c}{c_{medium}}$



$\vartheta_1 = \vartheta_1'$ Reflektion

Brechung:
$n_1 \sin\vartheta_1 = n_2 \sin\vartheta_2$
(Snellius)

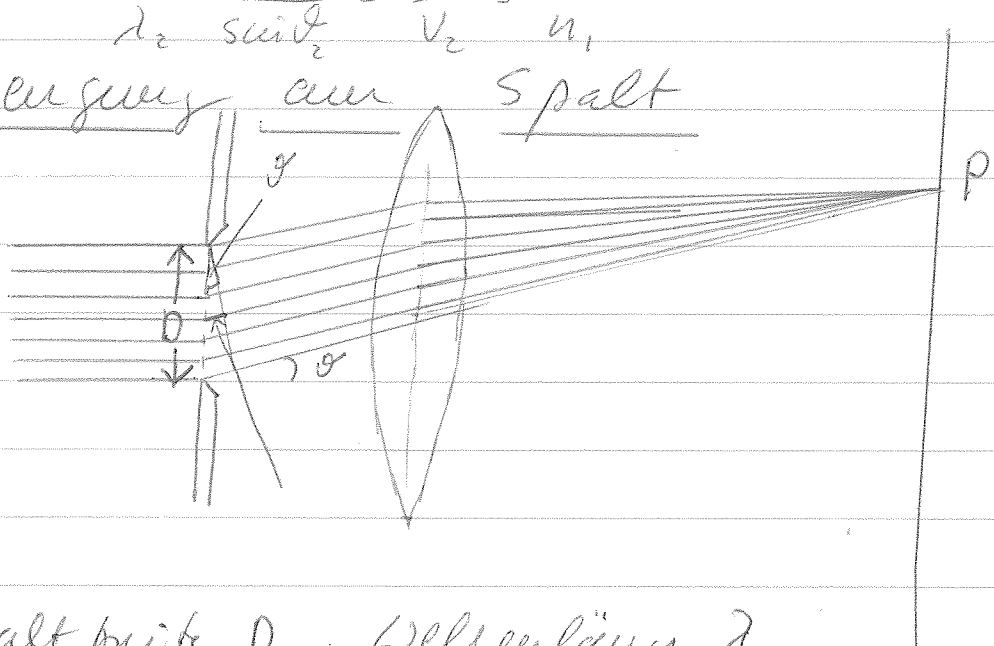
nur möglich wenn $\sin\vartheta_2 = \frac{n_1}{n_2}\sin\vartheta_1 < 1$

sonst Totalreflektion

erklärt durch Huygens (1678): Überlagerung (Interferenz) von Wellen, so daß $\lambda_1 / v_1 = \lambda_2 / v_2$

und $\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{\sin\vartheta_1}{\sin\vartheta_2} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1}$

Beugung am Spalt



Spaltbreite D, Wellenlänge λ

Maxima am Schirm → Wellen am Schirm in Phase

Minima: Phasendiff. zwischen Strahl durch Mitte des Spalts und Strahl am Rande π

$\sin\vartheta_{min} \cdot \frac{D}{2} = \frac{\lambda}{2}, \ldots$ (Phasendiff = $\frac{2\pi}{\lambda}$ Weglängendiff.)

$\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta x \sin\vartheta$

bzw. $\sin\vartheta_{min} = \frac{n\lambda}{D}$ n ganzzahlig

⇒ Fig 4-1

Maxima: halbwegs zwischen Minima

also $\sin\vartheta_{max} = \frac{n}{2}\frac{\lambda}{D}$ n ungerade

$D = \lambda$	1. Min bei 90°
$D = 10\lambda$	6
100λ	0.6°

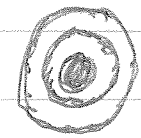
ausgeprägtes Interferenzmuster für $D \geq \lambda$

für $D \gg \lambda$ Min. & Max. sehr nahe, aber Intensität fällt steil ab; für $D \ll \lambda$ kein Interferenz

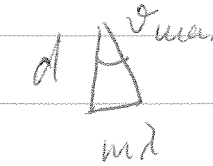
$$\frac{I_\vartheta}{I_0} = \left(\frac{\sin\alpha}{\alpha}\right)^2 = \left(\frac{\sin\left(\frac{\pi D}{\lambda}\sin\vartheta\right)}{\left(\frac{\pi D}{\lambda}\sin\vartheta\right)}\right)^2 \qquad \text{mit } \alpha = \frac{\phi}{2} \text{ für } \Delta x = 0$$

so fällt Einhüllende der Intensität mit Maxima und Minima wie beschrieben.
d.h. Intensität des zweiten, dritten, ... Maximums fällt mit $\left(\frac{1}{(n+\frac{1}{2})\pi}\right)^2$

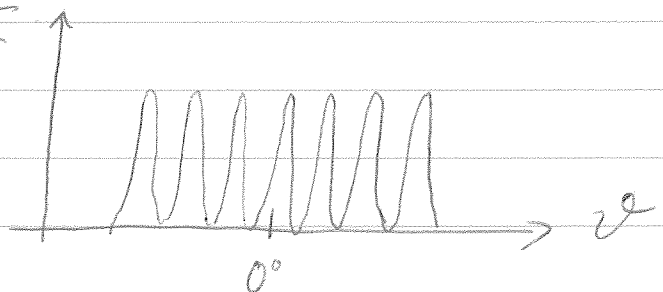
einzelnes Huygens: äquivalent wie Spalt
kreisförmige Apertur a:
1. Min. bei $\sin\vartheta_{min} = 1{,}22\frac{\lambda}{d}$
↑ numerische Zahl durch Integration Flächenelem. die zu gleichem Winkel beitragen



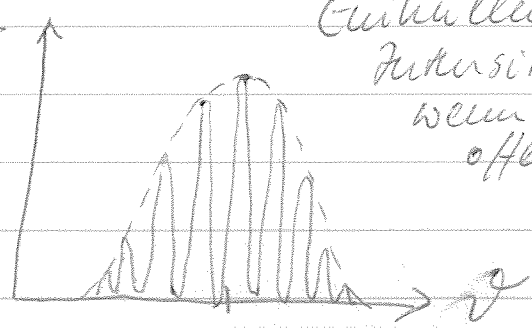
Doppelspalt: (Young Experiment 1801)
Spalte von Breite a und Abstand d ⇒ Fig. 4-2
Maxima bei $d\sin\vartheta_{max} = m\lambda$



für $a \ll \lambda$



Spalte endlicher Breite
z.B. $d = 50\lambda$ $a = 5\lambda$



Einhüllende: Intensitätsverteilung wenn nur 1 Spalt offen

u.U. Demo Beugung am Gitter

weißes Licht
monochromatisches Licht } 1. Gitter m. 25/mm (Rußgitter) → viele Ordn.
2. Rolandgitter 572/mm
→ 0., 1., 2. Ordnung

Beugung am Gitter

großer Anzahl paralleler Spalte
→ Beugungsgitter ⇒ Fig 4-2

wie Doppelspalt Maxima bei

$\sin\vartheta_{max} = \frac{m\lambda}{d}$ (Hauptmaxima)

entscheidender Unterschied: je mehr Spalte das Gitter hat, desto schärfer und schmäler werden Maxima

Röntgenbeugung am Kristall

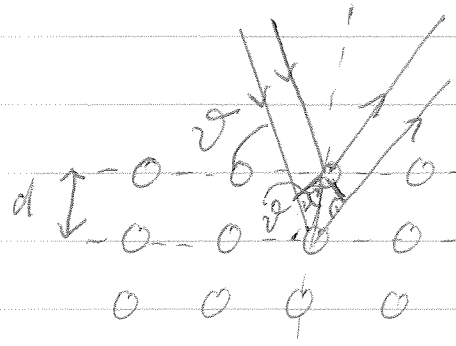
In Kap. 3 hatten wir Ursprung d. Röntgenlinien gesehen. Energie hängt stark von Z ab, typischer Wert Mitte des Periodensystems

$E_x = 40\ keV \quad \lambda_x = \frac{hc}{E} = \frac{1240\ eV\,nm}{4\cdot10^4\ eV} = 0.03\ nm = 0.3\ Å$

Röntgenwellenlänge vergleichbar mit Größe eines Atoms und daher ist Röntgenstreuung (Beugung) an Kristallgittern vergleichbar mit Beugung von Licht an Beugungsgitter

Atomabstände in Kristall: einige Å

d.h. λ_x = einige 10 Gitterabstände, ideal um Aufbau zu untersuchen. (Vorschlag: Max von Laue (1879-1960) um 1912). Da Wellenlänge viel kleiner als bei sichtbarem Licht → viel bessere Auflösung



konstruk. Interferenz wenn
$n\lambda = 2d \sin\vartheta$
Bragg-Gleichung
d: Abstand von 2 Gitterebenen im Kristall

nach W.L. Bragg (1890-1971) der sie mit seinem Vater W.H. Bragg (1862-1942) ableitete und die gemeinsam die Theorie und Technik der Röntgen Beugung zum Studium von Kristallgittern 1912-1913 entwickelten.

In Realität ziemlich schwierig, im einem Kristall als 3-dim. Objekt gibt es viele mögliche Streuebenen (siehe Fig. 4-3) → Aufklärung Kristall struktur, z.B. Na Cl kubisch Beispiel ⇒ Fig. 4-6
idealerweise Einkristall
polykristallin: anstatt regelmäßigem Punktmuster Kreise (siehe auch Fig 4-6) wobei jeder Kreis ein Beugungsordnung (n) entspricht, d.h. aus einem Satz von parallelen Ebenen.
siehe auch Aufklärung der DNA Struktur durch Watson und Crick 1953. Seit 1960 Proteine ...

Röntgenbeugung am Kristall (Zusammenfassung)

Typische Wellenlänge $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{\Delta E}$

$hc = 1240\ eV \cdot nm$

Röntgenstrahlen durch Übergänge zwischen den inneren Atomschalen schwerer Elemente (z.B. Cu) = diskrete Röntgenstrahlung

Oder Bremsstrahlung = kontinuierlich

40 keV $\rightarrow \lambda = 0.03\ nm = 0.3\ Å$

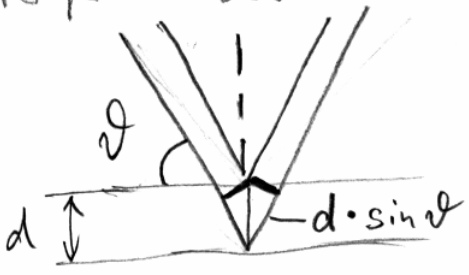
Gitterabstand im Kristall: einige $Å$

Bragg-Reflektion

Gitterebenen bieten viele Streuzentren $\rightarrow$ Überlagerung

Ebene $\Rightarrow$ Einfallswinkel = Ausfallswinkel für paralleles (monochr. ausgedehntes) Strahlenbündel

Interferenz der Ebenen $\Rightarrow$ Bragg-Bedingung



$$2d \sin\vartheta \stackrel{!}{=} m \cdot \lambda$$

Röntgenbeugung – Methoden

Einkristall und Röntgen Spektrum
(= Band von Wellenlängen)

→ von Laue-Diagramm (Fig. 4.4)

Ermittlung von Kristallstrukturen, Symmetrien

Polykristalline Substanz, monochromatische Strahlung

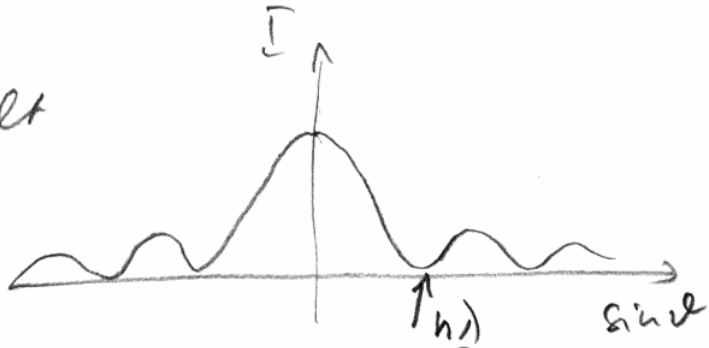
→ Debye-Scherrer-Diagramm (Fig 4.5)

Kristallisierte Biomoleküle

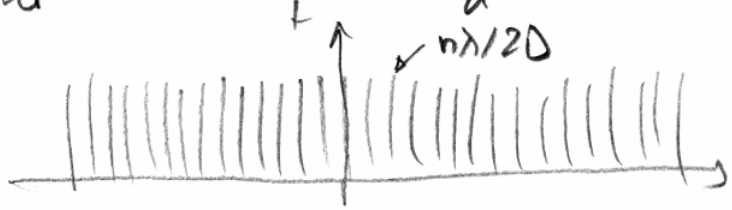
⇒ Molekülstruktur

Wie funktioniert es?

Beugung am Spalt



am Gitter
(viele Punkte)



an vielen Spalten des Gitter

4.2 Materiewellen – De Broglie-Wellenlänge

Das Bohrsche Atommodell zeigt 1913, daß stabile, nicht nach klassischen Gesetzen Energie abstrahlende Elektronen-Bewegungen existieren. Warum scheint im Atom eine „Spezialität" Mechanik zu existieren?

(1892-1987!)
Louis de Broglie hat 1923/24 die Idee, die Ansicht von Planck und von Einstein zu vereinigen. (Im Privatlabor des Bruders Maurice arbeitend, 1923 Dissertation.)

Ausgangspunkt, das Licht persistent Wellen- und Teilchen eigenschaften zu haben scheint. (Siehe Maxwell-Gl., Compton-Effekt, Photoeffekt, usw.)

Planck: $(\Delta)E = h\nu$

De-Broglie: Einen periodischen Vorgang jedem isolierten Energieteil zuordnen.

$$E_0 = m_0 c^2 \stackrel{!}{=} h\nu_0 \qquad (\text{in } S')$$

allgemein periodische Funktion:

$$\psi(t') = \text{„}\cos\text{"}(-\omega_0 t')$$

(Welle sei $x' = 0$)

Lorentztransformation

$$\Rightarrow \quad E = \gamma E_0 = \gamma m_0 c^2 = \gamma \cdot h\nu_0$$

und $t' = \gamma\left(t - \frac{v x}{c^2}\right)$ $\quad -\omega_0 \cdot t'$ ↓

$$\Rightarrow \quad \psi(t) = \text{„cos"}\Big(\underbrace{\frac{\gamma\omega_0}{c^2}}_{k} \cdot v \cdot x - \underbrace{\gamma\omega_0 t}_{\omega}\Big)$$

Welle mit Frequenz $\nu = 2\pi\omega = \gamma\nu_0 = \gamma\frac{m_0 c^2}{h}$

und Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\, c^2 \cdot h}{\gamma \cdot 2\pi m_0 c^2 \cdot v}$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Wellenlänge entspricht dem relativistischen Impuls $p = \gamma m_0 v$

Ausbreitungsvektor $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \vec{e} = \frac{2\pi}{h} \cdot p\vec{e} = \frac{2\pi}{h} \cdot \vec{p}$

(Winkel)frequenz $\omega = \frac{2\pi}{h}\gamma m_0 c^2 = \frac{2\pi}{h} \cdot E$

$$\Rightarrow \text{Materiewelle} \quad \psi(r,t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

beschreibt Ausbreitung eines „isolierten Energiepakets" (= Teilchen + ...) mit $E = \hbar\omega$ (rel. Gesamtenergie)

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (rel. Impuls)

De Broglie zeigt, daß diese Annahme mit mechanischen Grundgesetzen verträglich ist.

Vollständig relativistische Herleitung! (Bild 4-6)

Über die Wellengleichung haben in den folgenden Jahren Erwin Schrödinger (1887-1961) und W. Heisenberg (1901-1976) sehr weitgehende Aussagen gemacht.
$\Psi(\vec{r},t)$ muß (für $E \neq 0$) komplex sein.
(Es gelingt oft, den Imaginärteil in die Zeitabhängigkeit zu schieben, genau gesagt für gebundene Teilchen.)

$\longrightarrow x \rightarrow$

Die Ideen wurden experimentell (= zeitgleich mit Heisenbergs und Schrödingers Arbeiten) durch Davisson + Germer in den Bell Telephone Lab's (N.Y.) bestätigt.
Nachweis elastisch gestreuter Elektronen an einer Einkristall-Oberfläche (Fig. 4-7).

Für Beugungsexperimente geeignete Teilchen:

Elektronen (Oberfläche – LEED-Verfahren)
Neutronen (durchdringen Material)
(Fig. 4-8)

An mechanischen Strukturen wurde zunächst mit Elektronen (Fig. 4-9) später mit Atomen gearbeitet.

4-15 (a)

X

Nichtrelativistisch

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \begin{cases} \frac{h}{\sqrt{2me}} \frac{1}{\sqrt{E/e}} \\ \frac{h}{\sqrt{2mk}} \frac{1}{\sqrt{E/k}} \end{cases}$$

$e = \frac{1\,eV}{1\,J}$

$k = \frac{1\,K}{1\,J}$

Elektronen: $\lambda = \frac{1.23\,nm}{\sqrt{E/eV}}$

Neutronen: $\lambda = \frac{0.0286\,nm}{\sqrt{E/eV}}$

Atome: $\lambda = \frac{0.0287\,nm}{\sqrt{A}\sqrt{E/eV}} = \frac{3.09\,nm}{\sqrt{A}\cdot\sqrt{T/K}}$

z.B. Na: $A = 23$ (Massenzahl)

Überlagerung bei der Interferenz:

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_1(\vec{r},t) + \psi_2(\vec{r},t)$$

$$I = |\psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi_1(\vec{r},t)|^2 + |\psi_2(\vec{r},t)|^2$$

$$+ \underbrace{\psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2}$$

$$\left(e^{ik(s_1-s_2)} + e^{-ik(s_1-s_2)}\right)$$

$$= 2\cos\left[k(s_2-s_1)\right]$$

Überlagerung von Wellenfronten (Fig. 4-9).

Ab den '90er Jahren auch Atome

- Mikrofabrikation von Gitter
- Laserstrahlen "monochromatische" Atomstrahlen

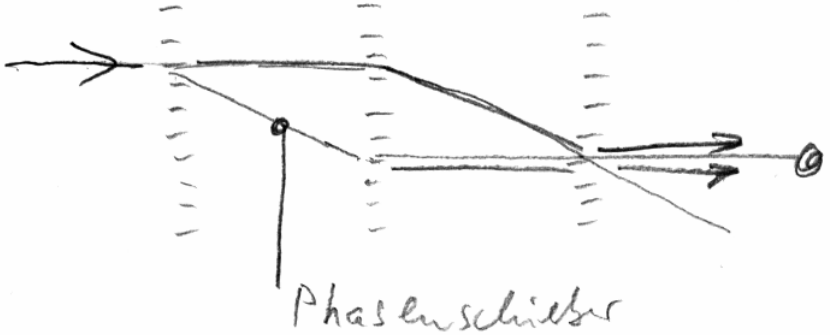
$\lambda_{DB} \simeq 0.1$ nm

8 µm Spaltabstand (Fig. 4-10)

Apparaches Fig. 4-11

Gitterbeugung (Na-Atome) Fig. 12

Neutronen-Interferometrie (Mach-Zehnder-Interferometer)



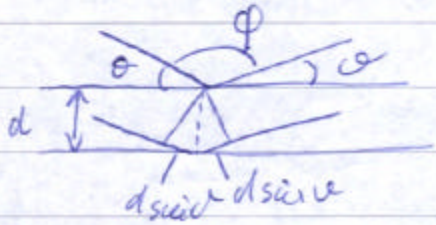
Interferenz findet auch statt, wenn immer nur 1 Teilchen sich der Apparatur befindet (geringe Intensität). D.h. das Teilchen befindet sich nach der Strahlaufspaltung durch Beugung entweder auf dem einen oder dem anderen Weg. (Fig. 4-14)

Elektronen lassen sich wie Licht zur Abbildung von Objekten benutzen, aber die Wellenlänge kann sehr viel kleiner werden. → Elektronenmikroskop (Fig. 4-15) und Rasterelektronenmikroskop (sehr kleiner Strahl durch Fokussierung), Fig. 4-16+17.

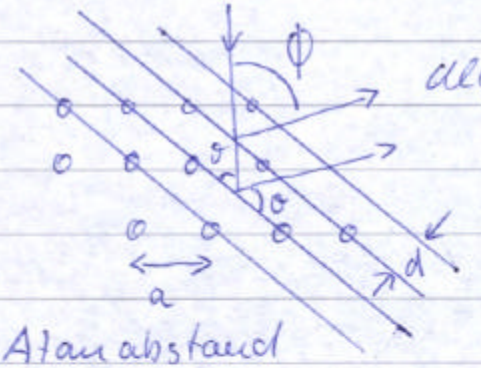
Zusammenfassung kap. 4.2.

de Broglie wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc}$ kann jedem Teilchen mit Impuls p zugeordnet werden

1. exp. Nachweis: Davisson & Germer 1926
Streuung von Elektronen ($T \approx 50$ eV) an Ni-Gitterkristall. Interferenz konstruktiv wenn Bragg-Bedingung erfüllt $\Delta x = a \sin\phi = n\lambda$



Konstr. Interferenz wenn, Streuung an Elektronen II Oberfläche
$\Delta x = 2d \sin\vartheta = n\lambda$
$\phi + 2\vartheta = 180°$ $\phi/2 + \vartheta = 90°$
$\Delta x = 2d \cos(\phi/2) = n\lambda$



allgemeiner:
$\frac{d}{a} = \cos\vartheta = \sin(\phi/2)$ kubischer Kristall
$\rightarrow \Delta x = 2a \cos(\phi/2) \sin(\phi/2)$
$= a \sin\phi = n\lambda$

a Atomabstand
d Abstand von benachbarten Gitterebenen

$a(Ni) = 2.15$ Å Max. bei 50° für $T = 54$ eV
λ für Elektronen (54 eV):
nicht-relativistisch $pc = \sqrt{2 m_0 c^2 T} = 7.4$ keV
$\lambda = \frac{1240 \text{ eV nm}}{7400 \text{ eV}} = 0.166 \text{ nm} = 1.66$ Å

2.15 Å $\cdot \sin 50° = 1.65$ Å ✓

Beugung am Doppelspalt erst viel später (Jönsson 1961), da erst dann passende

Doppelspalt produziert werden konnte
Elektronen mit $T = 50\ keV$ $\lambda = 5.4\ pm$
Doppelspalt: Spalt - Spalt $d = 2 \cdot 10^{-6}\ m$
Spaltbreite $a = 0.5 \cdot 10^{-6}\ m$

Beugung am Spalt Maxima $2.7 \cdot 10^{-6}$ rad auseinander
" Doppelspalt $1.6 \cdot 10^{-5}$ rad
auch: Neutronenstrahlen
inzwischen a) Mikrofabrikation von Gitter
und b) Erzeugung langsamer "monochromatischer"
Atomstrahlen (z.B. Na-Atome mit
$\lambda = 0.1\ nm$

Anwendung: z.B. Elektronenmikroskop

4.3. Wellen, Wellenpaket, Unschärferelation

ebene Welle $\Psi_1 = A \cos(\omega t - kx)$ $v_{Ph} = \frac{\omega}{k}$

Überlagerung von 2 Wellen mit nahe beieinander-liegenden Frequenzen:
addiert $\Psi_2 = A \cos((\omega + d\omega)t - (k + dk)dx)$ und
benutze $\cos\alpha + \cos\beta = 2\cos[\frac{1}{2}(\alpha+\beta)]\cos[\frac{1}{2}(\alpha-\beta)]$

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = 2A \cos\left[\frac{1}{2}\left((2\omega + d\omega)t - (2k + dk)x\right)\right] \cdot \cos\left[\frac{1}{2}(d\omega t - dk x)\right]$$

da $d\omega \ll \omega$ und $dk \ll k$
$\Psi = 2A \cos(\omega t - kx) \cos\left(\frac{d\omega}{2} t - \frac{dk}{2} x\right)$ $\Rightarrow$ Fig. 4-10
"Schwebung", sieht aus wie ursprüngliche

Welle ab Amplitude ist nicht konstant sondern oszilliert langsam

$$A(t,x) = 2A \cos\left(\frac{d\omega}{2}t - \frac{dk}{2}x\right)$$

Amplitude oder Umhüllende propagiert langsam mit Geschwindigkeit $\frac{d\omega}{dk}$

⇒ Wellenpaket charakterisiert durch zwei relevante Geschwindigkeiten

a) schnelle Oszillation, sehr ähnlich der ursprünglichen Welle, propagiert mit Phasengeschwindigkeit $v_{Ph} = \omega/k$

b) Modulation der Amplitude; ganzes Wellenpaket propagiert langsam mit Geschwindigkeit gegeben durch Unterschied in Frequenz und Wellenzahl der überlagerten Wellen
Gruppengeschwindigkeit $v_{Gr} = d\omega/dk$

nicht-sinusförmige periodische Wellen

(Rechteck, Dreieck, ... musikalische Töne)
jede 'beliebige' periodische Funktion $f(x) = f(x+\lambda)$ kann als Summe dargestellt werden:

$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \cos(nkx) + B_n \sin(nkx)\right)$$

mit $k = 2\pi/\lambda$

"Fourier-Theorem"

mit Fourierkoeffizienten

$$A_n = \frac{2\pi}{\lambda} \int_{-\lambda/2}^{\lambda/2} f(x) \cos(nkx)\,dx \quad \text{und}$$

$$B_n = \text{"} \quad \text{"} \quad \sin(nkx) \text{"}$$

hier ist 'beliebig' ziemlich weitgehend, endlich viele Sprungstellen erlaubt (Rechteck)

NB: häufig ist komplexe Schreibweise vorteilhaft

$A\cos\omega t + B\sin\omega t = f = \exp(i\omega t)$

$A\cos(nkx) + B\sin(nkx) \ldots$ ↳ komplex

damit wird

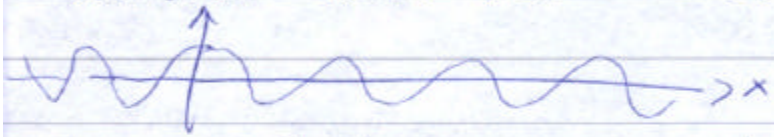
$$f(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \exp(inkx)$$

mit Koeffizienten $A_n = \frac{2}{\lambda}\int_{-\lambda/2}^{\lambda/2} f(x)\exp(-inkx)\,dx$

(siehe z.B. Kap 16 V. Riech, Mathematik in den Exp. physik Vorlesungen - Spektrum Akad. Verlag, Heidelberg 1997)

Lokalisierung von Wellen

a) ebene Welle vom Typ $\Psi = A\cos(kx - \omega t)$
erstreckt sich von $-\infty \leq x \leq \infty$



Keine Information über Lokalisierung in x-Richtung. Andererseits ist der Impuls genau bekannt $p = h/\lambda$ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow p = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k$

↑ hier vom Rotation

Unschärfe im Raum: unendlich groß
" Impuls: Null

b) Wellenpaket (siehe Beispiel oben): wiederholt sich immer noch endlos, ist aber etwas mehr

im Raum lokalisiert. Zu jeder gegebenen Zeit gibt es an manchen Orten große Amplitude, an anderen kleine. Das ist aber auf Kosten einer Unschärfe in der Wellenlänge dk und damit im Impuls 'erkauft'.

c) Um Wellenpaket in Ort zu lokalisieren (z.B. Seilwelle, Lichtblick ...):
Addition sehr vieler Wellen mit ganz fein abgestuft unterschiedlichen Wellenlängen $\lambda, \lambda+d\lambda_1, \lambda+d\lambda_2, \ldots$ ergibt ein Wellenpaket mit guter Lokalisierung, d.h. Wellenpaket für das Amplitude nur in einem kleinen Bereich von x von Null verschieden ist ⇨ Fig. 4-11

Mathematische Beschreibung durch Fourierintegral

$$y(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [A(k)\cos(kx) + B(k)\sin(kx)]\,dk$$

Entwicklungskoeffizienten A_n sind in kontinuierliche Funktionen der Wellenlänge, bzw. des Impulses, übergegangen. Das diskrete Frequenzspektrum A_n, B_n ..., das periodische Funktion beschreibt geht in kontinuierliches Frequenzspektrum $A(k)$ über, das die nichtperiodische Funktion beschreibt. $\sum_n \to \int dk$

analog für den zeitabhängigen Teil

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} [A(\omega)\cos\omega t + B(\omega)\sin\omega t]\,d\omega$$

bzw. in komplexer Darst $\Psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} g(k)\exp(-ikx)\,dk$

und $g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\exp(ikx)\,dx$ Fouriertransform. verknüpft Verteilung im Ortraum und Wellenzahl(Impuls)raum bzw Zeitraum und Frequenzraum

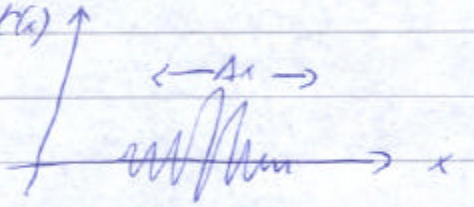
die Funktion $g(k)$ ist die Fouriertransformierte von $\Psi(x)$

$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)\exp(i\omega t)\,d\omega$

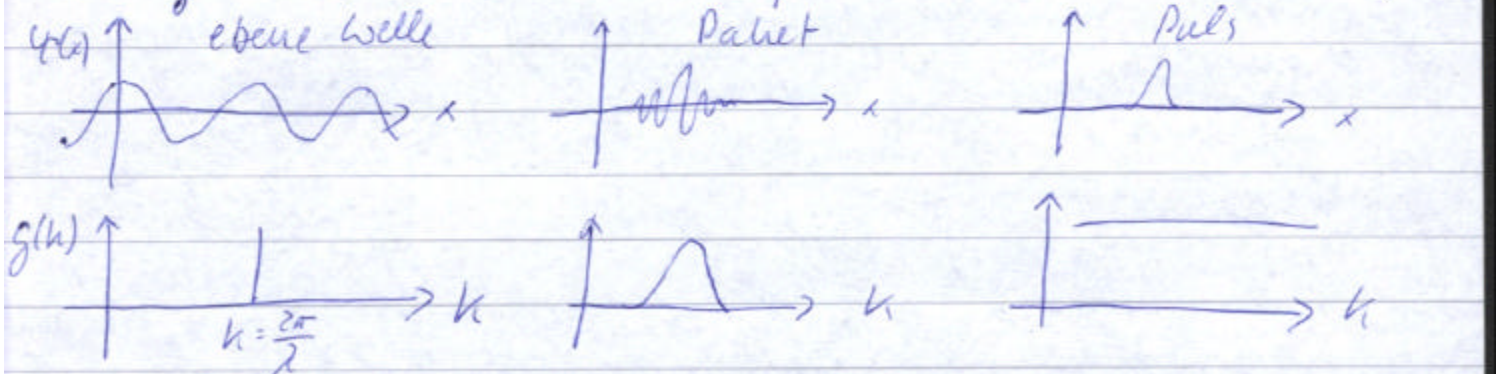
$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\exp(-i\omega t)\,dt$

(kap. 18 Riech)

Lokalisierung von Wellenpaket: in x mit typischer Breite Δx da viele Wellen addiert ist Wellenzahl (Impuls) mit Breite Δk bzw Δp bekannt.



a-c zeigen: es gibt allgemeinen Zusammenhang zwischen Unschärfe im Ort und im Impuls



Spezialfall: Gaussfunktion $\Psi(x) = C\exp(-x^2/2L^2)$

Standardabweichung $\sigma_x = L$

$g(k) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{2L^2}}\exp(-k^2L^2/2)$ $\sigma_k = \frac{1}{L}$ $\Big\}\ \sigma_x\cdot\sigma_k = 1$

Intensität (oder Wahrscheinlichkeit, Teilchen zu finden): $|\psi(x)|^2$ hat $\sigma_x = L/\sqrt{2}$
$|g(k)|^2$ hat $\sigma_k = \frac{1}{\sqrt{2}L}$
$\Big\}\ \sigma_x \cdot \sigma_k = \frac{1}{2}$
bzw $\sigma_x \cdot \sigma_p = \hbar/2$

dies ist das kleinstmögliche Produkt von σ_x und σ_k für andere Funktionen stets größer.
Das Produkt $\sigma_x \cdot \sigma_p$ nennt man "Orts- Impuls- Unschärfe"
Analog gibt es die äquivalente Relation $\sigma_t \cdot \sigma_\omega$ für Gausswellenfunktion $\sigma_t \cdot \sigma_\omega = 1$
für Intensität (Wahrscheinlichkeit) $\sigma_t \cdot \sigma_\omega = 1/2$
da $E = h\nu = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar\omega$
"Energie- Zeit - Unschärfe" $\sigma_t \cdot \sigma_E = \hbar/2$

für alle anderen Funktionen kann man sagen
$\sigma_x \cdot \sigma_k \geq 1 \qquad \sigma_t \sigma_\omega \geq 1$

Dies ist eine allgemeine Welleneigenschaft
Wenn Teilchen nach de Broglie als Wellen beschrieben werden muß diese 'klassische' Welleneigenschaft der Unschärferelation auch auf Teilchenwellen anzuwenden sein. Zuerst realisiert von Werner Heisenberg ⇨ Fig 4-12
"Heisenberg'sche Unschärferelation" für Teilchenwellen

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2 \quad \text{und} \quad \Delta t \, \Delta E \geq \hbar/2}$$

Beispiele:

1. Eine Messung etabliert die Position eines Protons auf $\Delta x = \pm 10^{-11}\,m$. Was ist die Unsicherheit in der Position 1 Sekunde später?

Annahme $v \ll c$

zur Zeit $t=0$ $\quad \Delta x_0 = \pm 10^{-11}\,m \quad \Delta p_{x0} \geq \dfrac{\hbar}{\Delta x_0 \cdot 2}$

$$\curvearrowright \Delta v \geq \frac{\hbar}{m_0 \Delta x_0 \cdot 2}$$

Distanz die Proton in 1 Sekunde durchgeht ist mit Genauigkeit $\Delta x = t\,\Delta v$ bekannt

also $\Delta x \geq \dfrac{\hbar}{m_0 \Delta x_0 \cdot 2} \cdot t$ inverse prop. zu Δx_0! je genauer Position zur Zeit $t=0$ bekannt, desto weniger wissen wir für Zeit t später.

$$\frac{\Delta x}{c} \geq \frac{1240\,MeV\,fm \cdot 1\,s}{2 \cdot 3.14 \cdot 1000\,MeV \cdot 10^{4}\,fm \cdot 2} \simeq 10^{-5}\,s$$

d.h. $\Delta x \geq 10^{-5}\,s \cdot 3 \cdot 10^{8}\,m/s \simeq 3000\,m$!

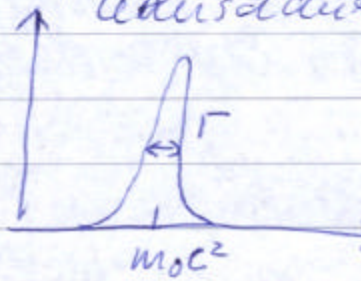
ursprüngliches Wellenpaket ist auseinandergelaufen da Phasengeschwindigkeiten der Komponenten variieren und eine große Zahl von Wellen überlagert werden muß, um für Zeit $t=0$ Lokalisierung auf $10^{-11}\,m$ zu erreichen

2. Zusammenhang Lebensdauer eines Teilchens und Zerfallsbreite Γ

Zerfallsbreite entspricht Energieunschärfe ΔE

Lebensdauer $\tau_0 \rightarrow$ Zeitunschärfe Δt

$$\Gamma = 2.36\,\delta_E \qquad \Gamma \cdot \tau_0 \geq \hbar$$



⇨ Fig 4-13

5. Die Schrödinger-Gleichung

5.1. Wellengleichung für "klassische" Wellen

Eine Welle wird durch eine "Wellenfunktion" beschrieben. In 1 Dimension z.B. $\Psi(x,t)$, die als Lösung einer Wellengleichung erhalten wird. Verschiedene Typen von Wellen, die durch nichtdispersive Medien (keine Dämpfung) propagieren, werden durch eine lineare Wellengleichung beschrieben (siehe 4.1.)

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

z.B. ein Wellen (Beispiele siehe Kapitel 4)

Schallwellen

schwingende Seite

v = Phasengeschwindigkeit

Funktionen vom Typ $\Psi = f(x \pm vt)$ sind Lösungen d.h. lineare Wellenfunktion

in 3 Dimensionen:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad \text{mit } \Psi(x,y,z,t)$$

Definiere Laplace Operator $\Delta = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\approx \Delta\Psi = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

z.B. für harmonische Bewegung $\rightarrow$ harmonische Wellenfunktionen wie ebene Welle

1-dimensional $\Psi_1(x) = A\cos(kx-\omega t)$ ungeeignet wegen Randbedingung

oder $\Psi_2(x) = A\sin(kx-\omega t)$ andere Randbedingung

oder $\Psi_3(x) = A\exp i(kx-\omega t)$

mit Benutzung von

$\cos(kx-\omega t) + i\sin(kx-\omega t) = \exp i(kx-\omega t)$

$\Psi_3(x)$ komplexe Wellenfunktion $i = \sqrt{-1}$ $i^2 = -1$

Quadrat einer komplexen Wellenfunktion:

beliebige komplexe Funktion $\Psi = A + iB$

$\Rightarrow$ konjugiert komplexe Funktion $\Psi^* = A - iB$

und

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = A^2 + B^2 \quad \leftarrow \text{Intensität d. Welle}$$

Beispiel: ebene Welle $\Psi = \exp i(kx-\omega t)$

$\Psi^* = \exp -i(kx-\omega t)$

$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = \exp(0) = 1$

§ 2. Wellengleichung für Teilchenwellen

Wellengleichung für nicht-relativistische Teilchen benannt nach Erwin Schrödinger (1887-1961), der sie 1925 zuerst formulierte

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi \quad \text{oder} \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = E\Psi}$$

Teilchen der Masse m bewegt sich in einem Potential V und hat (totale) Energie $E = V + T$ (da nicht relativistisch)

Schrödingergleichung kann nicht hergeleitet werden (siehe auch Maxwell Gleichungen); kann sie ihre Form motivieren und Gültigkeit ist durch erfolgreiche Beschreibung der Natur demonstriert.
Bed: i) Energieerh. ii) de Broglie Ansatz iii) Stetigkeit u. Konsequenz "vernünftige" Lösungen
1-dimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung

- erhält Energie $E = V + T$; benutze de Broglie Postulat $\lambda = h/p$ und mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\rightsquigarrow$
$T = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$

z.B. ebene Welle $\psi = \sin(kx - \omega t)$
$\partial^2\psi/\partial x^2 = -k^2 \sin(kx - \omega t) = -k^2 \psi$
Setze in Schrödingergleichung ein
$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)}_{p^2/2m = T} + V = E$

Superpositionsprinzip soll gelten: ψ_1, ψ_2 Lösungen $\psi_1 + \psi_2$ Lösung
nötig für Wellenpaket! und Teilchen, das dadurch beschrieben!

in 3 Dimensionen $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta$

d.h. $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi}$ 3-dim., zeitunabhängige Schrödingergleichung

Das ganze Feld der Quantenmechanik basiert auf dieser Gleichung. Um ein physikalisches Problem zu lösen, in dem der Wellencharakter eines Teilchens eine Rolle spielt (gegeben durch Skala im Vergleich zu λ) $\rightarrow$ "Lösen der Schrödingergleichung"

grundsätzlich der Fall für Probleme auf atomarer oder subatomarer Ebene

Elektronen mit Atom
Elektronen und Atomkerne mit Molekül
Anregungen von Atomen u. Molekülen
Nukleonen mit Atomkern
Radioaktiver Zerfall .... etc.

Einzige Unterschied zwischen all diesen Problemen: wähle korrektes Potential $V(x)$ oder $V(x,y,z)$ ⇝ "löse" Schrödingergleichung

"lösen": ① finden der Wellenfunktion Ψ, die die Gleichung erfüllt.
② Einsetzen der Lösung in Schrödingergleichung führt zu totaler Energie E, die mit dieser Lösung verbunden ist.

a) Schrödingergleichung ist eine "Operator-Gleichung" ≡ bestimmte "Operatoren" wirken auf Funktion Ψ

z.B. $\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{Operator}}\underbrace{(\Psi)}_{\text{Funktion}}$

"speziell: Operator der kinetischen Energie $= \frac{\text{Impuls operator}^2}{2m}$

(nicht relativistisch)

d.h. um Impuls^2 eine Welle zu finden
$p^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 = \hbar^2 k^2$ ⇝ bilde 2. Ableitung der Wellenfunktion nach x und multipliziere mit $-\hbar^2$

z. B. $\psi = \exp(ikx)$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik \exp(ikx)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (ik)^2 \exp(ikx) = -k^2 \psi \qquad -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = k^2 \hbar^2 \psi$$

"Impulsoperator" $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (mehr später)

Operator der potentiellen Energie V agiert (wirkt) auf Wellenfunktion ψ : $V\psi$

z. B. für Coulomb Potential $V = \frac{konst}{r} = \frac{konst}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

und

$$V\psi = \frac{konst \cdot \psi(x,y,z)}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

b) Schrödingergleichung ist eine "Eigenwert-Gleichung"

Definition: eine Funktion ψ ist eine "Eigenfunktion" eines Operators $\hat{Q}$, wenn die Operation von $\hat{Q}$ auf ψ dazu resultiert, dieselbe Funktion ψ mal einer Konstante c zu reproduzieren. d. h.

$$\hat{Q}\psi = \pm c \psi \qquad c: \text{positive, reale Konstante}$$

Jede Funktion ψ, die die obige Gleichung erfüllt, ist eine "Eigenfunktion" des Operators $\hat{Q}$ und die Konstante $\pm c$ heißt der "Eigenwert" der mit ψ assoziiert ist.

Schrödinger-Gleichung: $\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m \partial x^2} + V\right)}_{\text{Operator} \equiv \text{Hamiltonoperator } H} \psi = \underbrace{E}_{\text{Eigenwert} \equiv \text{Energieeigenwert}} \psi$

einfache Beispiele: finde mögliche Eigenfunktionen und zugehörige Eigenwerte des Operators $\hat{Q} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Eigenwertgleichung $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \pm c \psi$

nur periodische Funktionen sind Kandidaten

ψ	$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$	Eigenwert
$\sin x$	$-\sin x$	-1
$\cos x$	$-\cos x$	-1
$\sin^2 x$	$2 - 4\sin^2 x$	$\neq \pm c\psi$ ← keine Eigenfunktion
e^{2x}	$4e^{2x}$	$+4$
e^{ix}	$-e^{ix}$	-1
$\sin(ux)$	$-u^2 \sin(ux)$	$-u^2$

5.3. Wahrscheinlichkeitsdichte und Wahrscheinlichkeit

die u.U. komplexe Wellenfunktion ist keine direkte Observable. Die Interpretation der Wellenfunktion wurde 1926 durch Max Born gegeben:

Das Quadrat der Wellenfunktion $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$
ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $= P(x)$
≡ Wahrscheinlichkeit pro Einheit von x, das durch ψ beschriebene Teilchen in einem Ortsintervall zu finden.
Wahrscheinlichkeit ein Teilchen zwischen x_1 und x_2

zu finden $P_{x_1 - x_2} = \int_{x_1}^{x_2} P(x)\,dx = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x)\,\Psi(x)\,dx$

Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden, $-\infty \leq x \leq \infty$

$P = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\,\Psi(x)\,dx$ wenn Wellenfunktion Ψ 1 Teilchen beschreibt

$\equiv 1$ muß Wahrscheinlichkeit Teilchen irgendwo zu finden gleich 1 sein. → bestimmt Normierung der Wellenfunktion

Für bestimmte Variable oder Operatoren sei Wellenfunktion Ψ eine Eigenfunktion. (z.B. für den Operator der totalen Energie $H = T + V$) ⇒ bedeutet, daß Variable für eine gegebene Wellenfunktion Ψ einen präzisen Wert hat, nämlich den Eigenwert.
Umgekehrt wird das nicht gleichzeitig der Fall sein für dieselbe Funktion Ψ und andere Variable (Operatoren).

z.B. sagt aus die Heisenberg'sche Unschärferelation, daß Impuls und Ort nicht zugleich präzise bestimmt sind für ein wellenartiges Teilchen, sondern daß $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$

Für solche Variable gibt es keinen scharfen Eigen-

wert. Wir können jedoch aus der Wellenfunktion einen mittleren Wert berechnen.

Vorschrift Mittelwert zu berechnen:
normalerweise

$$\langle x \rangle = \frac{n_1 x_1 + n_2 x_2 + \dots}{n_1 + n_2 + \dots} = \frac{\sum n_i x_i}{\sum n_i}$$

wobei n_i die Zahl der Fälle ist, in denen x_i gefunden wird. Für eine kontinuierliche Variable x entspricht n_i die Wahrscheinlichkeitsdichte.

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx}$$

wäre kompliziert für ein klassisches Problem. In der Quantenmechanik ist die Größe x generell ein Operator $\hat{x}$ und die Gleichung umgeschrieben wird

$$\langle \hat{} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{x} \psi \, dx \quad = \text{Erwartungswert von Operator } \hat{x}$$

(Normiert $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx \equiv 1$)

Operator $\hat{x}$ kann z.B. x-Koordinate sein, dann spielt Reihenfolge im Integral allerdings keine Rolle

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi \, dx$$

Mittelwert oder Erwartungswert für x-Koordinate eines Teilchens beschreibbar durch $\psi(x)$

analog gilt für den Impuls

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty} \psi^* \hat{p} \psi \, dx$$

Was ist Impulsoperator $\hat{p}$? Aus der Schrödingergleichung für 1-dimensionalen Fall Operator der kinetischen Energie $\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

d.h. $(\text{Impuls Operator})^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Impulsoperator (in x-Richtung) $\hat{p}_x = \pm i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

jetzt ist Position des Operators für Berechnung des Mittelwerts (Erwartungswerts) von Bedeutung

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi \, dx$$

5.4. Einfache Anwendungen der Schrödinger-Gleichung

a) "freies Teilchen" $\Leftrightarrow$ keine Kräfte, $\sum \vec{F}^{(netto)} = 0$, $V(x) = konst.$
kann Skala so wählen, daß $V = 0$

in 1 Dimension $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x)$ oder

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \quad \text{mit} \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = k^2$$

$$= -k^2 \psi$$

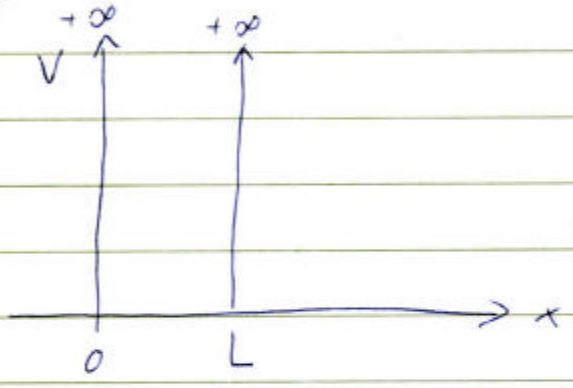
mögliche Lösungen $\psi_1(x) = A \sin kx$

$\psi_2(x) = B \cos kx$

$\psi_3(x) = C \exp(ikx)$ oder linearkomb.

Energieeigenwerte: $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$ da k kontinuierlich alle Werte annehmen kann, nimmt auch E kontinuierlich alle Werte an

b) Teilchen in unendlich tiefem Kasten-Potential (1 Dimension)



$V = \infty$ für $x \leq 0$ und $x \geq L$

$V = 0$ für $0 < x < L$

Teilchen ist zwischen $x=0$ und $x=L$ gefangen

Teilchen "im Kasten"

innerhalb des Kastens ist Lösung identisch mit a) aber zusätzlich gibt es Randbedingungen: Teilchen kann nirgends außerhalb Bereich 0-L sein ⇝ Wellenfunktion muß verschwinden für $x \leq 0$ und $x \geq L$ ⇝ Wahrscheinlichkeit $\psi^* \psi$ gleich Null.

d.h. $\psi(x=0) = 0$ und $\psi(x=L) = 0$

eliminiert $\cos kx$

für $\psi = A \sin kx$ → $\psi(x=0) = 0$ immer erfüllt

$\psi(x=L) = A \sin kL = 0$ für $kL = n\pi$

oder $k_n = \frac{n\pi}{L}$

↝ nur bestimmte Wlk um k möglich analog zu stehender Welle auf schwingender Saite (an beiden Enden befestigt)

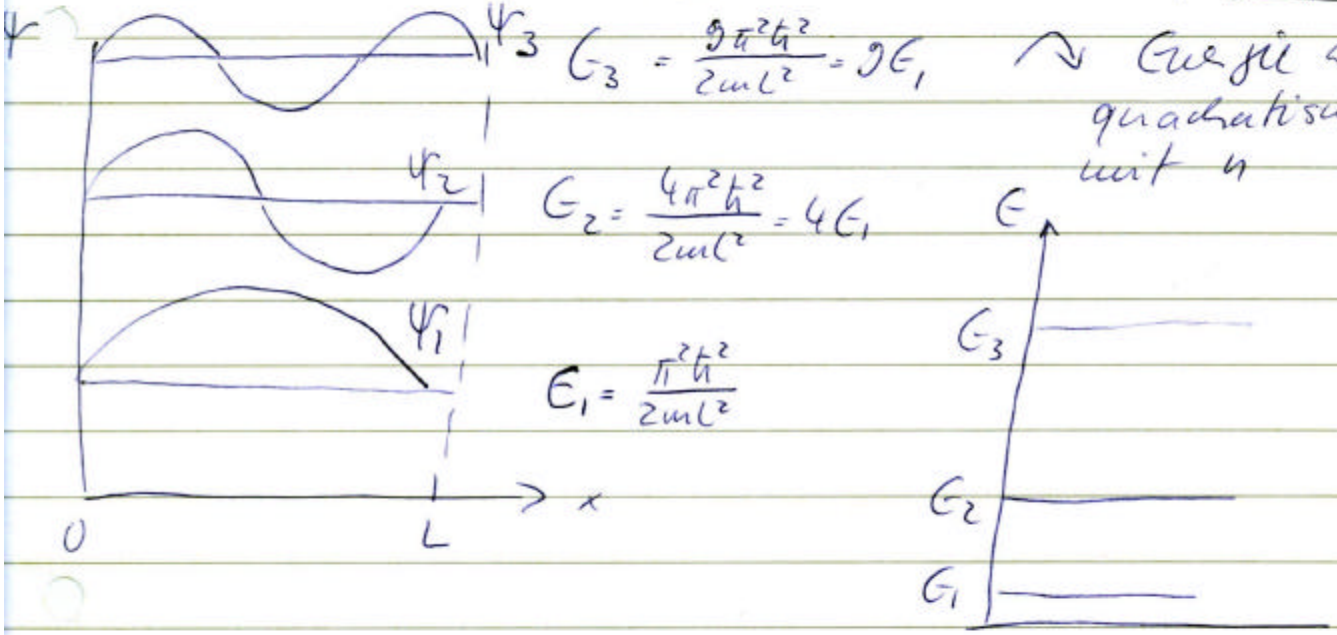
d.h. auch Energie kann nur bestimmte, durch k gegebene Werte annehmen

$$E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2L^2 m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

E_n sind die Energieeigenwerte für Wellenfunktionen

$$\psi_n = A \sin k_n x = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

⇒ Fig. 5-1



↝ Energie wächst quadratisch mit n

Normierung der Wellenfunktion:

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_0^L \psi^* \psi \, dx = \int_0^L A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \equiv 1$$

$$= A^2 \frac{L}{2} \quad \rightsquigarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

z.B. finde Wahrscheinlichkeit daß Teilchen zwischen

$x = L/2$ und $x = L$ ist:

$$P_{\frac{L}{2}-L} = \int_{L/2} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L}\frac{L}{4} = \frac{1}{2} \quad \checkmark$$

Teilchen im Kasten ↪ Unschärferel. 5-12b

stehende Welle 5-12-a

5-12-a

Interpretation als stehende Welle

de Broglie Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p}$ und Bedingung $n\frac{\lambda}{2} = L$

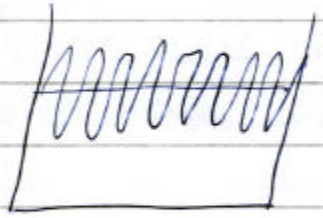
$\rightsquigarrow p = \frac{nh}{2L}$

und kin. Energie $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$

stehende Welle Summe von rechtslaufender und linkslaufender Welle $\exp(ikx)$ und $\exp(-ikx)$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{\exp(ikx) - \exp(-ikx)}{2i}\right)$$

klassisches Limit: für n sehr groß



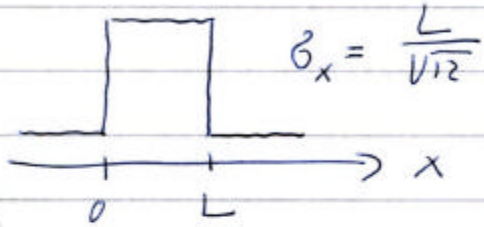
Wahrscheinlichkeit $\frac{dP}{dx} = \frac{1}{L}$

und Wahrscheinlichkeit Teilchen im Intervall Δx zu finden ist

$$\int_x^{x+\Delta x} dx \frac{dP}{dx} = \frac{1}{L}\int_x^{x+\Delta x} dx = \frac{\Delta x}{L}$$

Konsistenz m. Unschärferelation

Abschätzung: Standardabweichung einer flachen Wahrscheinlichkeitsverteilung von $x = 0$ bis $x = L$



$\sigma_x = \frac{L}{\sqrt{12}}$ ~ Unsicherheit im Impuls

$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{\sqrt{12}\,\hbar}{2L}$

~ minimale kinetische Energie

$\langle T^{min} \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{3\hbar^2}{mL^2}$

keine ebene kinetische Energie genau; niedrigster Zustand $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ größer um ca 50% als Minimum das durch Unschärferelation bedingt

Energie genau bekannt, also auch p^2 und Absolutbetrag von Impuls, aber nicht Vorzeichen!
stehende Welle ist Überlagerung von rechts- und linkslaufender Welle ~ Unschärfe im Impuls

$\Delta p = p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L}$

damit ist $\Delta p \Delta x = \frac{h}{2L}\frac{L}{\sqrt{12}} = \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}$

genauer: $\langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi\, dx$ etc. siehe später

c) harmonischer Oszillator

harmonische Bewegung: Pendel, kompr. Feder ...
sehr gängiges Problem in der Physik (Natur)
charakterisiert durch rückstellende Kraft

$F = -kx$ Hooke'sches Gesetz "einfache harmonische Bewegung"

nach Newtons 2. Gesetz $ma = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$

$\rightsquigarrow m\frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$ Lösungen vom Typ

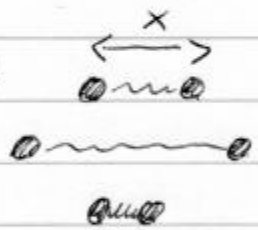
$x = A\cos(\omega t + \varphi)$

mit Oszillatorfrequenz $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$ und $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$
und Amplitude A

einfache harmonische Bewegung sehr wichtig, da sie kleine Störungen der meisten rückstellenden Kräfte dem Hooke'schen Gesetz entsprechen.

Quantensysteme, die harmonische Oszillationen ausführen

- 2-atomige Molekül

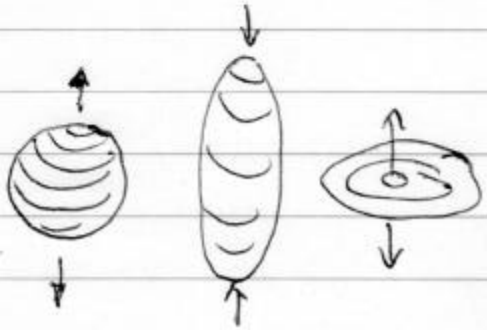


x ist Abstand zwischen den 2 Atomen

- Atome im Kristall (siehe Schwarzkörperstrahlung)

x: Position eines Atoms

- Vibration eines Atomkerns um Gleichgewichtsform



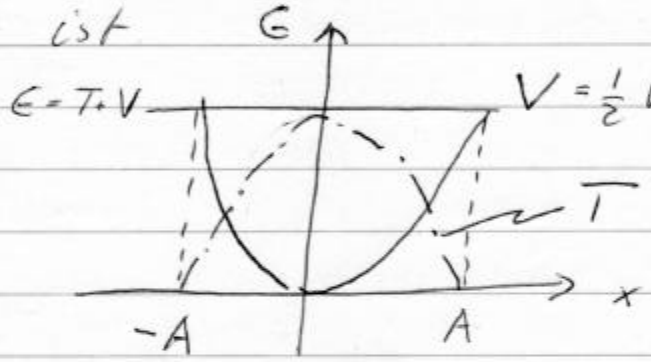
alles Systeme mit Dimensionen, so daß

de Broglie Wellenlänge eine nicht vernachlässigbare Rolle spielt ↝ muß vibrierendes/oszillierendes System als Teilchenwelle darstellen

↝ lösen der Schrödingergleichung für harmonisches Potential

$F = -k\,x \qquad V(x) = -\int_0^x F(x')\,dx' = k\int_0^x x'\,dx' = \frac{1}{2}kx^2$

Energie im klassischen Oszillator $E = T + V = \frac{1}{2}kA^2$ wobei A die max. Auslenkung aus Ruhelage ist



Schrödinger Gleichung $\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}kx^2\right)\Psi = 0$

einfachste Funktion, die diese Gleichung erfüllt:

Gaussfunktion $\Psi(x) = A\exp -ax^2$

$\partial\Psi/\partial x = -2ax\,(A\exp -ax^2)$

$\partial^2\Psi/dx^2 = 4a^2x^2\,(A\exp -ax^2) - 2a\,(A\exp -ax^2)$

$\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}kx^2\right) = 2a - 4a^2x^2$ also $E = \frac{a\hbar^2}{m}$

und $4a^2 = \frac{mk}{\hbar^2}$ ↝ $a = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar} = \frac{m\omega}{2\hbar}$

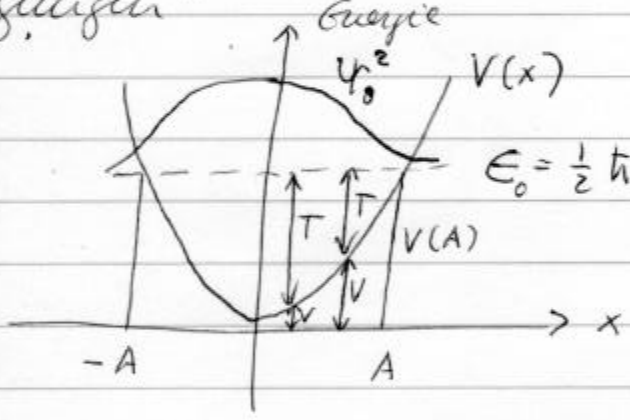
damit wird $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$

Koeffizient A aus der Normierungsbedingung

$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$ mit $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

$\rightsquigarrow \psi = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$ mit $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

dies ist die energetisch niedrigste Lösung der Schrödingergleichung mit harm. Potential, also repräsentiert diese Wellenfunktion den Grundzustand d. harmonischen Oszillators ψ_0 mit Grundzustandsenergie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 > 0$ unabhängig von der Temp. ist das die minimale Energie, sogenannte "Nullpunktschwingungen"



klemie aber endliche Wahrscheinlichkeit Teilchen jenseits des klassischen Umkehrpunkts zu finden!

Teilchen dringt etwas in die klassisch verbotene Region ein, Wie weit? für $|x| > A$ wird $V(x) > E$, fehlende Energie kann für kurze Zeit wegen Heisenberg'scher Unschärferelation "ausgeliehen" werden

$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ $\quad \Delta E = V(x) - E$

$\Delta t = \frac{\hbar/2}{V(x)-E}$ Geschwindigkeit $v = \sqrt{\frac{2T}{m}}$

Distanz $\Delta x = \frac{1}{2} v \Delta t = \frac{1}{2} \frac{\hbar/2}{V(x)-E} \sqrt{\frac{2(V(x)-E)}{m}} = \frac{\hbar/2}{\sqrt{2m(V(x)-E)}}$

aber da $V(x)$ nicht konst, ist v nicht konst, $\longrightarrow$

Integration nötig $\int dx \frac{1}{\sqrt{V(x)-E}}$ ---

harmonischer Oszillator im Grundzustand und Orts - Impuls Unschärferelation : siehe Kap. 4-3 c) S. 4-23

$\sigma_{\psi(x)} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ $\sigma_{\psi^2(x)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$ } $\sigma_{\psi^2(x)}\,\sigma_{\psi^2(k)} = \frac{1}{2}$ und da $p = \hbar k$

$\sigma_{\psi(k)} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$ $\sigma_{\psi^2(k)} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}$ ↑ Wahrscheinlichkeit p

$\sigma_{p(x)}\,\sigma_{p(p)} = \frac{\hbar}{2}$ minimal

generelle Lösungen der Schrödingergleichung im harmonischen Potential:

$\psi_n(x) = A\, f_n(x) \exp(-ax^2)$ $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$ (siehe oben)

mit $f_n(x) = \sqrt{2^n n!}\, H_n(x)$

↳ Hermitesche Polynome

n	$H_n(x)$	E_n
0	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2cx$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4c^2x^2 - 2$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8c^3x^3 - 12cx$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$

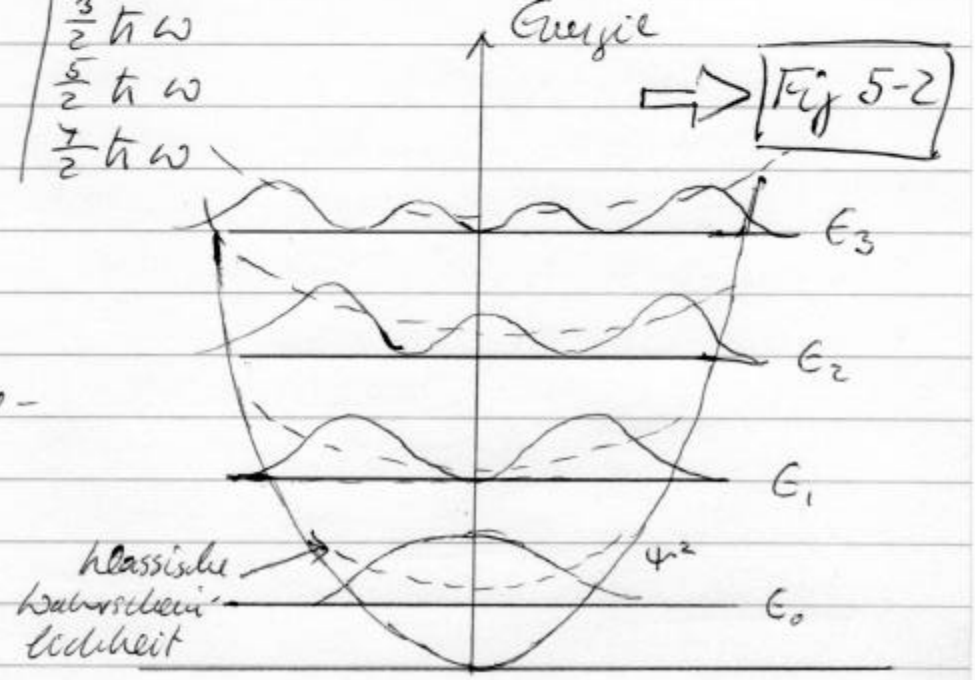
mit $c = \sqrt{\frac{km}{\hbar^2}} = \frac{m\omega}{\hbar^2}$

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

Abstand zwischen benachbarten Energie-niveaus

$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$

konstant



⇒ Fig 5-2

Betrachte Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$:

a) oszilliert zwischen klassischen Umkehrpunkten und fällt jenseits exponentiell ab wie $\exp(-2ax^2)$

b) je grösser n, desto mehr gleicht $|\psi_n|^2$ aus wie die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte

"Korrespondenzprinzip": $\Longrightarrow$ Fig 5-3 für $n = 69$

für grosse Quantenzahlen n Übereinstimmung mit der klassischen Physik

Betrachte "makroskopisches Teilchen" mit Masse $m = 1g$, Geschwindigkeit $v = 10^{-6} m/s$, eingesperrt in Region von 1 cm Breite. Was ist Quantenzahl n?

$$T = \frac{1}{2} m v^2 = E = \frac{n^2 h^2}{8 m L^2} \qquad n = \sqrt{\frac{8 m L^2 E}{h^2}} = \sqrt{\frac{4 m^2 L^2 v^2}{h^2}}$$

$$= \frac{2 m L v}{h}$$

$$n = \frac{2 \cdot 10^{-3} kg \cdot 0.01 m \cdot 10^{-6} \frac{m}{s}}{6.6 \cdot 10^{-34} Js} \approx 3 \cdot 10^{22} !$$

also pro cm $3 \cdot 10^{22}$ Oszillationen, wäre sicherlich mit Ortsmessung, die Auflösung $< 10^{-24} m$ hat.

Zurück zu Quantenoszillator im Grundzustand:

Erwartungswert $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \, x \, \psi(x) \, dx$

$$= \int \underbrace{A^2 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right)}_{\text{gerade F.}} \underbrace{x}_{\text{ungerade F.}} dx = 0$$

genauso $\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) \, dx = 0$

mit $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2)\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$

mittlere pot. Energie $\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{1}{2} k x^2 \psi(x)\,dx = \frac{1}{4}\hbar\omega$

mittl. kin. Energie $\langle T \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x)\,dx$

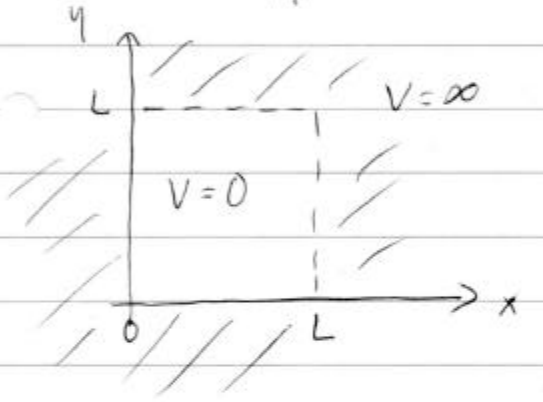
$= \frac{1}{4}\hbar\omega$

$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$ Eigenwert

d) Teilchen in 2-dimensionalem Kastenpotential
→ im Prinzip ähnlich wie vorher, aber wichtiges neues Phänomen "Entartung"

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Psi(x,y)+V(x,y)\,\Psi(x,y)=E\,\Psi(x,y)$$

mit $V(x,y)=0$ für $0\le x\le L$ und $0\le y\le L$
$V(x,y)=\infty$ sonst



$\Psi(x,y)=0$ außerhalb der Region in der $V=0$

innerhalb: Separation der Variablen x, y

$\Psi(x,y)=f(x)\,g(y)$ Produkt aus zwei Funktionen, eine nur von x abhängig, die andere nur von y

Schrödinger Gleichung zerfällt in zwei Gleichungen in jeweils nur einer Dimension:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{f(x)}\frac{d^2f(x)}{dx^2}+\frac{1}{g(y)}\frac{d^2g(y)}{dy^2}\right)=E=\text{const.} \Longleftrightarrow$$

x-abhängiger u. y-abhängiger Teil müssen jeder für sich konstant sein

mit Lösungen $f(x)=A\sin k_x\cdot x$ m. $k_x=\frac{n_x\pi}{L}$ $n_x=1,2,3..$
und $g(y)=B\sin k_y\cdot y$ m. $k_y=\frac{n_y\pi}{L}$ $n_y=1,2,3..$

$$\Psi(x,y)=C\sin k_x x\sin k_y y=C\sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}$$

Normierung jetzt über Doppelintegral

$$P = \int_0^L dy \int_0^L dx\, C^2 \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin^2\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) = 1$$

$$C = \frac{2}{L}$$

und Energieeigenwerte $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2)$

nenne $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL}$

Grundzustand $n_x = 1$, $n_y = 1$ $\quad E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} = 2E_0$

1. angeregter Zustand $n_x = 1$, $n_y = 2$ oder $n_x = 2$, $n_y = 1$

$$E = (4+1)E_0 = 5E_0$$

d.h. es gibt zwei Sätze von Quantenzahlen, die zu einem Zustand der gleichen Energie führen (n_x, n_y) $(1,2)$ und $(2,1)$
$\Leftrightarrow$ Zustand ist zweifach "entartet"

⇨ Fig. 5-5

$(4,1)$ u. $(1,4)$	$17E_0$	Zustand mit $E = 50E_0$ sogar dreifach entartet $n_x = 5$, $n_y = 5$ und $n_x = 1$, $n_y = 7$ und $n_x = 7$, $n_y = 1$ } sehr unterschiedliche Wahrscheinlichkeitsdichte
$(3,2)$ u. $(2,3)$	$13E_0$	
$(3,1)$ u. $(1,3)$	$10E_0$	
$(2,2)$	$8E_0$	
$(1,2)$ u. $(2,1)$	$5E_0$	
$(1,1)$	$2E_0$	
(n_x, n_y)		

⇨ Fig 5-5

5.5 Zeitabhängige Schrödingergleichung

für elektromagnetische Welle haben wir Wellengleichung $\Delta \Psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$ und daraus

resultiert ebene elektromagnetische Welle
$\Psi(x,t) = A \exp i(kx - \omega t)$
für Teilchenwelle hatten wir bisher nur zeitunabhängigen Teil betrachtet
Für ein freies Teilchen lautet zeitabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

dabei ist $\Psi(x,t)$ die orts- und zeitabhängige Wellenfunktion, (kann nicht abgeleitet werden).
diese Gleichung wird erfüllt durch Wellenfunkt.

$$\Psi(x,t) = B \exp i(kx - \omega t)$$
$$= \psi(x) \exp(-i\omega t) \quad \text{mit } E = \hbar\omega \text{ und}$$
$$p = \hbar k \text{ und } T = E = \frac{p^2}{2m}$$

für Teilchen, das sich im Potential bewegt gilt generell

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

3-dimensionale zeitabhängige Schrödingergleichung
wir hatten vorher gesehen daß dies auch gleich $E\Psi$ ist. d.h. es gibt eine zweite

Eigenwertgleichung $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$
und die physikalische Bedeutung von $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ ist, daß es Operator $\hat{E}$ der totalen Energie ist.

analog zu 1 Dimension

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$$

wieder Produktansatz (wie bei 2-dim. Kasten)

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\,\varphi(t)$$

für Fall $V=0$ hatten wir

$$\psi(x,t) = B \exp i(kx - \omega t) = \underbrace{B \exp(ikx)}_{\varphi(x)} \underbrace{\exp(-i\omega t)}_{\varphi(t)}$$

wenn <u>V nicht zeitabhängig</u>, können wir schreiben

$$\varphi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x)\right] = \varphi(x)\, i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \quad / : \varphi(x)\varphi(t)$$

$$\underbrace{\frac{1}{\varphi(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V\varphi(x)\right]}_{\text{hängt nur vom } x \text{ ab}} = \underbrace{\frac{i\hbar}{\varphi(t)}\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}}_{\text{hängt nur vom } t \text{ ab}}$$

nur möglich, wenn jede Seite für sich konstant ist $= E$

- linke Seite haben wir bereits behandelt als zeitunabhängige Schrödingergleichung → gibt Lösungen für den ortabhängigen Teil der Wellenfunktion
- rechte Seite ganz einfache Differentialgleichung

$$\frac{i\hbar}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} = E \quad \text{bzw} \quad \frac{i\hbar}{\varphi(t)}\, d\varphi = E\, dt$$

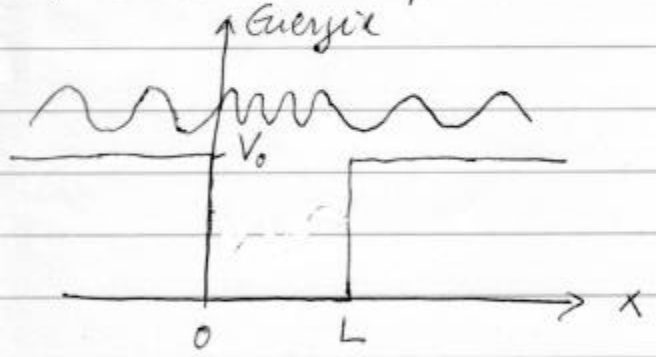
allgemeine Lösung ln $\varphi(t) = -\frac{iG}{\hbar} t + \text{konst.}$

$\varphi(t) = \text{konst.} \exp\left(-\frac{iGt}{\hbar}\right) = \text{konst}^{\text{n}} \exp(-i\omega t)$

für Fall, daß V nicht zeitabhängig ist, ist der zeitabhängige Teil der Wellenfunktion immer $\exp(-i\omega t)$, konst. wird in generelle Normierung aufgenommen. Wenn wir uns für totale Wellenfunktion interessieren, lösen wir die zeitunabhängige Schrödingergleichung und multiplizieren das resultierende $\varphi(x)$ oder $\psi(x,y,z)$ mit $\exp(-i\omega t)$

5.6. Potentialstufen und -Barrieren, endliches Kastenpotential

a) endlich tiefes Kastenpotential



$V = 0$ für $0 < x < L$

$V = V_0$ für $x \leq 0$ und $x \geq L$

Region 1 | Region 0 | Region 2

Fall 1: $E > V_0$

im Prinzip wie freies Teilchen, aber einige interessante Unterschiede

Region 0: $\psi_0(x) = A \exp(ik_0 x) + B \exp(-ik_0 x)$

mit $k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2}$ (siehe oben)

Region 1,2: Lösung wie freies Teilchen bei $V = 0$ ab

Mit unterschiedlicher Wellenzahl (Verschiebung des Energienullpunkts wäre völlig äquivalent)
$\Psi_1(x) = C\exp(ik_1x) + D\exp(-ik_1x)$ mit $k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

sieht aus wie Teilchen mit niedrigerer Energie relativ zu Region 0, daher oszilliert es langsamer
identisch $\Psi_2(x) = G\exp(ik_1x) + F\exp(-ik_1x)$

Bestimmung der 6 Konstanten:
Wellenfunktion muß an Grenzen der Regionen stetig sein, ebenso die erste Ableitung (Impuls)
↝ legt 4 Konst. fest
Natürlich: Anfangsbedingung, z.B. Teilchen kommt von einer Quelle bei $x<0$, dann kann Teilchen in Region 2 nur nach pos. x propagieren, also $F=0$
letzte Konstante: Normierung der Wellenfunktion

Neu: Reflektion und Transmission
Teilchen werde zu $t=0$ von einer Quelle bei $x<0$ in positiver x-Richtung emittiert
$\Psi_1 = C\exp(ik_1x)$
zu Zeit t_1 erreicht Teilchen $x=0$, die Potentialstufe
- ein Teil der Welle propagiert weiter in positiver x-Richtung $\Psi_0 = A\exp(ik_0x)$
- ein Teil wird reflektiert in negativer x-Richtung
$\Psi_1 = C\exp(ik_1x) + D\exp(-ik_1x)$

Wahrscheinlichkeit (Transmission) + Wahrscheinlichkeit (Reflektion) $= 1 \iff A^2 + D^2 = 1$

Fall 2: $E < V_0$

Lösungen für Region 0 wie Fall 1

Region 1,2: $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi$

Teilchen ist im Potentialwall gefangen, dringt aber etwas in die klassisch verbotene Region ein (siehe harm. Oszillator)

$\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi$ mit β reell hat Lösungen der Form

$\psi = C\exp(kx) + D\exp(-kx)$

da $\psi_1 \to 0$ für $x \to -\infty$ $\quad \psi_1 = \exp(kx)$

$\psi_2 \to 0$ $\quad x \to \infty$ $\quad \psi_2 = D\exp(-kx)$

mit $k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

Teilchen ist außerhalb des Potentialkastens auf Region der Breite $\Delta x = 1/k$ lokalisiert

(Standardabweichung von $\exp(-kx)$ ist $\delta_x = 1/k$)

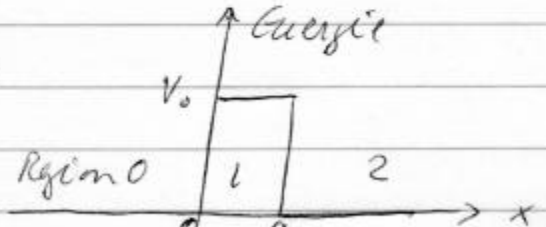
mit Orts-Impulsunschärfe wird damit für mittlere kinetische Energie $\langle T \rangle \geq \frac{V_0 - E}{4}$

und Teilchen propagiert mit Barrier

(Ergänzung S-25a)

b) Potentialstufe:

ganz analog



nehme an Teilchen fällt von negative x-Richtung ein; bei $x = 0$ wird es mit gewisser Wahrscheinlichkeit reflektiert: ebene Welle in negative x-Richtung

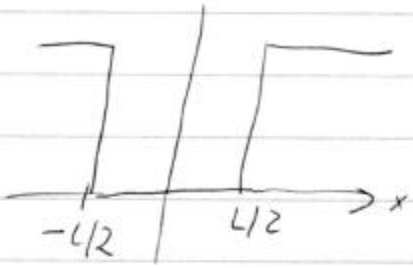
$B\exp(-ik_0x)$

und mit endlicher Wahrscheinlichkeit propagiert es

5-25a

Energieniveaus im endlich tiefen Kastenpotential

z.B.



innerhalb $\psi_0 = A\cos kx$

außerhalb $\psi_1 = D\exp(-\beta x)$

bei $x = \frac{L}{2}$ $\quad A\cos\frac{kL}{2} = D\exp(-\beta L/2)$

und $\quad -kA\sin\left(\frac{kL}{2}\right) = -\beta D\exp(-\beta L/2)$

bzw.

$$\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\beta}{k}$$

(Randbed. bei $x = -L/2$ nicht weiter wichtig; schon verwendet um sich zu eliminieren)

Benutze $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ und $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

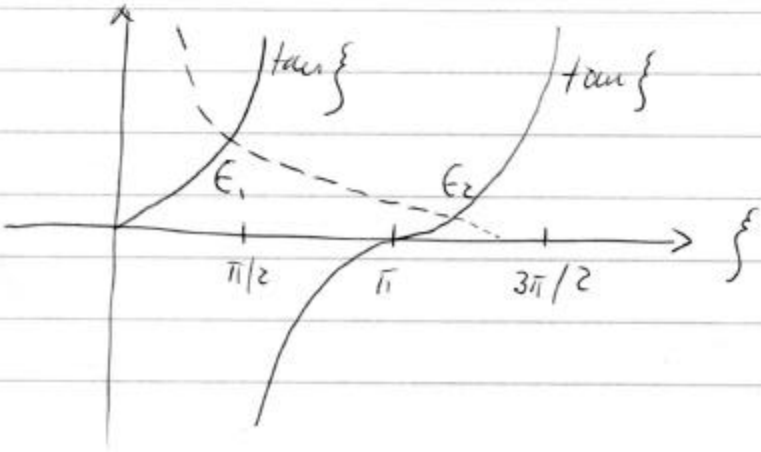
$$\tan\left(\frac{L\sqrt{2mE}}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

transzendentale Gl.

Lösung numerisch oder graphisch

neue $\xi = \frac{L\sqrt{2mE}}{2\hbar}$ und $W = \frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}$; max ξ ist $\sqrt{W}$

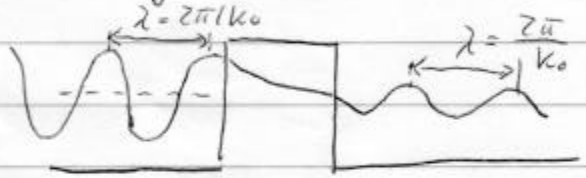
$\Rightarrow E = \frac{2\hbar^2\xi^2}{mL^2}$ und $\tan\xi = \frac{\sqrt{W - \xi^2}}{\xi}$



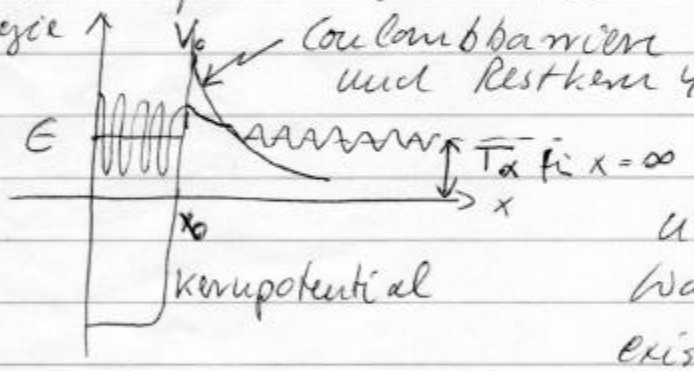
☞ Fig 7-13

Bem.: für unendlich tiefen Kasten E_1 bei $\xi = \pi/2$

in Region 1 wieder $\Psi_1 = C \exp(-k_1 x)$ $k_1 = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$
je nach Höhe und Breite der Barriere
ist Wellenfunktion bei $x=a$ klein aber endlich
→ endliche Wahrscheinlichkeit die Barriere
zu durchdringen und auf der anderen Seite
wieder aufzutauchen
"Tunneleffekt"
in Region 2 wieder ebene Welle $\Psi_2 = D \exp(ik_0 x)$



Beispiele:
• α-Zerfall ${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y + ({}^{4}_{2}He)$ → "α-Teilchen"

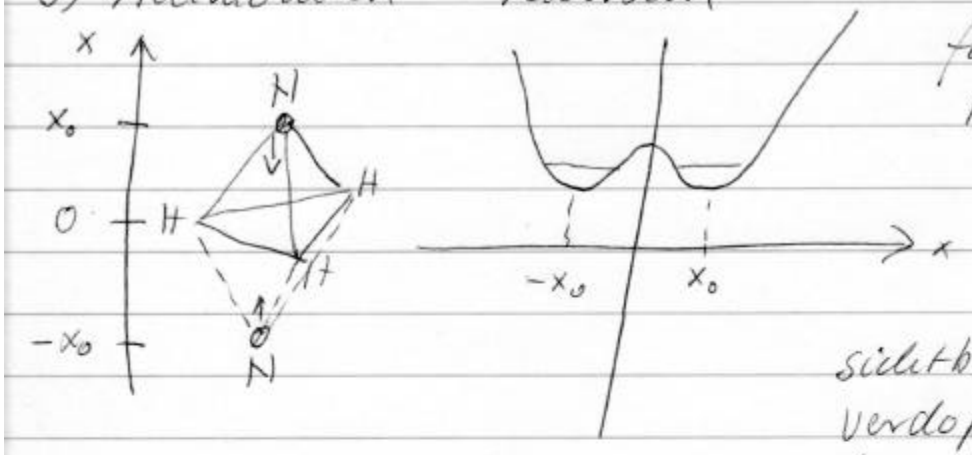


nehme an mit gewisser Wahrscheinlichkeit existiert in Kern X ein α-Teilchen mit Energie $E > 0$
mit Barriere $\Psi = A \exp(-\beta x)$ $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - T_\alpha)}{\hbar^2}}$
für ${}^{238}U$: $V_0 \approx 35$ MeV
Tunnelwahrscheinlichkeit $P \approx A^2 \exp(-2\beta d)$
mittl. Distanz vom Kern ($x=0$) bei der kinet. Energie T_α gleich potentielle Energie
$T_\alpha = \frac{2(Z-2)e^2}{d}$ Energieerhaltung
also $P \approx A^2 \exp\left[-4Ze^2\sqrt{2m(V_0 - T_\alpha)}/\hbar T_\alpha\right]$ $Z \gg 2$
$t_{1/2} \propto 1/P$ mit $V_0 \gg T_\alpha$ wird

$$\ln t_{1/2} \approx C_1 + \frac{C_2 Z}{T_\alpha}$$

kleine Änderung T_α → riesige Änderung $t_{1/2}$ pro MeV T_α $t_{1/2}$ um 10^5 ⟹ **Fig. 5-6**

b) Ammoniak - Inversion



Tunnelaufspaltung

im Spektrum sichtbar als Inversionsverdopplung jeder Linie

c) Rast-Tunnelmikroskop
(Scanning Tunneling Microscope STM)

Elektronen werden durch Potentialbarriere (Austrittsarbeit, siehe Photoeffekt) in Materialoberfläche gehalten. Nadelartige Probe wird Größenordnung 1 nm über Oberfläche gehalten ⇒ Elektronen tunneln von Material in Nadel ⇒ Strom, der sensitiv von Breite der Barriere (Abstand Nadel-Oberfläche) ist. Rückkopplungs-Mechanismus hält durch Bewegung der Nadel Strom konstant ⇒ Bewegung vermißt Oberflächenstruktur mit Genauigkeit $< 0.01\,\text{nm} \approx 1/100$ Atomdurchmesser!
(Gerd Binnig und Heinrich Rohrer, IBM, Nobelpreis 1986)

typische Zahlen $\kappa = \sqrt{\frac{2m_e(U_0 - E)}{\hbar^2}} = 7.3 \cdot 10^9/\text{m}$ $\quad m_e c^2 = 0{,}511\,\text{MeV}$, $U_0 - E = 2\,\text{eV}$, $\hbar c = 197\,\text{MeV fm}$

für Änderung der Distanz dL um $0.1\,\text{Å} = 10^{-11}\,\text{m}$
Änderung der Tunnelwahrscheinlichkeit

$$\frac{dP}{P} = -\kappa\, dL = -7.3 \cdot 10^9/\text{m} \cdot 0.1 \cdot 10^{-10}\,\text{m} = -0.073$$ 7.3% Stromänderung

d) Tunneldiode

6. Rutherford - Bohr'sches Atom-Modell

6.1. Wiederholung generelle Eigenschaften des Atoms

a) generell sind Atome stabil

b) Atome bestehen aus Atomkern (zus. gesetzt aus Protonen und Neutronen) und Elektronen, die Atomkern umgeben. Wir werden hier sehen, wie wir das wissen. Atome sind neutral
Atom wird durch Coulombkraft gebunden
Potential

$$V_C = \underbrace{-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}_{\substack{1.44\ eV\,nm \\ = 1.44\ MeV\,fm}} \frac{Z}{r}$$

elektrostat. pot. Energie zwischen Atomkern mit Ladung Ze und einem Elektron mit Ladung e in Abstand r
wird in Zukunft nur als "e^2" geschrieben

c) Typische Grösse: $1-10\ \text{Å} = 10^{-10} - 10^{-9}\ m$
(werden wir auch in diesem Kapitel sehen)
Wellenlänge des sichtbaren Lichts viel zu lang, um Atom aufzulösen. Siehe aber Bragg-Streuung

$$pc = E = Z\frac{hc}{\lambda} = \frac{1240\ eV\,nm}{0.1-1\ nm} = 1.-10.\ keV$$

X-ray oder Röntgenstrahlen

(oder Rastertunnelmikroskop)

d) Atome können durch Absorption von elektromagnetischer Strahlung gewisser Energie angeregt werden. Generell regen sie sich schnell wieder ab. Dabei werden Photonen emittiert.

mit diesen Punkten befassen wir uns in den nächsten Kapiteln

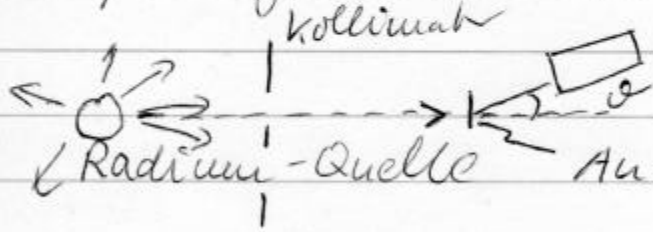
Zunächst hier in Kap. 6 ein 'klassisches' Modell, das Bohrmodell, dann quantenmechanische Lösung (Schrödingergl.) in Kap. 7
Dabei befassen wir uns, um Probleme zu vereinfachen, nur mit Atomen bestehend aus Atomkern und einem Elektron, also Wasserstoff und wasserstoffähnliche Atome:

H, He^+, Li^{2+}, Be^{3+}, ...

6.2. Rutherford-Streuung

Information über Größe und Form geladener Objekte wird generell erhalten durch Streuung geladener Teilchen und Messung der Winkelverteilung. Erster Fall hier: Streuung von α-Teilchen an Atomkernen, die sogenannte Rutherfordstreuung.

Auf Vorschlag von E. Rutherford führten Geiger und Marsden um 1909 Streuexperimente durch in denen Alphateilchen (He^{2+}) auf eine Goldfolie geschossen wurden.



Sie machten folgende Beobachtungen:
a) die meisten Alphateilchen gehen ohne Ablenkung durch die Folie, d.h. bei $\vartheta = 0°$

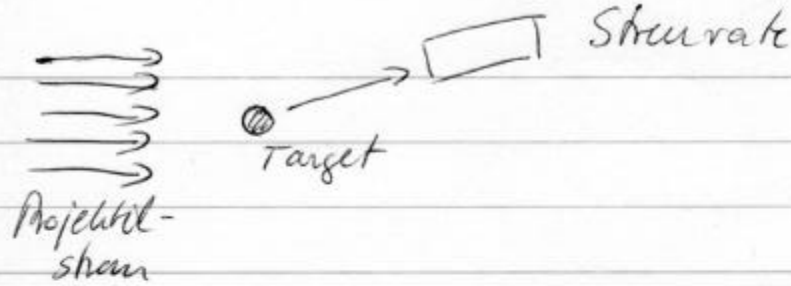
b) d. mittlere Streuwinkel ist sehr klein:
$\langle \vartheta \rangle = \int_0^{180°} H(\vartheta)\, \vartheta \, d\vartheta \approx 1°$

c) einige, wenige Alphateilchen werden jedoch in sehr große Winkel gestreut; typischerweise 1 in 10^4 geht in Winkel $\vartheta > 90°$.

Schlüsse daraus: Materie ist lose gepackt, aber gelegentlich trifft Alphateilchen auf ein sehr massives Streuzentrum, so daß es sogar in Rückwärtswinkel gestreut werden kann.
Das kann nicht Streuung an Elektronen sein da $m_e \approx \frac{1}{8000} m_\alpha$, Streuzentren muß massiver als α-Teilchen sein. → führt zu Postulation des Rutherford Modells des Atoms: der größte Teil der Masse und die gesamte positive Ladung sind in einem "Atomkern" konzentriert. Größe 10^{-15}–10^{-14} m = 1–10 fm, also sehr klein. Dieser ist von 2 Elektronen umgeben, die den größten Teil des Volumens eines Atoms füllen.
(z.B. Thompson Modell ausgeschlossen: Positive aus Protonen/Neutronen in dem Elektronen wie Rosinen verteilt sind)

Quantitative Beschreibung der Streuung:

betrachte zunächst Strom von Projektilteilchen die eine große Fläche überstreichen auf der sich 1 Targetteilchen befindet



einfallende Rate $R_i \left(\frac{\text{Projektilteilchen}}{\text{Zeiteinheit}} \right) = \frac{dN_i}{dt}$

einfallender Fluß $\Phi_i = \frac{R_i}{A} = \frac{dN_i}{A\,dt}$ A: Strahlquerschnittsfläche

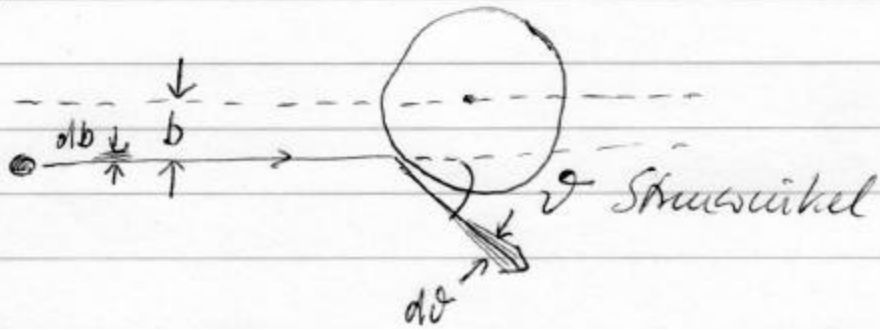
Rate der gestreuten Teilchen $R = \frac{dN}{dt}$

Streuwahrscheinlichkeit wird gemessen durch den sogenannten Streuquerschnitt oder Wirkungsquerschnitt σ, so daß

$R / R_i = \sigma / A$ σ hat die Dimension einer Fläche; ist die Fläche, die 'aktiv' zur Streuung beiträgt.

Zunächst einmal würden wir sagen, die geometrische Querschnittsfläche des Targetteilchens. Werden später sehen: wenn wir spezifischer sein in der Aussage, was passiert, wenn Projektil Target trifft, verliert σ diese einfache geometrische Bedeutung.

Die Geometrie der Streuereignisse wird durch den Stoßparameter b definiert: Abstand der Projektiltrajektorie vom Zentrum des Targetteilchens



für Stoßparameter zwischen b und $b+db$ ist der Wirkungsquerschnitt gegeben als die Fläche eines Ringes mit innerem Radius b und äußerem Radius $b+db$, also $\delta = 2\pi b\,db$

Teilchen, die mit Stoßparameter b einfallen, werden in Winkel $\vartheta(b)$ gestreut (Zusammenhang weiter unten).

$$\frac{dR}{d\vartheta} = \Phi_i \frac{d\delta}{d\vartheta} = \Phi_i\, 2\pi b \frac{db}{d\vartheta}$$

da Messung üblicherweise einen Raumwinkelbereich überdeckt ist wünschlicher

$$\frac{dR}{d\Omega} = \Phi_i \frac{d\delta}{d\Omega} = \frac{\Phi_i\, 2\pi b}{d\varphi \sin\vartheta} \frac{db}{d\vartheta}$$

Problem am besten in Kugelkoordinaten behandelt

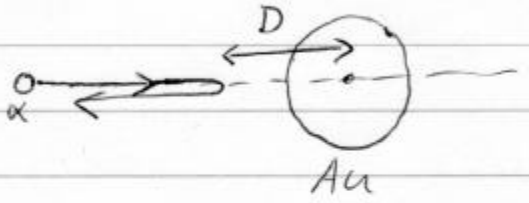
$$\left.\begin{aligned} z &= r\cos\vartheta \\ x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\ y &= r\sin\vartheta\sin\varphi \end{aligned}\right\} \begin{aligned} &0 \le r \le \infty \\ &0 \le \vartheta \le \pi \\ &0 \le \varphi \le 2\pi \end{aligned}$$

Volumenelement $dV = dx\,dy\,dz = r^2 dr \underbrace{\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi}_{\text{Raumwinkel } d\Omega}$

$= r^2 dr\, d\cos\vartheta\, d\varphi$

bei φ-Symmetrie $= 2\pi r^2 dr\, d\cos\vartheta$

Betrachten wir zunächst Streuereignisse bei $b=0$ (zentrale Stösse)



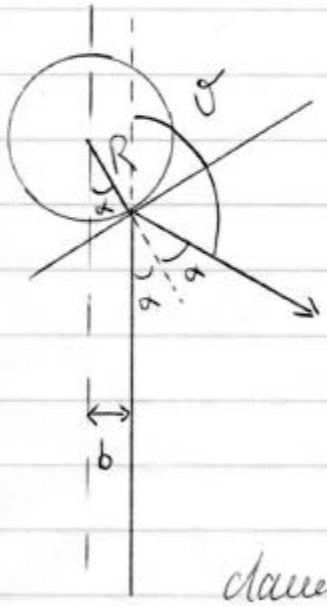
Projektil (α-Teilchen nähert sich bis seine anfängliche kinetische Energie T_α in potentielle (Coulomb) Energie umgewandelt ist. Jetzt $T=0$, Abstoßung durch Coulombpotential, α-Teilchen kehrt um und erreicht bei unendlicher Entfernung wieder kinetische Energie T_α.
Umkehrpunkt: nächster Abstand D zwischen Target und Projektil gegeben durch Energieerhaltung

$$T_\alpha = \frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{e^2 z Z}{D} \quad \rightsquigarrow \quad D = \frac{e^2 z Z}{T_0}$$

z.B. α-Teilchen von $T_0 = 10$ MeV auf Goldkern
$z=2$, $Z=79$ $\rightsquigarrow$ $D = \frac{1.44 \text{ MeV fm} \cdot 2 \cdot 79}{10 \text{ MeV}} = 22.8$ fm

was passiert bei $b \neq 0$
analog zu Keplerbahn: α-Teilchen bewegen sich auf Trajektorien, die durch Hyperbeln gegeben sind (Coulombpotential hat dieselbe Form wie Gravitationspotential)
Aus Energie und Drehimpulserhaltung ergibt sich nächster Abstand und Streuwinkel. (siehe Übungsaufgabe)
Ziel ist Zusammenhang zwischen b und ϑ um Streurate in Winkelelement $d\Omega$ ausrechnen zu können, d.h. $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ und $\frac{dR}{d\Omega}$

Illustration zunächst anhand von Stößen von Billiardkugeln: Streuwinkel gleich Einfallswinkel



$\vartheta + 2\alpha = \pi$ und $\frac{b}{R} = \sin\alpha = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$

$\frac{db}{d\vartheta} = -\frac{R}{2}\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$

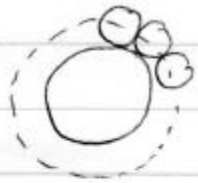
R ist gemischter Abstand, zwei Kugeln berühren sich

$$R = R_t + R_p$$

damit wird $\frac{d\sigma}{d\vartheta} = 2\pi b \frac{db}{d\vartheta} = \frac{2\pi (R_t+R_p)^2}{2}\left(-\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\cos\frac{\vartheta}{2}$

$$\sigma = \pi (R_t+R_p)^2 \int_{\pi}^{0} \left(-\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\right)\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) d\vartheta$$

$$= " \int_{0}^{1} 2\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) d\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \pi (R_t+R_p)^2$$



Fläche eines Kreises mit $R = R_t + R_p$

"geometrischer Streuquerschnitt"

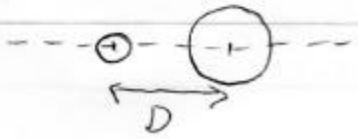
b) Streuung im Coulombfeld $\leftrightarrow$ Rutherfordstreuung

$\rightarrow$

Zusammenhang zwischen b und ϑ gegeben als

$$b = \frac{D}{2}\cot\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$$

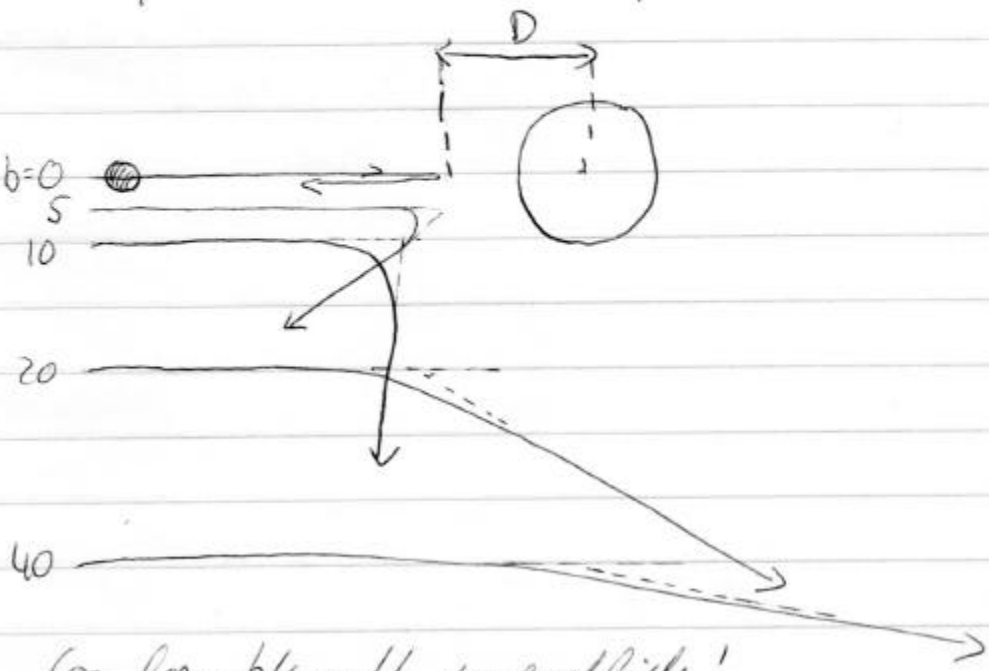
D = minimaler Abstand zwischen Target und Projektil bei zentralem Stoß ($b = 0$)



für Beispiel von oben: 10 MeV α-Teilchen auf Gold

b (fm)	ϑ
5	133°
10	97°
15	74°
20	59°
40	32°
80	16°
160	8°

α-Trajektorien sind Hyperbeln



Reichweite der Coulombkraft unendlich!

mit $b = \frac{D}{2}\cot\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \frac{D}{2}\frac{\cos(\vartheta/2)}{\sin(\vartheta/2)} \sim \frac{db}{d\vartheta} = \frac{D}{4}\frac{1}{\sin^2(\vartheta/2)}$

und $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b\,db}{\sin\vartheta\,d\vartheta} = \frac{D}{2}\frac{\cos(\vartheta/2)}{\sin(\vartheta/2)}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{D}{4}\frac{1}{\sin^2(\vartheta/2)}$

$2\sin(\vartheta/2)\cos(\vartheta/2)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{D^2}{16}\frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)} = \frac{D^2}{4}\frac{1}{(1-\cos\vartheta)^2}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 z^2 Z^2}{16\,T_0^2}\frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)}$$

Rutherford-Streuquerschnitt

etwas anders geschrieben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{zZ}{4}\right)^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\left(\frac{\hbar c}{T_0}\right)^2\frac{1}{\sin^4(\vartheta/2)} \qquad \text{mit } \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1.44\ \text{MeV fm}}{197\ \text{MeV fm}} = \frac{1}{137} = \alpha$$

α: dimensionslose Kopplungskonstante der elektromagn. Wechselwirkung

in dieser Form kann Streuformel generalisiert werden: Streuquerschnitt proportional zum Quadrat der Stärke der Wechselwirkung, proportional zum Quadrat der Ladungen, invers proportional zum Quadrat der einfallenden kinetischen Energie, inverse prop. zur vierten Potenz von sin(θ/2)

⇒ Fig 6-1

wichtig: dies gilt nur mit der Bedingung daß Ladungsverteilungen von α-Teilchen und Goldkern nicht überlappen. Sonst Abweichung, da Coulombkraft nach Gauss'schem Satz die eingeschlossene Ladung mißt

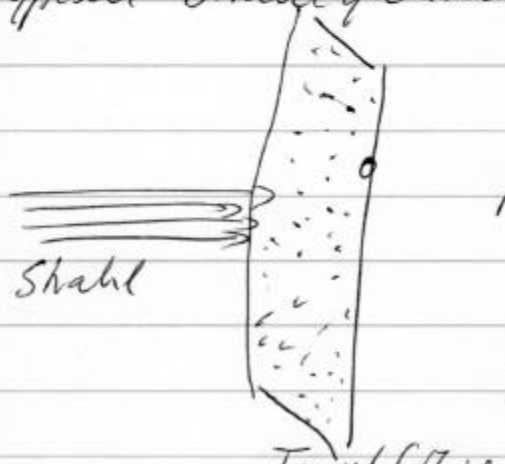
Demo Rutherford-streuung

mehr als ein Targetteilchen (Streuzentrum):
Strahlrate R_i und Targetfolie der Dicke t
Anzahl der Streuzentren pro Flächeneinheit

$$C = \frac{\text{Streuzentren}}{\text{Volumen}} \cdot \text{Targetdicke} = \frac{\rho \cdot N_A \cdot t}{A}$$

ρ Dichte
A Atomgewicht
N_A Avogadrozahl

typisch Strahlquerschnitt < Targetfolienquerschnitt
> einzelnes Streuzentrum



jetzt wird

$$R = R_i \cdot C \cdot \Omega \quad \text{und}$$

$$\frac{dR}{d\Omega} = R_i \cdot C \cdot \frac{d\Omega}{d\Omega}$$

Beispiel: Au-Folie der $t = 1\,\mu m$

$$C = \frac{6.02 \cdot 10^{23} \cdot 19.3\,g \cdot 1 \cdot 10^{-4}\,cm \cdot mol}{mol \cdot cm^3 \cdot 197\,g} = 5.9 \cdot 10^{18}/cm^2 = 5.9 \cdot 10^{-8}/fm^2$$

welcher Bruchteil der einfallenden Strahlteilchen (10 TeV α) wird in einem Detektor mit 1 sr Öffnungswinkel, der unter 90° platziert ist, gemessen?

$$\left.\frac{dR}{d\Omega}\right|_{90°} = R_i\, C\, \frac{D^2}{16}\, \frac{1}{\sin^4(45°)}$$

$$\frac{dR_{90°}}{R_i} = d\Omega \cdot C\, \frac{D^2}{16}\, \frac{1}{\sin^4(45°)} = 1 \cdot \frac{5.9 \cdot 10^{-8} \cdot 22.8^2\, fm^2}{fm^2 \cdot 16}\, \frac{1}{\sin^4(45°)}$$

$$= 7.6 \cdot 10^{-6}$$

Bruchteil in $\vartheta > 60°$?

$$\frac{dR}{R_i}_{>60°} = \int_0^{60°} \frac{C\,D^2}{16}\, \frac{2\pi \sin\vartheta\, d\vartheta}{\sin^4(\vartheta/2)} = \frac{4\pi C D^2}{16} \frac{\cos(\vartheta/2)}{\sin^3(\vartheta/2)}\, d\vartheta$$

(mit $\sin\vartheta = 2\sin(\vartheta/2)\cos(\vartheta/2)$)

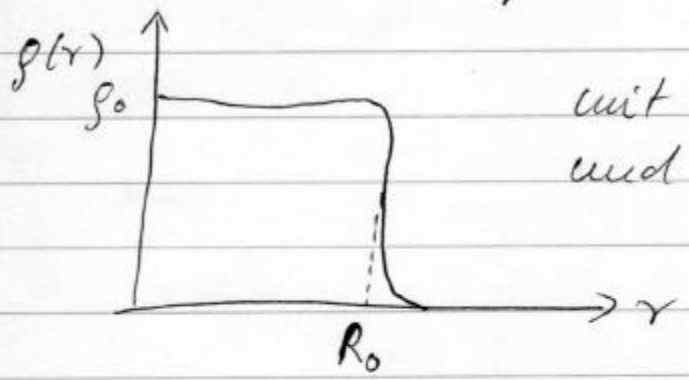
$$\frac{dR_{>60}}{R_i} = \frac{\pi CD^2}{4} \int_{\sin 30 = 0.5}^{\sin 90 = 1} 2 \sin^{-3}(\theta/2)\, d\sin(\theta/2) = \frac{\pi CD^2}{4} \underbrace{\left[-\frac{1}{\sin^2 \theta/2} \right]_{0.5}^{1}}_{3}$$

$$= 7.2 \cdot 10^{-5}$$

Messung de Grösse des Atomkerns mit Rutherfordstreuung: wenn T_0 grösser wird werden irgendwann Ladungsverteilung des Atomkerns und des α-Teilchens überlappen, Potential ändert sich und Kernkraft fängt an zu wirken → beobachte Abweichung $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ von $\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$

aus Abweichung $\frac{d\sigma/d\Omega_{exp}}{d\sigma/d\Omega_{Rutherford}}$ ⟹ Fig 6-2

kann man Ladungsverteilung des Kerns genau vermessen und findet



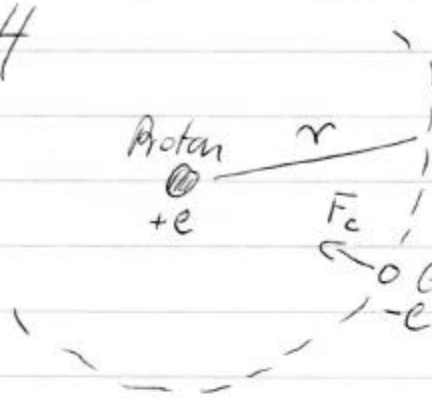
mit $R_0 \approx 1.2\,fm \cdot A^{1/3}$
und $\rho_0 \approx 0.16\,/\,fm^3$

kurze Diskussion Proton, Ladungsverteilung des Protons, Quarks anhand Fig. 6-2.

6.3. Rutherford-Modell des Atoms

Kleiner, sehr massiver und positiv geladener Atomkern umgeben von Elektronen.
Elektronen können nicht stationär bei bestimmtem Abstand sein – Atom würde mit Coulombkraft kollabieren. Für bewegte Elektronen gibt es dynamisch stabile Orbitale, für die die attraktive Coulombkraft F_e zwischen Elektron und Kern eine konstante Zentripetalkraft F_c schafft, die Elektronen auf Kreisbahnen um Kern hält (in Analogie zu Planeten und Gravitation). → werden später korrekter dieser Fälle sehen.

z.B. Wasserstoff



$$F_e = \frac{e^2}{r^2} = F_c = \frac{mv^2}{r}$$

$$e^2 = mv^2 r \text{ oder } v = \sqrt{\frac{1.44\,\text{MeV fm}}{mr}}$$

Elektron hat kinetische Energie $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1.44\,\text{MeV fm}}{2r}$,
potentielle Energie $V_e = -\frac{1.44\,\text{MeV fm}}{r}$

und totale Energie (nicht relativistisch)

$$E = V + T = -\frac{1.44\,\text{MeV fm}}{2r} = -\frac{0.72\,\text{MeV fm}}{r} = -\frac{0.72\,\text{eV nm}}{r}$$

↑ negativ: Elektron ist gebunden!

Experimentell bestimmt: 13.6 eV benötigt, um Was-

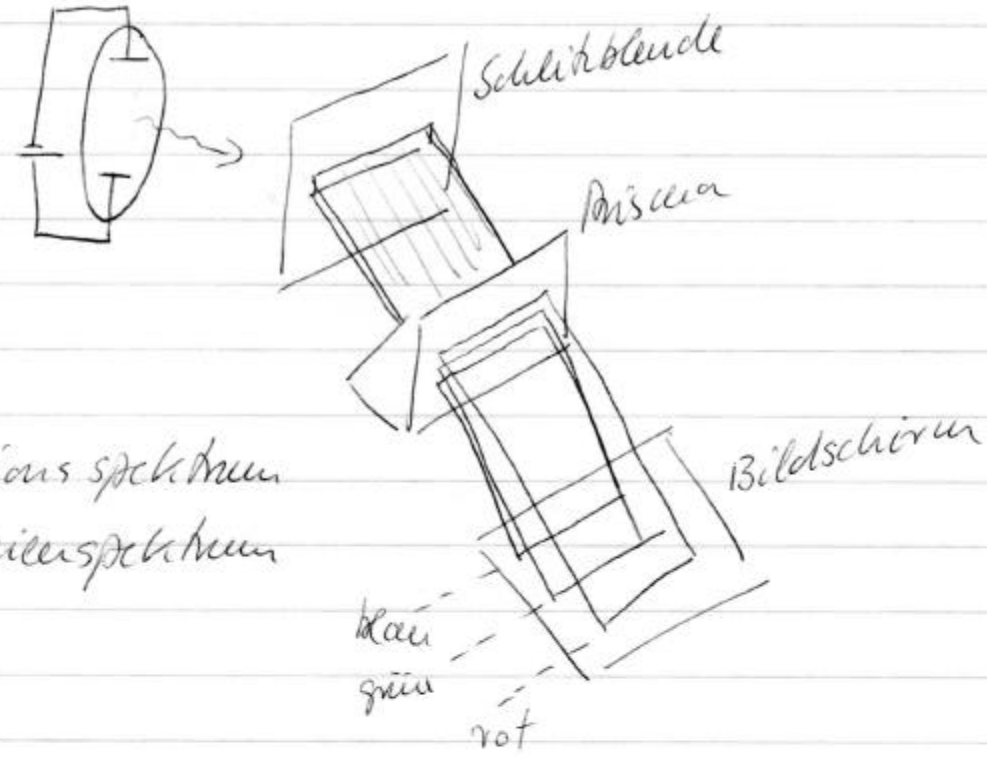
Wasserstoff zu ionisieren

$13.6\ eV = \frac{0.72\ eV\ nm}{r} \sim r = 0.53\ Å = 0.053\ nm$

$\equiv$ Bohr-Radius

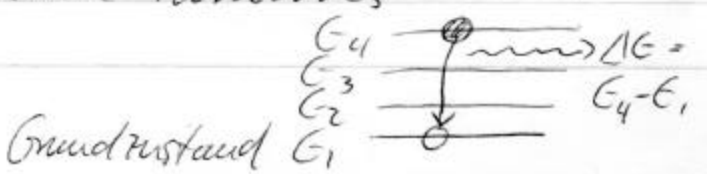
6.4. Atomare Spektren

Gas aus Atomen kann angeregt werden, z.B. durch elektrische Entladung; es emittiert Strahlung, die nur bestimmte Wellenlängen enthält und einen für das Element charakteristischen "Fingerabdruck" darstellt.

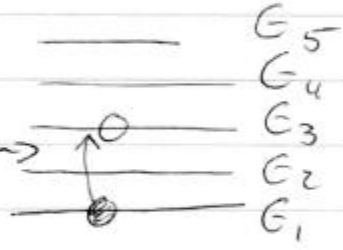


Emissionsspektrum
$\leftrightarrow$ Linienspektrum

diskrete
Atom hat viele Energiezustände. Elektrische Entladung regt atomares Elektron in ein höheres Energieniveau an. Nach kurzer Zeit fällt es unter Emission von Strahlung in den Grundzustand zurück. E_5 ——

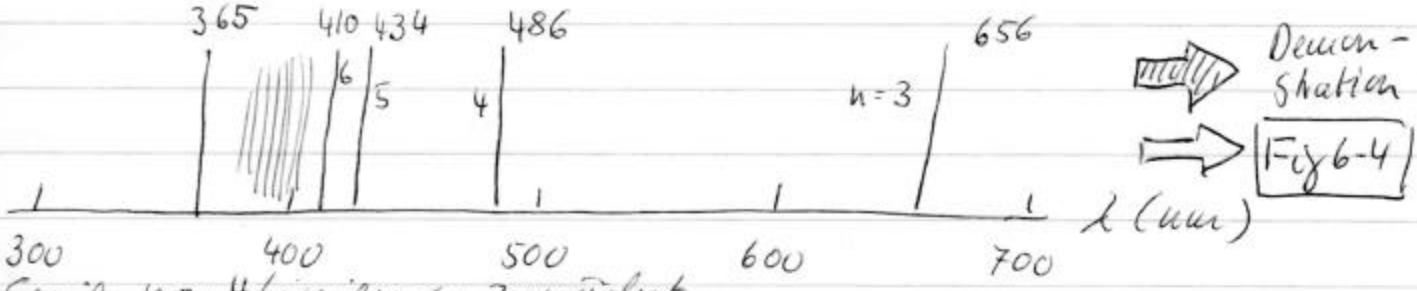


ähnliches wird: wenn weißes Spektrum von Wellenlängen eingestrahlt wird (weißes Licht) werden nur bestimmte Komponenten absorbiert, die dann im Spektrum fehlen (dunkle Linien im Absorptionsspektrum).



* Messung von Emissions- oder Absorptionsspektren → Information über Energieniveaus des Atoms

Wasserstoffspektrum: Emission oder Absorption im und nahe am sichtbaren Bereich:



Serie von 4 Linien ≠ zunächst mit abnehmender Wellenlänge kommen Linien sich immer näher und konvergieren gegen ein Limit der Serie bei 364.6 nm, zuerst von J. Balmer 1885 entdeckt "Balmer-Serie"

Balmer fand einfache Formel, die Wellenlängen beschreibt, nämlich $\lambda = \frac{C n^2}{n^2 - 4}$ mit $n = 3, 4, 5, 6$

$C = 364.56$ nm und Voraussage weiter Linien bei höherer Wellenlänge $n = 7, 8, \ldots \infty$ * später entdeckt.

Balmer generalisiert Formel $\rightarrow \lambda = \frac{C_m \, n^2}{n^2 - m^2}$

n, m ganze Zahlen und $n > m$
$m > 0$

Generalisierung der Balmerformel durch W. Ritz und J.R. Rydberg für andere Elemente

$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ R unterschiedlich für jedes Element

für Wasserstoff $R_H = 1.097 \cdot 10^7 / m$

Balmer-Serie $R_H = \frac{4}{C} = \frac{4}{364.6\,nm}$ ✓ und

$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\underbrace{\frac{1}{4}}_{\frac{1}{2^2}} - \frac{1}{n^2}\right)$ $n = 3, 4, \ldots \infty$

Später wurden weitere Serien für Wasserstoff entdeckt.

Serie im UV (Lyman-Serie) $\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ $n = ?, ?, \ldots$

zwischen 90 - 125 nm

Viele Serien im IR

Paschen-Serie $\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ $n = 4, 5, \ldots$ 0.7 - 1.8 µm

Brackett $\left(\frac{1}{4^2} \ldots\right)$ 1.5 - 4 µm

Pfund $\left(\frac{1}{5^2} \ldots\right)$

Verknüpfung von Spektrum und Energieniveaus zu Energieniveaus des Elektrons im Wasserstoffatom $\longleftrightarrow$ Bohr-Modell

6.5. Bohr-Modell des Atoms (1913)

Spektren werden erklärt mit 2 Annahmen

1) Elektron bewegt sich in kreisförmigen stationären Orbitalen um das Proton
Coulombkraft ↔ Zentripetalkraft
(Rutherford) $\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$ $\quad E = -\frac{0.72\ eV\,nm}{r}$

2) Nur Orbitale sind zulässig, in denen der Bahndrehimpuls ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$ ist. $\quad l = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

Drehimpulsquantisierung. Warum?
Problem: Ladung auf Kreisbahn beschleunigt $a_c = v^2/r$, sollte Strahlung (Bremsstrahlung) emittieren; d.h. Elektron sollte kontinuierlich Energie verlieren ⇝ Spirale nach innen, Kollaps des Atoms.
Bohr postuliert: Elektron in stationärem Orbital mit $l = n\hbar$ strahlt keine Energie ab, d.h. es ist stabil (Begründung später, siehe Kapitel 7, 8).

Bedingung für l → nur bestimmte Radien erlaubt.
$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$ ⇝ Kreisbahn vereinfacht zu $l = rp$
da $p \perp r$ und mit de Broglie $2\pi r = n\lambda$
$l = mvr = n\hbar$ ⇝ $r_n = \frac{n\hbar}{mv}$ oder $v = \frac{n\hbar}{mr_n}$

⇒ stehende Welle ⇒ Fig 6-5

Bemerke Ausdruck in kinetischer Energie

$$T_e = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{2} m_e \left(\frac{n\hbar}{m_e r_n}\right)^2 = \frac{0.72\ eV\,nm}{r_n} = \frac{e^2}{2 r_n}$$

$$\curvearrowright r_n = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} n^2 = \underbrace{\frac{(\hbar c)^2}{e^2 m_e c^2}}_{\frac{(197\ eV\,nm)^2}{1.44\ eV\,nm \cdot 5.11 \cdot 10^5\ eV}} n^2 = 0.053\ nm \\ = 0.53\ \text{Å} \equiv a_0$$

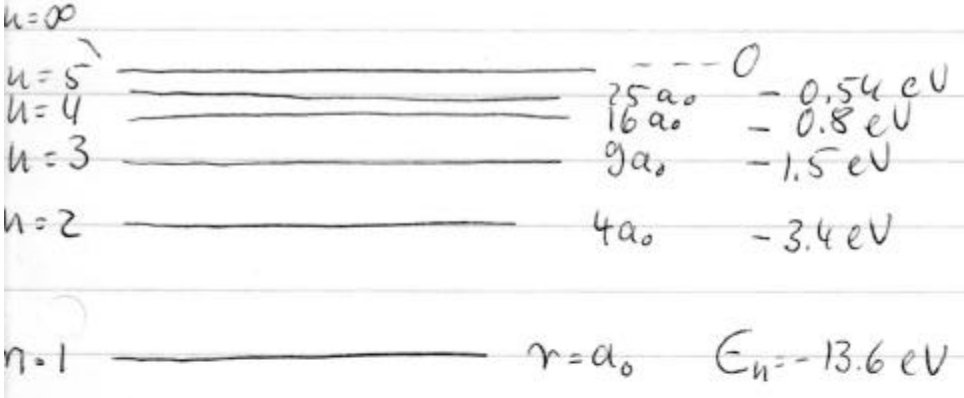
} Bohr-Radius

Erlaubte Radien für Elektron im Wasserstoff

$r_n = a_0 n^2$, also $r_1 = a_0$ $r_2 = 4a_0$ etc.

das bestimmt Energieniveaus zu

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} = -\frac{0.72\ eV\,nm}{0.053\ nm \cdot n^2} = -\frac{13.6\ eV}{n^2}$$



} zunehmend dichter Energieniveaus somit $E \to 0$

Energiedifferenzen zwischen zwei Zuständen E_n und E_m

$$E_m - E_n = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = -13.6\ eV \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \underbrace{\frac{13.6\ eV}{hc}}_{\frac{13.6\ eV}{1240\ eV\,nm} = 1.097 \cdot 10^7\ m^{-1}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

Rydbergkonstante R_H

$$= \frac{e^4 m_e c^2 \pi}{(\hbar c)^3}$$

z.B $n_1 = 2$ $n_2 = 1$ $\Delta E = \frac{13.6}{1}\,eV - \frac{13.6}{4}\,eV = (13.6 - 3.4)\,eV$

$= 10.2\,eV$

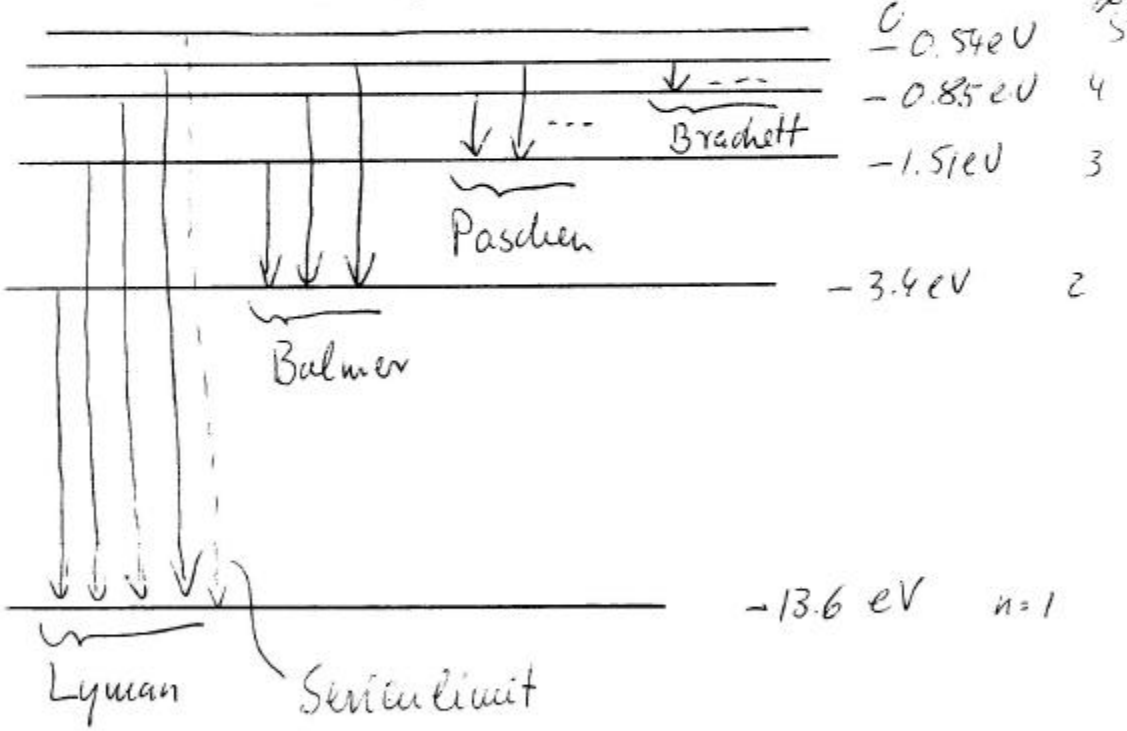
dazu gehört Wellenlänge $\lambda = \frac{1240\,eV nm}{10.2\,eV} = 121.6\,nm$

$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(1 - \frac{1}{2^2}\right)$ { längste Wellenlänge der Lyman Serie

alle Übergänge nach $n=1$ Lyman Serie
2 Balmer
3 Paschen

⇒ Fig 6-3

typische Lebensdauer $\tau = 10^{-8}\,s$
$\Delta E \cdot \tau \geq \hbar/2 = 3.3 \cdot 10^{-16}\,eVs \rightsquigarrow \Delta E / E_i \simeq 10^{-8}$



H. Bohr Nobelpreis 1922 für Bohr modell

Verallgemeinerung des Bohr-modells für Atome mit $Z > 1$, aber nur einem Elektron

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2 Z}{r^2} \quad \text{und} \quad mv r_n = n\hbar$$

$$\rightsquigarrow r_n = \frac{(\hbar c)^2 n^2}{e^2 \cdot m_e c^2 \cdot Z} = \frac{a_0}{Z} n^2$$

Radien kontrahiert um Faktor Z

Energieniveaus: $T = \frac{e^2 Z}{2 r_n}$ $\quad V = -\frac{e^2 Z}{r_n}$

$$E = -\frac{e^2 Z}{2 r_n}$$

setze r_n von oben ein $\rightarrow$ $E = -\frac{e^4 m_e c^2 Z^2}{2(\hbar c)^2} \frac{1}{n^2}$

$$= -13.6\ \text{eV}\ \frac{Z^2}{n^2}$$

anwendbar z.B. für einfach ionisiertes Helium, He^+, zweifach ionisiertes Lithium Li^{2+} etc. ...

Muonische Atome: statt Elektron kann ein Teilchen mit ganz ähnlichen Eigenschaften aber ca 200 mal größerer Masse, das Muon an Kern gebunden sein

$m_\mu c^2 = 106$ MeV $\rightarrow$ Bindungsenergie größer

wenn Masse Kern und Masse des 'elektronartigen' Teilchens nicht sehr verschieden, dann muß berücksichtigt werden, daß beide um den gemeinsamen Schwerpunkt rotieren

das wird korrekt berücksichtigt, wenn 'Elektronmasse' durch reduzierte Masse ersetzt wird, also

$$\mu = \frac{m_e m_n}{m_e + m_n} \approx m_e \quad \begin{matrix} 0.5107\ \mathrm{MeV} \\ 0.05\%\ \text{Korrektur} \end{matrix}$$

mit Nukleonmasse $m_n c^2 = 939\ \mathrm{MeV}$
$m_e c^2 = 0.511\ \mathrm{MeV}$

aber für Myon statt Elektron

$$\mu = \frac{107 \cdot 939}{107 + 939}\ \mathrm{MeV} = 96.1\ \mathrm{MeV}$$
10% Korrektur

Energie des gebundenen Myons

$$E_n = \underbrace{-2566.1\ \mathrm{eV}}_{\text{Faktor 189 stärker gebunden}} \frac{1}{n^2} = -2.6\ \mathrm{keV}\ \frac{1}{n^2}$$

und $r_n = \frac{(\hbar c)^2 n^2}{e^2 \mu} = 2.8 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{nm} \cdot n^2$ } Faktor 189 näher am Kern
$= 0.28\ \mathrm{pm} \cdot n^2$

nicht stabil!

Positronium: ähnlich wie Wasserstoff, aber Proton ersetzt durch positiv geladenes Teilchen wie Elektron, e^+ ← Positron. Gleiche Masse wie Elektron

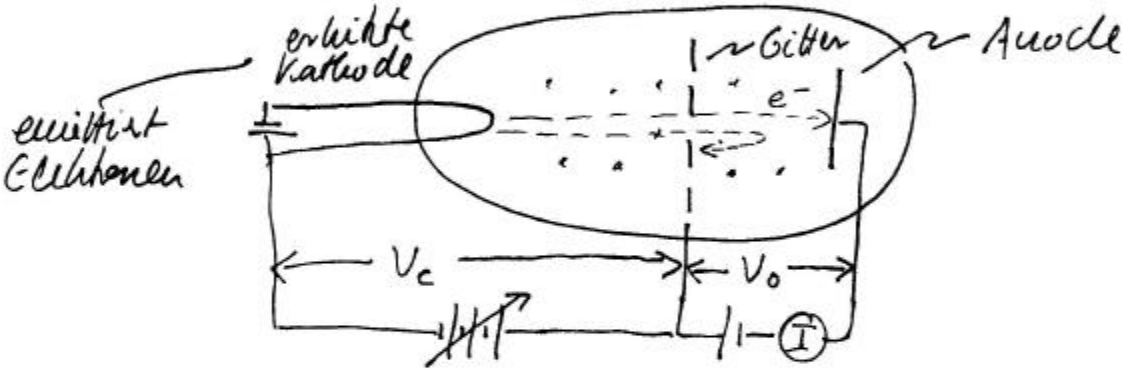
d.h. $\mu = \frac{m_e^2}{2 m_e} = \frac{m_e}{2}$ entsprechen

Radien Faktor 2 größer als Proton, Energien Faktor 2 geringer.

6.6. Franck - Hertz - Experiment

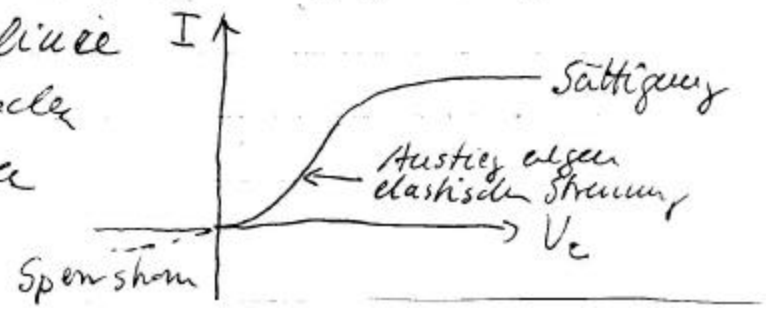
1914 wichtiges Experiment zur Atomstruktur
James Franck u. Gustav Hertz, gibt
zusätzliche Bestätigung des Bohrmodells
ein Jahr nachdem Modell vorgeschlagen
wurde. Inelastische Elektronenstreuung an
Hg-Atomen → elektronische Anregung Hg-Atom

- Vakuum Röhre mit 3 Elektroden (Triode)
gefüllt mit Quecksilberdampf

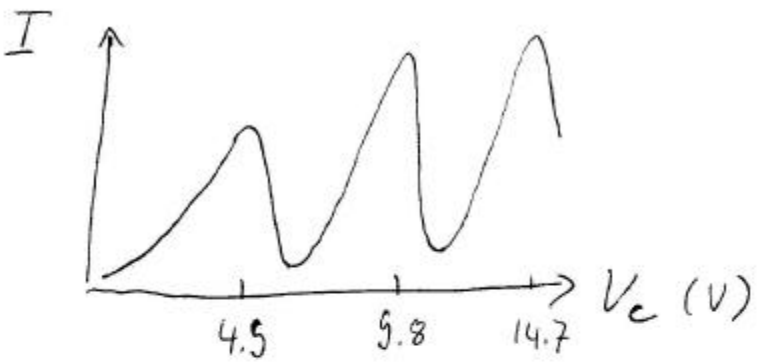


Elektronen werden auf Gitter zu beschleunigt
mit variabler Spannung V_c → kinetische
Energie am Gitter eV_c;
Zwischen Gitter und Anode konstantes, leicht
abstossendes Potential V_0, typisch 1.5 V
kinetische Energie an der Anode $eV_c - eV_0$
nur Elektronen mit minimaler kinetischer
Energie am Gitter kommen an und tragen
zum Strom I bei. Messen I gegen V_c

erwarte Diodenkennlinie
Strom sollte mit wachsender
V_c anwachsen und sättigen



Stattdessen fällt Strom rapide ab sobald $V_c = 4.9\,V$ erreicht; danach wieder Anstieg und bei $V_c = 9.8\,V = 2 \cdot 4.9\,V$ erneut Abfall



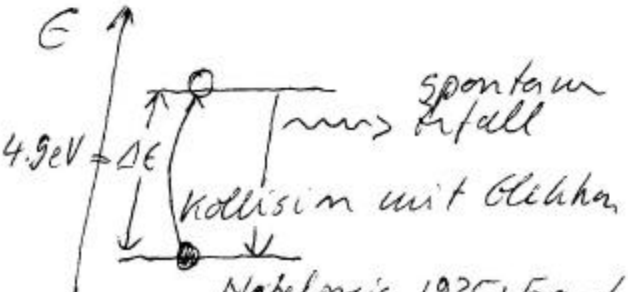
⇒ Fig 6-6

Interpretation: Wenn kinetische Energie der Elektronen 4.9 eV erreicht, können sie Quecksilberatome in angeregten Zustand versetzen. Direkt bei $V_c = 4.9\,V$ nur in direkter Nähe des Gitters möglich, mit zunehmendem V_c auch schon vorher → Strom fällt mit wachsendem V_c; schließlich haben Elektronen nach Anregung von Hg-Atom wieder genug kin. Energie um zu Anode zu kommen → Strom wächst wieder an. Bei $2 \cdot 4.9 = 9.8$ eV können sie auf ihrem Weg zwei Hg-Atome anregen → wieder Abfall von I.

$$T_{Anode} = eV_c - eV_a - \underbrace{\Delta E}_{\text{Anregungsenergie Hg, bzw } 2\times \ldots, \text{ etc}}$$
4.9 eV

Ungefähre Wellenlänge $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240\,eV\,nm}{4.9\,eV} = 253\,nm$

stärkste Linie im Quecksilberspektrum.



In einem 2. Experiment weist Franck auch die Emission von Photonen mit 4.9 eV bzw 253 nm nach Anregung nach.

Nobelpreis 1925: Franck und Hertz

6.7. Röntgenstrahlung

1895 W. Röntgen Entdeckung (siehe kap. 3), jetzt quantitatives Verständnis möglich

1913 begann Henry Moseley systematische Studie von Röntgenstrahlung alle bekannten Elemente von Al bis Gold durch Bombardierung m. Elektronen. Messung d. Wellenlänge durch Bragg Technik: Streuung an Kristallgitter (Interferenz $n\lambda = 2d \sin\vartheta$).

Beobachtung: jedes Element produziert 2 Wellenlängen mit unterschiedlicher Intensität K_α (stärker) u. K_β (schwächer). Für schwereren Elementen 5 zusätzliche Linien $L_\alpha, \dots L_\varepsilon$

Frequenz korreliert mit Ordnungszahl Z nach $\nu = a(Z-b)^2 \sim \sqrt{\nu}$ gegen Z linear

für K-Linien $b = 1$ } ähnlich. Fig 6-7
für L-Linien $b = 7.4$ } für K_α, K_β, etc.

mit Bohrmodell entstehen wie
K-Linien entstehen dadurch daß Elektron aus $n=1$ Zustand herausgeschlagen wird und Elektron aus $n=2$ (K_α) oder $n=3$ herunterfällt (K_β)

und Emission der Energiedifferenz als Photon (Röntgenstrahlung). Elektron sieht Kernladung vermindert um 1 durch 2. Elektron in n=1 Niveau.
L-Linien: Übergang auch n=2 von n=3 (L_α), n=4 → 2 (L_β) etc. wurden schon daß 2 Elektronen in n=1 und restliche 7 Elektronen in n=2 effektive Abschirmung wie (Z-7.4) bewirken.

Fehlende Elemente: Moseley konnte z.B. zeigen daß Z=43, 61, 75 fehlten Elemente Tc, Pm, Re wurden später entdeckt bzw. hergestellt (kein natürlichen Isotope von Technetium). (Promethium auch instabil, Rhenium stabiles Isotop)
Typische Energien von Röntgenstrahlen:
K-Linien

$$E_n = -\frac{13.6\,eV\,(Z-1)^2}{n^2}$$

$$\Rightarrow \Delta E = E_2 - E_1 = -13.6\,eV\,(Z-1)^2\left(1-\frac{1}{4}\right)$$

typischer Energiebereich z.B. Cu Z=29 → 8 keV
Pb Z=82 → 67 keV

NB: werden später sehen, daß Berechnung der Abschirmung wegen komplizierter räumlicher Verteilung nicht so einfach ist. Wenn man allerdings Energiedifferenzen betrachtet, wo sich, kompensieren sich Abweichungen z.T. und gute Übereinst. Moseley's Resultat mit Bohr-Modell

7. Quantenmechanische Lösung für das Wasserstoffatom

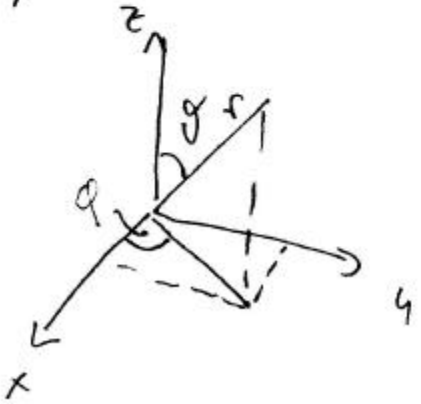
Bohr Modell nicht konsistent mit Heisenbergscher Unschärferelation: Elektron in kreisförmigem Orbital $\Delta r \cdot \Delta p_r \geq \hbar/2$
$\Delta r = 0$; da Bewegung keine radiale Komponente hat $\Rightarrow p_r = 0 \Rightarrow \Delta p_r = 0$
(siehe auch Problem m. Bremsstrahlung).

7.1. Schrödingergleichung mit attraktivem Coulomb-Potential

Proton-Elektron System $V = -\frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x,y,z) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\Psi(x,y,z) = E\,\Psi(x,y,z)$$

kompliziert da Separation in Variable x, y, z nicht möglich. Sphärische Symmetrie des Potentials legt Koordinatenwechsel nahe $\rightarrow$ sphärische- o. Kugel-Koordinaten



$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\vartheta$$

Differentiale

$$dx = \sin\vartheta\cos\varphi\, dr + r\cos\vartheta\cos\varphi\, d\vartheta - r\sin\vartheta\sin\varphi\, d\varphi$$
$$dy = \sin\vartheta\sin\varphi\, dr + r\cos\vartheta\sin\varphi\, d\vartheta + r\sin\vartheta\cos\varphi\, d\varphi$$
$$dz = \cos\vartheta\, dr - r\sin\vartheta\, d\vartheta \quad (+\ 0\, d\varphi)$$

bzw

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ d\vartheta \\ d\varphi \end{pmatrix}$$

damit wird $dV = dx\,dy\,dz = r^2\sin\vartheta\, dr\, d\vartheta\, d\varphi$
$= r^2 dr\, d\cos\vartheta\, d\varphi$

Laplace Operator

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} =$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Wieder Annahme, daß Wellenfunktion faktorisiert $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)$
$\rightsquigarrow$ Schrödinger-Gleichung zerfällt in 3 Gleichungen.

1) Setze ∇^2 und Produktansatz für Ψ ein und multipliziere mit $\frac{r^2}{R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{1}{\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\Big)-e^2r-\epsilon r^2=0$$

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+\epsilon\right)=-\frac{1}{\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\sin\vartheta}\left[\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

linke Seite hängt nur von r ab, rechte Seite nur von ϑ und φ.

Beide Seiten müssen konstant sein $\equiv 1$

2) Multipliziere rechte Seite m. $\sin^2\vartheta$

$$\underbrace{\frac{\sin\vartheta}{\Theta(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)\Theta(\vartheta)+1\sin^2\vartheta}_{\text{hängt nur von }\vartheta\text{ ab}}=\underbrace{-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi)}_{\text{hängt nur v. }\varphi\text{ ab}}\equiv \text{konst}=m_\ell^2$$

☞ 3 Gleichungen, je in einer Variable

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m_\ell^2\Phi(\varphi)=0 \qquad (1)$$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)+1\,\Theta(\vartheta)-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\vartheta}\Theta(\vartheta)=0 \qquad (2)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+\epsilon\right)-\frac{1}{r^2}\right]R(r)=0 \qquad (3)$$

3 Differentialgleichungen, nur Gleichung in r hängt vom Potential ab. ⇨ alle Probleme in.

sphärischer Symmetrie werden identische Lösungen für $\Phi(\varphi)$ und $\Theta(\vartheta)$ haben!

Lösungen für Gleichung (1):

$$\Phi(\varphi) = A \exp(i m_\ell \varphi) \quad \sim \quad \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m_\ell^2 \Phi(\varphi)$$

Lösungen charakterisiert durch Konstante oder Quantenzahl m_ℓ

da $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \longrightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ ganzzahlig

m_ℓ: "magnetische Quantenzahl"

Lösungen für Gleichung (2): resultieren 2 Quantenzahlen die $\Theta(\vartheta)$ charakterisieren. m_ℓ kann von (1) übernommen werden. Gl. (2) hat Lösungen für $\Lambda = \ell(\ell+1)$ wobei ℓ ganzzahlig und $\geq m_\ell$

für ein gegebenes $\ell \longrightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$

ℓ: "orbitale (Bahndrehimpuls-) Quantenzahl"
"Quantenzahl d. Bahndrehimpulses"

Funktionen $\Theta(\vartheta)$ sind Polynome in $\cos\vartheta$ "assoziierte Legendre Polynome" $P_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta)$

$\ell = 0 \quad m_\ell = 0 \quad P_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$\ell = 1 \quad m_\ell = 0 \quad P_{1,0} = \sqrt{3/2}\cos\vartheta$

7. Quantenmechanische Lösung für das Wasserstoffatom

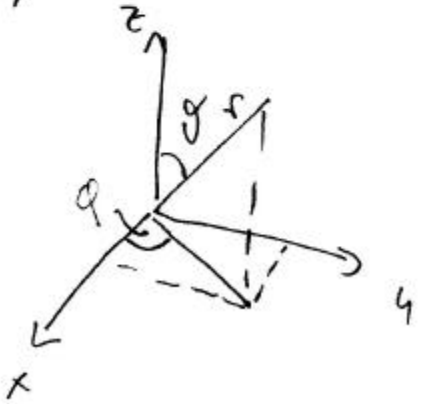
Bohr Modell nicht konsistent mit Heisenbergscher Unschärferelation: Elektron in kreisförmigem Orbital $\Delta r \cdot \Delta p_r \geq \hbar/2$
$\Delta r = 0$; da Bewegung keine radiale Komponente hat $\Rightarrow p_r = 0 \Rightarrow \Delta p_r = 0$
(siehe auch Problem m. Bremsstrahlung).

7.1. Schrödingergleichung mit attraktivem Coulomb-Potential

Proton-Elektron System $V = -\frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

kompliziert da Separation in Variable x, y, z nicht möglich. Sphärische Symmetrie des Potentials legt Koordinatenwechsel nahe $\rightarrow$ sphärische- o. Kugel-Koordinaten



$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$
$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$
$z = r \cos\vartheta$

Differentiale

$$dx = \sin\vartheta\cos\varphi\, dr + r\cos\vartheta\cos\varphi\, d\vartheta - r\sin\vartheta\sin\varphi\, d\varphi$$
$$dy = \sin\vartheta\sin\varphi\, dr + r\cos\vartheta\sin\varphi\, d\vartheta + r\sin\vartheta\cos\varphi\, d\varphi$$
$$dz = \cos\vartheta\, dr - r\sin\vartheta\, d\vartheta \quad (+\ 0\, d\varphi)$$

bzw

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ d\vartheta \\ d\varphi \end{pmatrix}$$

damit wird $dV = dx\,dy\,dz = r^2\sin\vartheta\, dr\, d\vartheta\, d\varphi$
$= r^2 dr\, d\cos\vartheta\, d\varphi$

Laplace Operator

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} =$$
$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

siehe z.B. V. Riech Mathe. z.d. Exp. physik vorlesungen Kap. 10
o. Lang und Pucker, Mathe. Methoden in der Physik Kap. 8

Wieder Annahme, daß Wellenfunktion faktorisiert $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)$
$\rightsquigarrow$ Schrödinger-Gleichung zerfällt in 3 Gleichungen.

1) Setze ∇^2 und Produktansatz für Ψ ein und multipliziere mit $\frac{r^2}{R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{1}{\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\Big)-e^2r-\epsilon r^2=0$$

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+\epsilon\right)=-\frac{1}{\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\sin\vartheta}\left[\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

linke Seite hängt nur von r ab, rechte Seite nur von ϑ und φ.

Beide Seiten müssen konstant sein $\equiv 1$

2) Multipliziere rechte Seite m. $\sin^2\vartheta$

$$\underbrace{\frac{\sin\vartheta}{\Theta(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)\Theta(\vartheta)+1\sin^2\vartheta}_{\text{hängt nur von }\vartheta\text{ ab}}=\underbrace{-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi)}_{\text{hängt nur v. }\varphi\text{ ab}}\equiv\text{konst}=m_\ell^2$$

☞ 3 Gleichungen, je in einer Variable

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m_\ell^2\Phi(\varphi)=0 \qquad (1)$$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)+1\,\Theta(\vartheta)-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\vartheta}\Theta(\vartheta)=0 \qquad (2)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+\epsilon\right)-\frac{1}{r^2}\right]R(r)=0 \qquad (3)$$

3 Differentialgleichungen, nur Gleichung in r hängt vom Potential ab. ⇨ alle Probleme in.

sphärischer Symmetrie werden identische Lösungen für $\Phi(\varphi)$ und $\Theta(\vartheta)$ haben!

Lösungen für Gleichung (1):

$$\Phi(\varphi) = A \exp(i m_\ell \varphi) \quad \sim \quad \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m_\ell^2 \Phi(\varphi)$$

Lösungen charakterisiert durch Konstante oder Quantenzahl m_ℓ

da $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \longrightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ ganzzahlig

m_ℓ: "magnetische Quantenzahl"

Lösungen für Gleichung (2): involvieren 2 Quantenzahlen die $\Theta(\vartheta)$ charakterisieren. m_ℓ kann von (1) übernommen werden. Gl. (2) hat Lösungen für $\Lambda = \ell(\ell+1)$ wobei ℓ ganzzahlig und $\geq m_\ell$

für ein gegebenes $\ell \longrightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$

ℓ: "orbitale (Bahndrehimpuls-) Quantenzahl"
"Quantenzahl d. Bahndrehimpulses"

Funktionen $\Theta(\vartheta)$ sind Polynome in $\cos\vartheta$ "assoziierte Legendre Polynome" $P_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta)$

$\ell = 0 \quad m_\ell = 0 \quad P_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$\ell = 1 \quad m_\ell = 0 \quad P_{1,0} = \sqrt{3/2}\cos\vartheta$

$\ell = 1 \quad m_\ell = \pm 1 \quad P_{1,1} = \sqrt{3}/2 \sin\vartheta$

$\ell = 2 \quad m_\ell = 0 \quad P_{2,0} = \sqrt{5/8}\,(3\cos^2\vartheta - 1)$

$\ell = 2 \quad m_\ell = \pm 1 \quad P_{2,1} = \sqrt{15}/2 \sin\vartheta\cos\vartheta$

$\ell = 2 \quad m_\ell = \pm 2 \quad P_{2,2} = \sqrt{15}/4 \sin^2\vartheta$

} d.h. ℓ gibt an welche Potenz von sin/cos im Polynom steht

Lösungen für Gleichung (3) involvieren ebenfalls 2 Konstante $\Lambda = \ell(\ell+1)$ (von Gl. (2)) und E.

Lösungen von Gl. (3) für $E_n = -\frac{m_e c^2 e^4}{2(\hbar c)^2}\frac{1}{n^2}$

$= -13.6\,\mathrm{eV}\,\frac{1}{n^2}$ oder jedes positive E

➡ gebundene Zustände exakt wie im Bohr-Modell!

zusätzliche Bedingung: n (ganzzahlig) $\geq \ell + 1$

oder für gegebenes $n \rightsquigarrow \ell = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$

$n = 1, 2, 3, \ldots$ "Hauptquantenzahl"

Funktionen $R(r)$, die Gl. (3) lösen

$R_{n,\ell}(r) \propto \left(\frac{r}{n a_0}\right)^\ell \exp(-r/n a_0)\, \underbrace{L_{n,\ell}}$

Polynome in r/a_0
"assoziierte Laguerre Polynome"
$1, (2 - \frac{r}{a_0}), \ldots$ wobei n Potenz von $\frac{r}{a_0}$ angibt $n=1 \rightsquigarrow 0$
$2 \quad 1$
$3 \quad 2 \ldots$

zusammenfassend: Lösung d. Schrödinggleichung

m. Coulombpotential und in 3 Dimensionen charakterisiert durch 3 Quantenzahlen

$n = 1, 2, 3, \ldots$ Hauptquantenzahl
$\ell = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$ Drehimpulsquantenzahl
$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$ magnetische Quantenzahl

radiale Wellenfunktion $R_{n,\ell}(r)$
polare " $\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)$
azimuthale " $\Phi_{m_\ell}(\varphi)$

$\Psi = R_{n\ell} \cdot \Theta_{\ell,m_\ell} \cdot \Phi_{m_\ell}$

$\Theta \cdot \Phi$ → Kugelfunktionen $Y_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta, \varphi)$

löst weitgehend. Teil für jedes Problem m. sphärischer Symmetrie

genauere Diskussion, wie räumliche Verteilung ist → 7.3

7.2. Physikalische Bedeutung d. Quantenzahlen n, ℓ, m_ℓ

a) Hauptquantenzahl n: charakterisiert Energie des gebundenen Elektrons $E_n = -13.6\,\text{eV}/n^2$
Quantisierung d. Energie $\Leftrightarrow n$, unabhängig von ℓ, m_ℓ

b) Drehimpulsquantenzahl ℓ:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}\right]R = ER$$

Lösungen für radiale Bewegung sollten nur von r abhängen, aber E ist totale Energie = kin. + pot. Energie
kinetische Energie: radiale Bewegung und orbitale (Bahn-) Bewegung

m. Coulombpotential und in 3 Dimensionen charakterisiert durch 3 Quantenzahlen

$n = 1, 2, 3, \ldots$ Hauptquantenzahl
$\ell = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$ Drehimpulsquantenzahl
$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$ magnetische Quantenzahl

radiale Wellenfunktion $R_{n,\ell}(r)$
polare " $\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)$
azimuthale " $\Phi_{m_\ell}(\varphi)$

$\Psi = R_{n\ell} \cdot \Theta_{\ell,m_\ell} \cdot \Phi_{m_\ell}$

$\Theta \cdot \Phi$ → Kugelfunktionen $Y_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta, \varphi)$

löst weitgehend. Teil für jedes Problem m. sphärischer Symmetrie

genauere Diskussion, wie räumliche Verteilung ist → 7.3

7.2. Physikalische Bedeutung d. Quantenzahlen n, ℓ, m_ℓ

a) Hauptquantenzahl n: charakterisiert Energie des gebundenen Elektrons $E_n = -13.6\,\text{eV}/n^2$
Quantisierung d. Energie $\Leftrightarrow n$, unabhängig von ℓ, m_ℓ

b) Drehimpulsquantenzahl ℓ:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}\right]R = ER$$

Lösungen für radiale Bewegung sollten nur von r abhängen, aber E ist totale Energie = kin. + pot. Energie
kinetische Energie: radiale Bewegung und orbitale (Bahn-) Bewegung

$$E = T_r + T_0 + V = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{p_r^2}{2m} - \frac{L^2}{2mr^2}\right]R = 0$$

kann nur rein radiale Gleichung sein wenn

$$T_0 = \frac{L^2}{2mr^2} = \frac{1}{2}mv_0^2 \equiv \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \qquad L = mv_0 \cdot r$$

$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ Quantenzahl l bestimmt Länge des (Bahn) Drehimpulsvektors. Drehimpuls ist quantisiert

z.B. Elektron mit $l=2$ hat Bahndrehimpuls von Größe $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{2(2+1)} = 1.6\cdot10^{-15}\,eVs$
$= 2.6\cdot10^{-34}\,Js$

zum Vergleich: Bahndrehimpuls d. Erde $2.7\cdot10^{40}\,Js$
d.h. bei makroskopischen Objekten Quantisierung des Bahndrehimpulses nicht beobachtbar.

Spektroskopische Notation für Zustände im Atom mit Zahl (n) und Buchstaben (für l)

$l=0 \to s$
$1 \quad p$
$2 \quad d$
$3 \quad f$

} von früher Klassifikation der assoziierten Spektrallinien
s = sharp p = principal
d = diffuse f = fundamental

n=1	1s	–	–	–	–	–
2	2s	2p	–	–	–	–
3	3s	3p	3d	–	–	–
4	4s	4p	4d	4f	–	–
5	5s	5p	5d	5f	5g	–
	l=0	1	2	3	4	5

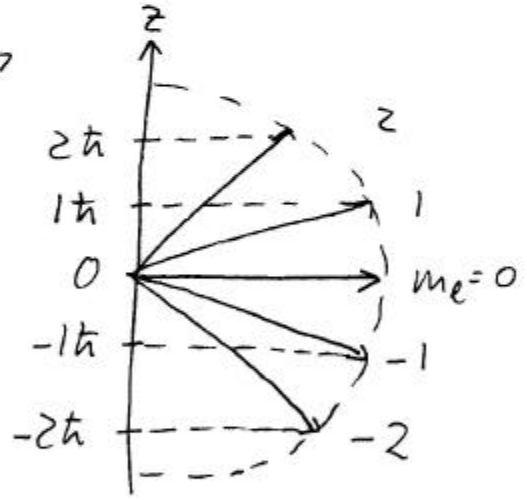
c) magnetische Quantenzahl m_ℓ
ℓ bestimmt Länge des Bahndrehimpulsvektors $\vec{L}$. $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ senkrecht zur Ebene der Bewegung

m_ℓ charakterisiert <u>Richtung</u> von $\vec{L}$ im Raum.

Definiere eine Vorzugsrichtung (z.B. durch Anlegen eines externen elektrischen oder magnetischen Feldes) $\equiv$ z-Richtung
$L_z = |\vec{L}| \cos\vartheta = m_\ell \hbar$

nicht alle möglichen Orientierungen der Bahnbewegung d. Elektrons im Raum erlaubt sondern nur solche, die z-Komponente ergeben, die ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$

z.B. $\ell = 2$ $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{2 \cdot 3}$
$= \sqrt{6}\,\hbar$



$\vec{L}$ präzediert (schnell) um z-Achse mit fester z-Projektion.

<u>Bemerkung</u>: im Gegensatz zum Bohr Modell ist für gegebene Hauptquantenzahl n Länge des Bahndrehimpulsvektors nicht $n \cdot \hbar$ sondern höchstens (für $\ell = n-1$) $\hbar\sqrt{n(n-1)}$ $n = 3$ $|\vec{L}|_{max} = \hbar\sqrt{6} = 2.3\,\hbar$
$n = 100$ $= \hbar\sqrt{99 \cdot 100} \approx 100\,\hbar$

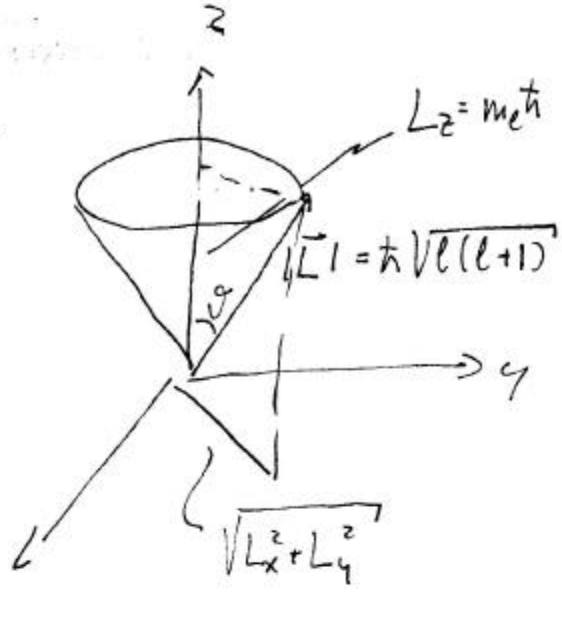
aber Bahndrehimpuls kann immer auch kleiner, z.B. gleich Null, sein. Aber Projektion auf z-Achse ist ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$!

Drehimpulsvektor präzediert um z-Achse

$$\cos\vartheta = \frac{m_\ell}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}$$

$$L_x^2 + L_y^2 = |\vec{L}|^2 - L_z^2$$

$$= \hbar^2\left(\ell(\ell+1) - m_\ell^2\right)$$



aus Unschärferelation verbietet, daß noch eine weitere Komponente von $\vec{L}$ genau bekannt ist. z-Komponente und Länge von $\vec{L}$ genau bekannt, azimuthaler Winkel φ total unbestimmt → schnelle Präzession von $\vec{L}$ um z-Achse

d) Entartung der Energieniveaus

Energie hängt nur von n ab, nicht von ℓ und m_ℓ. Für jedes Energieniveau E_n gibt es eine Anzahl x von verschiedenen Zuständen des Elektrons, jeder charakterisiert durch seine eigene Wellenfunktion, d.h. räumliche Verteilung des Elektrons.
Dieser Zustand (Energieniveau) x-fach entartet. Zustand charakterisiert durch Satz von Quantenzahlen n, ℓ, m_ℓ

n	ℓ	m_ℓ	$\times$	
1	0	0	1	einfach entartet
2	0	0	} 4	vierfach "
	1	$0, \pm 1$		
3	0	0	} 9	neunfach "
	1	$0, \pm 1$		
	2	$0, \pm 1, \pm 2$		
4			$9+7=16$	
⋮			⋮	
n			n^2	

jedes Niveau ist n^2-fach entartet

↑ etc.

$n=3$: $(3,1,0)$ $(3,1,0)$ $(3,1,1)$ $(3,1,-1)$ $(3,2,0)$ $(3,2,1)$ $(3,2,-1)$ $(3,2,2)$ $(3,2,-2)$ — 1.5 eV

$n=2$: $(2,0,0)$ $(2,1,0)$ $(2,1,1)$ $(2,1,-1)$ — 3.4 eV

$n=1$: $(1,0,0)$ — 13.6 eV

(n, ℓ, m_ℓ)

7.3. Wasserstoff Wellenfunktionen

$$\Psi_{n,\ell,m_\ell}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n,\ell}(r)\,\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)\,\Phi_{m_\ell}(\varphi)$$

n	ℓ	m_ℓ	$R(r)$	$\Theta(\vartheta)$	$\Phi(\varphi)$
1	0	0	$2a_0^{-3/2}\exp(-r/a_0)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2\pi}$
2	0	0	$1/(2a_0)^{3/2}(2-r/a_0)\exp(-r/2a_0)$	"	"

2	1	0	$1/(\sqrt{3}(2a_0)^{3/2})$	$r/a_0 \exp(-r/2a_0)$	$\sqrt{3/2}\cos\vartheta$	$1/\sqrt{2\pi}$
2	1	± 1	"		$\sqrt{3}/2 \sin\vartheta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\pm i\varphi)$

generelle Struktur:

$$\Psi_{n,\ell,m_\ell} \propto \left(\frac{r}{na_0}\right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n,\ell} P_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta) \exp(i m_\ell \varphi)$$

$$\Psi_{3,0,0} = C_1 \cdot \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0)$$

$$\Psi_{3,1,0} = C_2 \left(\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0) \cos\vartheta$$

$$\Psi_{3,2,0} = C_3 \left(\frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0)(3\cos^2\vartheta - 1)$$

Wahrscheinlichkeit Elektron zu finden → gegeben durch Quadrat d. Wellenfunktion.

z.B. Wahrscheinlichkeit in kleinem Intervall zwischen x und $x+dx$

$$dP(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)\,dx = |\Psi|^2 dx$$

oder in kleinem Volumenelement $dV = dx\,dy\,dz$ um x, y, z

$$dP(x,y,z) = |\Psi|^2 dx\,dy\,dz$$

in sphärischen Koordinaten

$$dP(r,\vartheta,\varphi) = |\Psi|^2 r^2 dr \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$$

oder

$$dP(r,\vartheta,\varphi) = |R_{n,\ell}(r)|^2 |\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)|^2 |\Phi_{m_\ell}(\varphi)|^2 r^2 dr \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$$

Wahrscheinlichkeit Elektron zwischen r und $r+dr$, ϑ und $\vartheta+d\vartheta$, φ und $\varphi+d\varphi$ zu finden.

radiale Wahrscheinlichkeitsdichte: Wahrscheinlichkeit Elektron zwischen r und

7. Quantenmechanische Lösung für das Wasserstoffatom

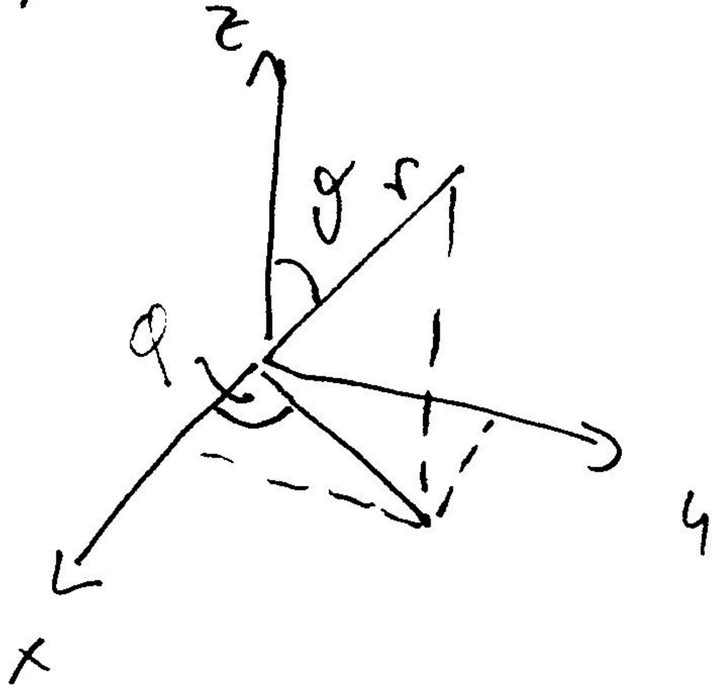
Bohr Modell nicht konsistent mit Heisenbergscher Unschärferelation: Elektron in kreisförmigem Orbital $\Delta r \cdot \Delta p_r \geq \hbar/2$
$\Delta r = 0$; da Bewegung keine radiale Komponente hat $\Rightarrow p_r = 0 \Rightarrow \Delta p_r = 0$
(siehe auch Problem m. Bremsstrahlung).

7.1. Schrödinger Gleichung mit attraktivem Coulomb-Potential

Proton-Elektron System $V = -\frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z)$$

kompliziert da Separation in Variable x, y, z nicht möglich. Sphärische Symmetrie des Potentials legt Koordinatenwechsel nahe $\rightarrow$ sphärische- o. Kugel-Koordinaten



$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$
$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$
$z = r \cos\vartheta$

Differentiale

$$dx = \sin\vartheta\cos\varphi\, dr + r\cos\vartheta\cos\varphi\, d\vartheta - r\sin\vartheta\sin\varphi\, d\varphi$$
$$dy = \sin\vartheta\sin\varphi\, dr + r\cos\vartheta\sin\varphi\, d\vartheta + r\sin\vartheta\cos\varphi\, d\varphi$$
$$dz = \cos\vartheta\, dr - r\sin\vartheta\, d\vartheta \quad (+\ 0\, d\varphi)$$

bzw

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ d\vartheta \\ d\varphi \end{pmatrix}$$

damit wird $dV = dx\,dy\,dz = r^2\sin\vartheta\, dr\, d\vartheta\, d\varphi$
$= r^2 dr\, d\cos\vartheta\, d\varphi$

Laplace Operator

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} =$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

siehe z.B. V. Rieck Math. z. d. Exp. physik vorlesungen Kap. 10
O. Lang und Pucker, Math. Methoden in der Physik Kap. 8

Wieder Annahme, daß Wellenfunktion faktorisiert $\Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)$
$\rightsquigarrow$ Schrödinger-Gleichung zerfällt in 3 Gleichungen.

1) Setze ∇^2 und Produktansatz für Ψ ein und multipliziere mit $\frac{r^2}{R(r)\,\Theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{1}{\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\Big)-e^2r-\epsilon r^2=0$$

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+\epsilon\right)=-\frac{1}{\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)\sin\vartheta}\left[\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

linke Seite hängt nur von r ab, rechte Seite nur von ϑ und φ.

Beide Seiten müssen konstant sein $\equiv 1$

2) Multipliziere rechte Seite m. $\sin^2\vartheta$

$$\underbrace{\frac{\sin\vartheta}{\Theta(\vartheta)}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)\Theta(\vartheta)+1\sin^2\vartheta}_{\text{hängt nur von }\vartheta\text{ ab}}=\underbrace{-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi)}_{\text{hängt nur v. }\varphi\text{ ab}}\equiv \text{konst} = m_\ell^2$$

☞ 3 Gleichungen, je in einer Variable

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m_\ell^2\Phi(\varphi)=0 \qquad (1)$$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\Theta(\vartheta)}{d\vartheta}\right)+1\,\Theta(\vartheta)-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\vartheta}\Theta(\vartheta)=0 \qquad (2)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{r}+\epsilon\right)-\frac{1}{r^2}\right]R(r)=0 \qquad (3)$$

3 Differentialgleichungen, nur Gleichung in r hängt vom Potential ab. ⇒ alle Probleme in.

sphärischer Symmetrie werden ideentische Lösungen für $\Phi(\varphi)$ und $\Theta(\vartheta)$ haben!

Lösungen für Gleichung (1):

$$\Phi(\varphi) = A\, e^{i m_\ell \varphi} \quad \rightsquigarrow \quad \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m_\ell^2 \Phi(\varphi)$$

Lösungen charakterisiert durch Konstante und Quantenzahl m_ℓ

da $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \longrightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

ganzzahlig

m_ℓ: "magnetische Quantenzahl"

Lösungen für Gleichung (2): wir können 2 Quantenzahlen die $\Theta(\vartheta)$ charakterisieren. m_ℓ kann von (1) übernommen werden. Gl. (2) hat Lösungen für $\lambda = \ell(\ell+1)$ wobei ℓ ganzzahlig und $\geq m_\ell$

für ein gegebenes $\ell \rightarrow m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$

ℓ: "Bahndrehimpuls-orbitale Quantenzahl"
"Quantenzahl d. Bahndrehimpulses"

Funktionen $\Theta(\vartheta)$ sind Polynome in $\cos\vartheta$ "assoziierte Legendre Polynome" $P_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta)$

$\ell = 0 \quad m_\ell = 0 \quad P_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$\ell = 1 \quad m_\ell = 0 \quad P_{1,0} = \sqrt{3/2}\cos\vartheta$

$\ell = 1 \quad m_\ell = \pm 1 \qquad P_{1,1} = \sqrt{3}/2 \sin\vartheta$

$\ell = 2 \quad m_\ell = 0 \qquad P_{2,0} = \sqrt{5/8}\,(3\cos^2\vartheta - 1)$

$\ell = 2 \quad m_\ell = \pm 1 \qquad P_{2,1} = \sqrt{15}/2 \sin\vartheta\cos\vartheta$

$\ell = 2 \quad m_\ell = \pm 2 \qquad P_{2,2} = \sqrt{15}/4 \sin^2\vartheta$

} d.h. ℓ gibt an welche Potenz von $\sin/\cos$ ein Polynom steht

Lösungen für Gleichung (3) involvieren ebenfalls 2 Konstante $\Lambda = \ell(\ell+1)$ (von Gl. (2)) und E.

Lösungen von Gl. (3) für $E_n = -\dfrac{m_e c^2 e^4}{2(\hbar c)^2}\,\dfrac{1}{n^2}$

$= -13.6\,\text{eV}\,\dfrac{1}{n^2}$ und jedes positive E

➡ gebundene Zustände exakt wie im Bohr-Modell!

zusätzliche Bedingung: n (ganzzahlig) $\geq \ell + 1$

und für gegebenes $n \rightsquigarrow \ell = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$

$n = 1, 2, 3, \ldots$ "Hauptquantenzahl"

Funktionen $R(r)$, die Gl. (3) lösen

$R_{n,\ell}(r) \propto \left(\dfrac{r}{n a_0}\right)^\ell \exp(-r/n a_0)\, \underbrace{L_{n,\ell}}$

Polynome in r/a_0

"assoziierte Laguerre Polynome"

$1, (2 - \frac{r}{a_0})$, wobei n Potenz von $\frac{r}{a_0}$ angibt $\quad n=1 \rightsquigarrow 0$

$2 \quad 1$

$3 \quad 2 \ldots$

Zusammenfassend: Lösung d. Schrödingergleichung

m. Coulombpotential und in 3 Dimensionen
charakterisiert durch 3 Quantenzahlen

$n = 1, 2, 3, \ldots$ Hauptquantenzahl
$\ell = 0, 1, 2, \ldots (n-1)$ Drehimpulsquantenzahl
$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$ magnetische Quantenzahl

radiale Wellenfunktion $R_{n,\ell}(r)$
polare " $\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)$
azimuthale " $\Phi_{m_\ell}(\varphi)$

$\Psi = R_{n,\ell} \cdot \Theta_{\ell,m_\ell} \cdot \Phi_{m_\ell}$ (Kugelfunktionen $Y_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta, \varphi)$)

löst weitgehend. Teil für jedes Problem m. sphärischer Symmetrie

genauere Diskussion, wie räumliche Verteilung ist → 7.3

7.2. Physikalische Bedeutung d. Quantenzahlen n, ℓ, m_ℓ

a) Hauptquantenzahl n: charakterisiert Energie des gebundenen Elektrons $E_n = -13.6\,\mathrm{eV}/n^2$
Quantisierung d. Energie $\leftrightarrow n$, unabhängig von ℓ, m_ℓ

b) Drehimpulsquantenzahl ℓ:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}\right]R = \epsilon R$$

Lösungen für radiale Bewegung sollten nur von r abhängen, aber ϵ ist totale Energie = kin. + pot. Energie
kinetische Energie: radiale Bewegung und orbitale (Bahn-) Bewegung

$$E = T_r + T_0 + V = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{p_r^2}{2m} - \frac{L^2}{2mr^2}\right]R = 0$$

Kann nur zur radialen Gleichung sein wenn

$$T_0 = \frac{L^2}{2mr^2} = \frac{1}{2}mv_0^2 \equiv \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \qquad L = mv_0 \cdot r$$

$|\vec{L}| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ Quantenzahl ℓ bestimmt Länge des (Bahn) Drehimpulsvektors. Drehimpuls ist quantisiert

z.B. Elektron mit $\ell = 2$ hat Bahndrehimpuls
am Orbit $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{2(2+1)} = 1.6 \cdot 10^{-15}\,eVs$
$= 2.6 \cdot 10^{-34}\,Js$

zum Vergleich: Bahndrehimpuls d. Erde $2.7 \cdot 10^{40}\,Js$
d.h. bei makroskopischen Objekten Quantisierung des Bahndrehimpulses nicht beobachtbar.

Spektroskopische Notation für Zustände im Atom
mit Zahl (n) und Buchstaben (für ℓ)

$\ell = 0$	$\rightarrow$ s	} von früher Klassifikation der assoziierten Spektrallinien s ≙ sharp p ≙ principal d ≙ diffuse f ≙ fundamental
1	p	
2	d	
3	f	

$n=$	$\ell=0$	1	2	3	4	5
1	1s	–	–	–	–	–
2	2s	2p	–	–	–	–
3	3s	3p	3d	–	–	–
4	4s	4p	4d	4f	–	–
5	5s	5p	5d	5f	5g	–

c) magnetische Quantenzahl m_ℓ
ℓ bestimmt Länge des Bahndrehimpulsvektors $\vec{L}$. $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ steht senkrecht zu Ebene der Bewegung

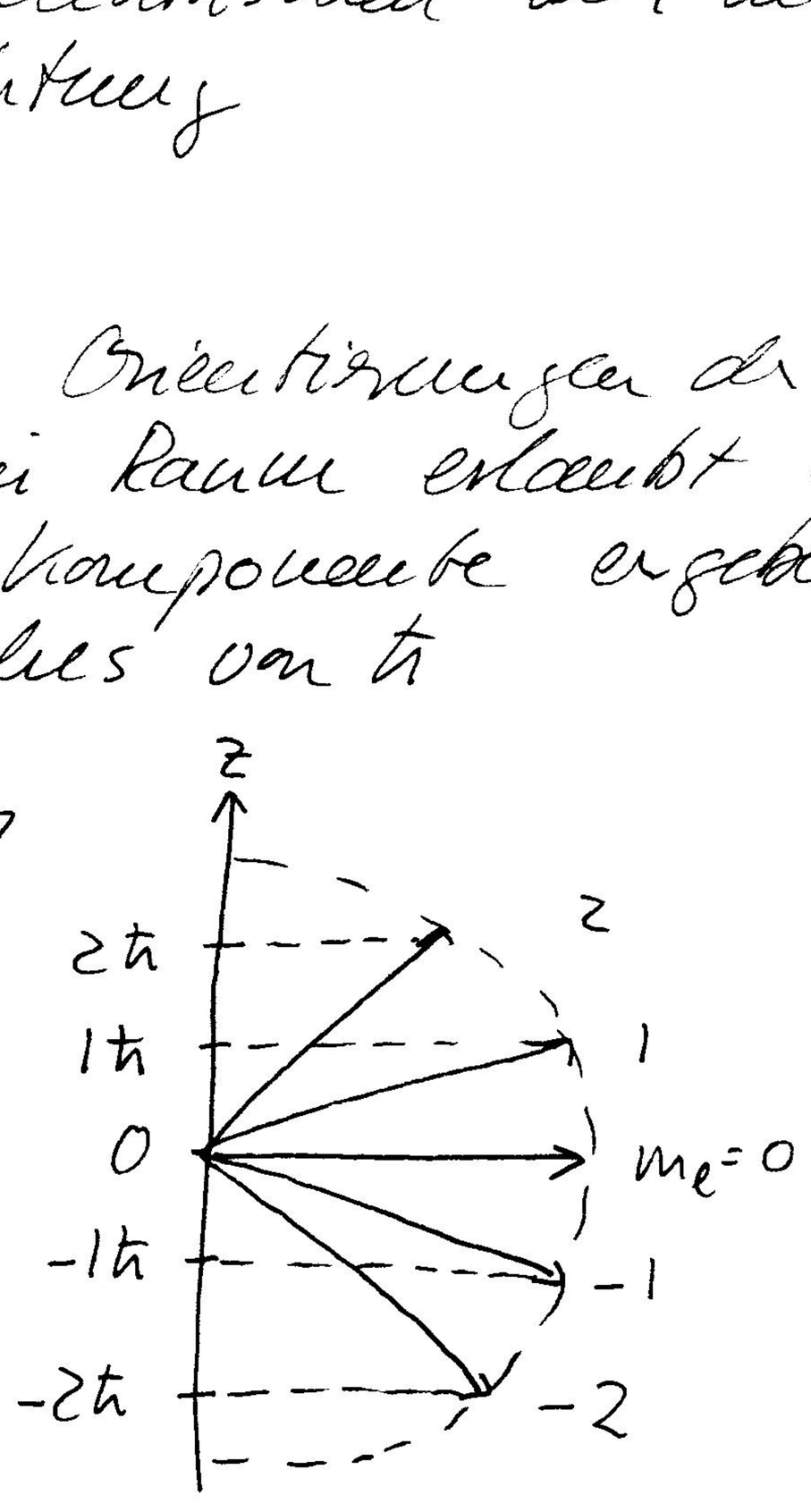
m_ℓ charakterisiert <u>Richtung</u> von $\vec{L}$ im Raum.

Definiere eine Vorzugsrichtung (z.B. durch Anlegen eines externen elektrischen oder magnetischen Feldes) $\equiv$ z-Richtung
$L_z = |\vec{L}| \cos\vartheta = m_\ell \hbar$

nicht alle möglichen Orientierungen des Bahndrehimpulses d. Elektrons im Raum erlaubt sondern nur solche, die z-Komponente ergeben, die ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$

z

z.B. $\ell = 2$ $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{2\cdot 3}$
$= \sqrt{6}\,\hbar$



$\vec{L}$ präzediert (schnell) um z-Achse mit fester z-Projektion.

<u>Bemerkung</u>: im Gegensatz zum Bohr Modell ist für gegebene Hauptquantenzahl n Länge des Bahndrehimpulsvektors nicht $n\cdot\hbar$ sondern höchstens
(für $\ell = n-1$) $\hbar\sqrt{n(n-1)}$ $\quad n=3 \quad |\vec{L}|_{max} = \hbar\sqrt{6} = 2.3\,\hbar$
$\quad n=100 \quad = \hbar\sqrt{99\cdot 100} \simeq 100\,\hbar$

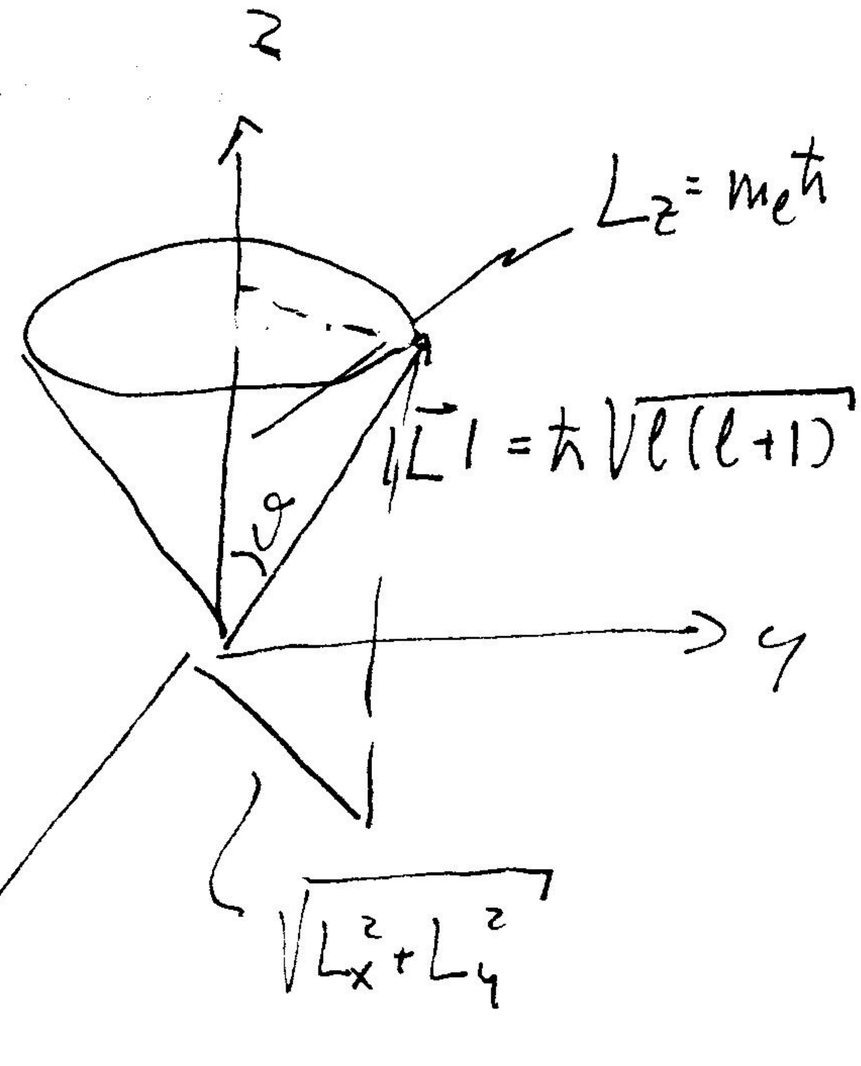
aber Bahndrehimpuls kann immer auch kleiner, z.B. gleich Null, sein. Aber Projektion auf z-Achse ist ganzzahliges Vielfaches von $\hbar$!

Drehimpulsvektor präzediert um z-Achse

$$\cos\vartheta = \frac{m_\ell}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}$$

$$L_x^2 + L_y^2 = |\vec{L}|^2 - L_z^2$$

$$= \hbar^2\left(\ell(\ell+1) - m_\ell^2\right)$$



aus Unschärferelation verbietet, daß noch eine weitere Komponente von L genau bekannt ist. z-Komponente und Länge von $\vec{L}$ genau bekannt, azimutaler Winkel φ total unbestimmt → schnelle Präzession von L um z-Achse

d) Entartung der Energieniveaus

Energie hängt nur von n ab, nicht von ℓ und m_ℓ. Für jedes Energieniveau E_n gibt es eine Anzahl x von verschiedenen Zuständen des Atoms, jeder charakterisiert durch seine eigene Wellenfunktion, d.h. räumliche Verteilung des Atoms.
Jeder Zustand (Energieniveau) x-fach entartet. Zustand charakterisiert durch Satz von Quantenzahlen n, ℓ, m_ℓ

7 - 10

n	l	m_l	×	
1	0	0	1	einfach entartet
2	0	0	4	vierfach "
	1	0, ±1		
3	0	0	9	neunfach "
	1	0, ±1		
	2	0, ±1, ±2		
4			9+7=16	
⋮			⋮	
n			n^2	

jedes Niveau ist n^2-fach entartet

↑ etc.

- 1.5 eV $\overline{(3,0,0)}$ $\overline{(3,1,0)}$ $\overline{(3,1,1)}$ $\overline{(3,1,-1)}$ $\overline{(3,2,0)}$ $\overline{(3,2,1)}$ $\overline{(3,2,-1)}$ $\overline{(3,2,2)}$ $\overline{(3,2,-2)}$ $n=3$

- 3.4 eV $\overline{(2,0,0)}$ $\overline{(2,1,0)}$ $\overline{(2,1,1)}$ $\overline{(2,1,-1)}$ $n=2$

- 13.6 eV $\overline{(1,0,0)}$ $n=1$

(n, l, m_l)

7.3. Wasserstoff Wellenfunktionen

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\vartheta,\varphi) = R_{n,l}(r)\,\Theta_{l,m_l}(\vartheta)\,\Phi_{m_l}(\varphi)$$

n	l	m_l	$R(r)$	$\Theta(\vartheta)$	$\Phi(\varphi)$
1	0	0	$2a_0^{-3/2}\exp(-r/a_0)$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2\pi}$
2	0	0	$1/(2a_0)^{3/2}(2-r/a_0)\exp(-r/2a_0)$	"	"

2	1	0	$1/(\sqrt{3}(2a_0)^{3/2})$	$r/a_0 \exp(-r/2a_0)$	$\sqrt{3/2}\cos\vartheta$ $1/\sqrt{2\pi}$
2	1	± 1	"		$\sqrt{3}/2 \sin\vartheta \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(\pm i\varphi)$

generelle Struktur:

$$\psi_{n,\ell,m_\ell} \propto \left(\frac{r}{na_0}\right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n,\ell} P_{\ell,m_\ell}(\cos\vartheta) \exp(i m_\ell \varphi)$$

$$\psi_{3,0,0} = c_1 \cdot \left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0)$$

$$\psi_{3,1,0} = c_2 \left(\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0) \cos\vartheta$$

$$\psi_{3,2,0} = c_3 \left(\frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0)(3\cos^2\vartheta - 1)$$

Wahrscheinlichkeit Elektron zu finden → gegeben durch Quadrat d. Wellenfunktion.

z.B. Wahrscheinlichkeit in kleinem Intervall zwischen x und $x+dx$

$$dP(x) = \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx = |\psi|^2 dx$$

oder in kleinem Volumenelement $dV = dx\,dy\,dz$

um x, y, z

$$dP(x,y,z) = |\psi|^2 dx\,dy\,dz$$

in sphärischen Koordinaten

$$dP(r,\vartheta,\varphi) = |\psi|^2 r^2 dr \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$$

oder

$$dP(r,\vartheta,\varphi) = |R_{n,\ell}(r)|^2 |\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)|^2 |\Phi_{m_\ell}(\varphi)|^2 r^2 dr \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$$

Wahrscheinlichkeit Elektron zwischen r und $r+dr$, ϑ und $\vartheta+d\vartheta$, φ und $\varphi+d\varphi$ zu finden.

radiale Wahrscheinlichkeitsdichte: Wahrscheinlichkeit Elektron zwischen r und

$r+dr$ in Kugelschale unabhängig von ϑ, φ (sphärische o. Kugelschale)

$$dP(r) = \underbrace{|R_{n,\ell}|^2 r^2 dr}_{\frac{dP(r)}{dr}} \underbrace{\int_0^{\pi} |\Theta_{l,m_\ell}(\vartheta)|^2 \sin\vartheta\, d\vartheta}_{\equiv 1} \underbrace{\int_0^{2\pi} |\Phi_{m_\ell}(\varphi)|^2 d\varphi}_{\equiv 1}$$

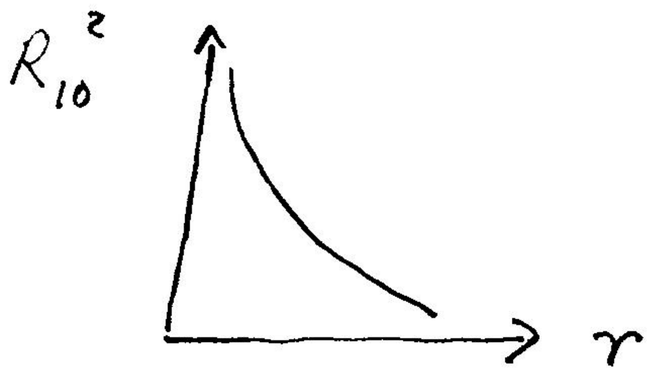
$\frac{dP(r)}{dr}$ ← radiale Wahrscheinlichkeitsdichte

R, Θ, Φ sind individuell normiert, so daß Integral d. Wahrscheinlichkeitsdichte über alle erlaubten Werte 1 ergibt,

d.h. auch $\int_0^{\infty} \frac{dP(r)}{dr} dr = \int_0^{\infty} |R_{n,\ell}|^2 r^2 dr \equiv 1$

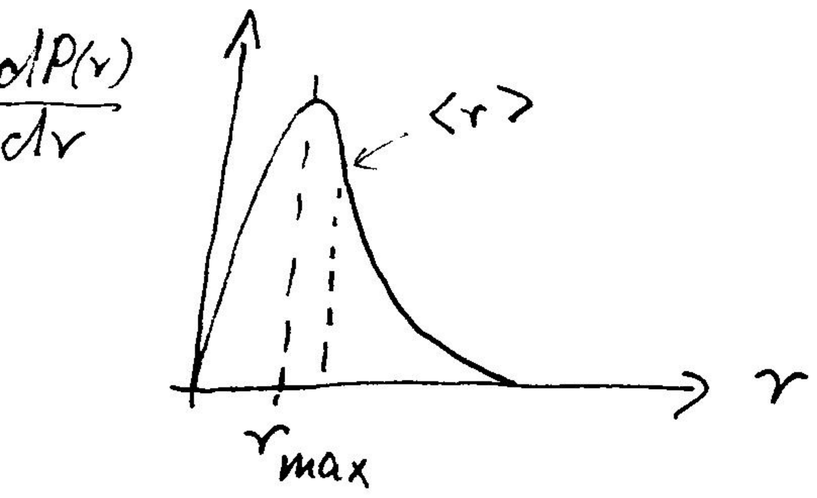
1s-Zustand: keine ϑ u. φ-Abhängigkeit

$$|R_{10}|^2 = 4/a_0^3 \exp(-2r/a_0)$$



⇒ Fig. 7-1

aber $dP(r)/dr = |R_{1,0}|^2 r^2$, d.h. geht gegen 0 für $r \to 0$



- Wahrscheinlichste radiale Abstand des Elektrons vom Kern:

$$\frac{d(r^2 R_{10}^2)}{dr} = 0$$

können Normierungskonst. in $R(r)$ ignorieren

$$\frac{d\left(r^2 \exp(-2r/a_0)\right)}{dr} = 0 = 2r\left(1 - \frac{r}{a_0}\right)\exp(-2r/a_0) \quad \text{för } r = r_{max}$$

$$\sim \quad 1 - \frac{r_{max}}{a_0} = 0 \quad \text{och} \quad r_{max} = a_0 \leftarrow \text{Bohrradius}$$

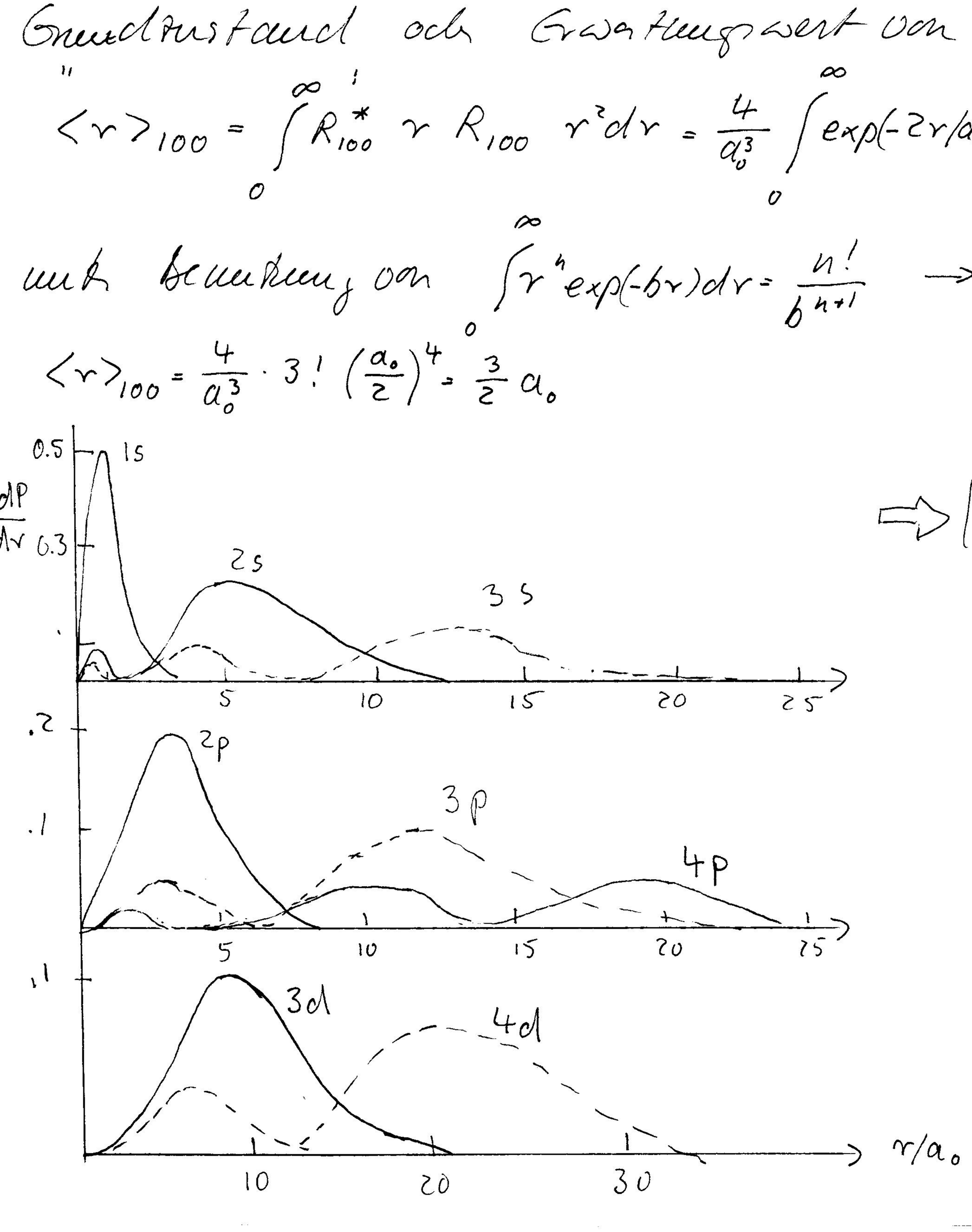
mittlera radiala Abstand des Elektrons im Grundzustand och Erwartungswert von r ist

$$\langle r \rangle_{100} = \int_0^\infty R_{100}^* \, r \, R_{100} \, r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty \exp(-2r/a_0)\, r^3 dr$$

mit Benutzung von $\int_0^\infty r^n \exp(-br)dr = \frac{n!}{b^{n+1}} \longrightarrow$

$$\langle r \rangle_{100} = \frac{4}{a_0^3} \cdot 3! \left(\frac{a_0}{2}\right)^4 = \frac{3}{2} a_0$$

$\Rightarrow$ Fig 7-5



1) für ein gegebenes n hat Wahrscheinlichkeitsdichte (für Wellenfunktion) mit $l = l_{max} = n-1$ ein Maximum
für $l = n-2$ zwei Maxima, etc.

2) das äußerste (am weitesten von Kern entfernte) Maximum ist das höchste.
vergleiche Wahrscheinlichkeitsdichte innerhalb einer Schale ☞ Figs 7.5

3) für gegebenes n und Vergleich der stärksten (äußersten) Maxima für die erlaubten l:
Maximum für max. l ist am nächsten am Kern

z.B. 3s 3. Max ist bei $\approx 14\,a_0$
3p 2. $\approx 11\,a_0$
3d 1. $9\,a_0$

4) für jedes n stimmt das Maximum für das maximale $l = n-1$ mit dem Bohr-Modell überein

1s	$dP/dr\|_{max}$ bei	$1\,a_0$
2p		$4\,a_0$
3d		$9\,a_0$
4f		$16\,a_0$

nicht jedoch für alle anderen Wellenfunktionen

Winkelabhängigkeit:

- $dP/d\varphi = |\Phi|^2 = c^2 \exp(i m_\ell \varphi) \exp(-i m_\ell \varphi) = c^2 \exp(0) = 1 \cdot c^2$

  keine Abhängigkeit von azimuthalem φ → mit $c^2 = \frac{1}{2\pi}$

  → siehe oben: Präzession von $\vec{L}$ um z

- ϑ-Abhängigkeit

  $dP/d\vartheta = |\Theta_{\ell, m_\ell}(\vartheta)|^2 \sin\vartheta$

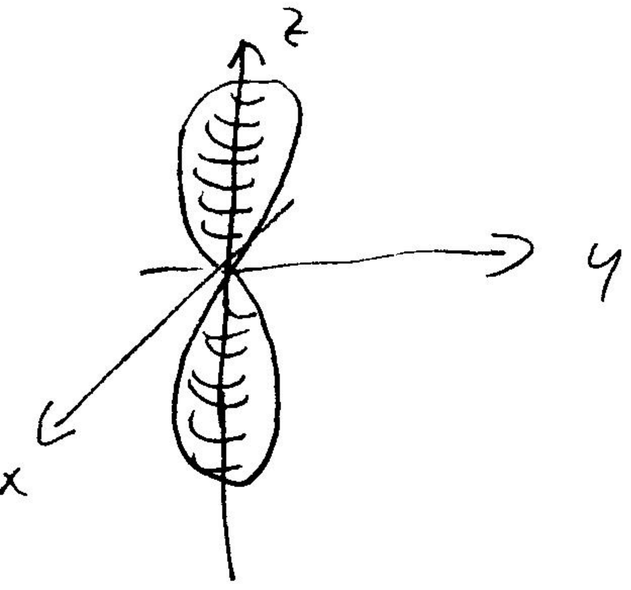
$\ell = 0 \quad m_\ell = 0 \quad \Theta_{0,0}(\vartheta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \Theta^2 = \frac{1}{2}$

$dP/d\vartheta = \frac{1}{2} \sin\vartheta$ wie für Kugelschale

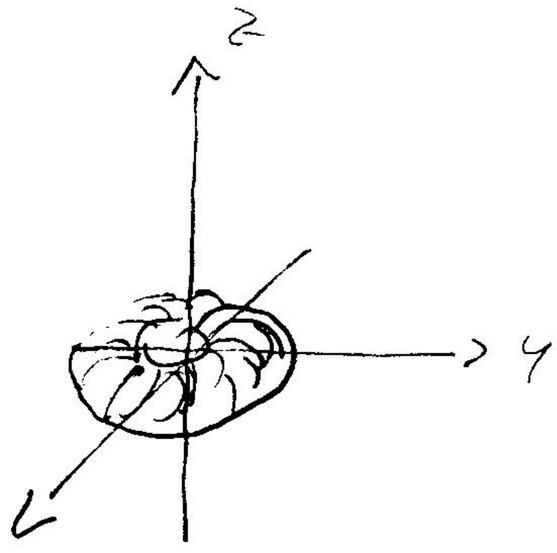
alle s-Orbitale ($\ell = 0$ Zustände) haben sphärische Symmetrie, nur in r variiert Wahrscheinlichkeitsdichte (siehe oben)

☞ Fig 7-1, 7-3

$\ell = 1 \quad m_\ell = 0 \quad \Theta_{1,0}(\vartheta) = \sqrt{3/2} \cos\vartheta \quad \frac{dP}{d\vartheta} = \frac{3}{2} \cos^2\vartheta \sin\vartheta$



$\ell = 1 \quad m_\ell = \pm 1 \quad \Theta_{1,\pm 1}(\vartheta) = \frac{\sqrt{3}}{2} \sin\vartheta \quad \frac{dP}{d\vartheta} = \frac{3}{4} \sin^3\vartheta$



☞ Fig 7-2

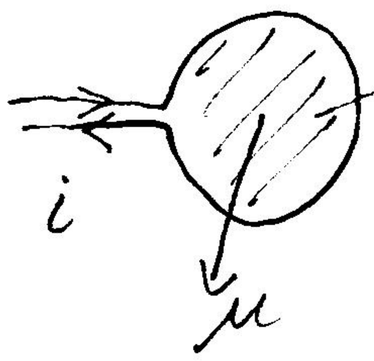
Fig 7-4 u. $n = 3$ Orbitalen

Fig 7-6 Fe Rasch-Tunnel-Mikroskop - Oberfläche

7.4. Magnetisches Moment und Spin

Bahnbewegung des Elektrons führt zu magnetischem Moment: bewegtes Elektron ≙ Strom

Betrachte zunächst Stromschleife



Strom i

magnetisches Moment $\mu = iA$

Orientierung: senkrecht zur Fläche A

zirkulierende Ladung: $i = \frac{q}{T} = -\frac{ev}{2\pi r} = -\frac{ep}{2\pi m r}$

T = Umlaufzeit

$\rightsquigarrow \mu = iA = i\pi r^2 = -\frac{e}{2m} r \cdot p$ $\quad$ r und p senkrecht; $\vec{r} \times \vec{p} = \vec{L}$ $\quad$ $rp = L$

$= -\frac{e}{2m} L$

μ steht senkrecht zu r und p, Minuszeichen zeigt daß μ antiparallel zu L.

$$\boxed{\vec{\mu}_e = -\frac{e}{2m}\vec{L}}$$

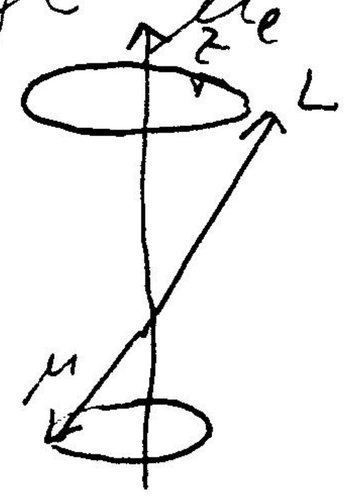
Subskript e zeigt, daß magnetisches Moment durch Bahnbewegung verursacht.

Herleitung v. klassischer Stromschleife, aber magn. Moment ausgedrückt durch Bahndrehimpuls.
Für Elektron ist Trajektorie nicht festgelegt, aber Bahndrehimpuls. Das fixiert Größe des magn. Moments
Verhältnis zw. magn. Moment und Bahndrehimpuls

$\frac{|\vec{\mu}_l|}{|\vec{L}|} = -\frac{e}{2m}$ ≡ gyromagnetisches Verhältnis

Richtungsquantisierung von L:
L präzediert um z-Achse mit
z-Komponente $L_z = m_l \hbar$

Im Zeitmittel nur z-Komponente ungleich Null,
d.h. im Zeitmittel sieht man für μ_l auch
nur z-Komponente



$$\langle \vec{\mu}_l \rangle = \mu_z = -\frac{e}{2m} \langle \vec{L} \rangle = -\frac{e}{2m} L_z$$
$$= -\frac{e}{2m} \hbar m_l$$

mittleres magnetisches Moment im Übereinstimmung mit Bohrmodell! um m_l, nicht n
bestimmt Grösse

Einheit des magnetischen Moments:

Bohr Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.274 \cdot 10^{-24} \underbrace{Am^2}_{= J/T}$

$= 5.79 \cdot 10^{-5}\ eV/T$

$\langle \vec{\mu}_l \rangle = \mu_z = -\mu_B m_l$

Atom in äußerem Magnetfeld: (B in z-Richtung)

Drehmoment $\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -\frac{q}{2m} \vec{L} \times \vec{B}$

Präzession, da Drehimpulsänderung $\perp$ zu $\vec{L}$ und
$\vec{B}$. Präzessionsfrequenz ≡ Larmorfrequenz

$\omega_L = \frac{eB}{2m}$

(wie Kreiselproblem)

potentielle Energie (da B in z-Richtung)

$$V = -\vec{\mu}_\ell \cdot \vec{B} = -\mu_z \cdot B$$

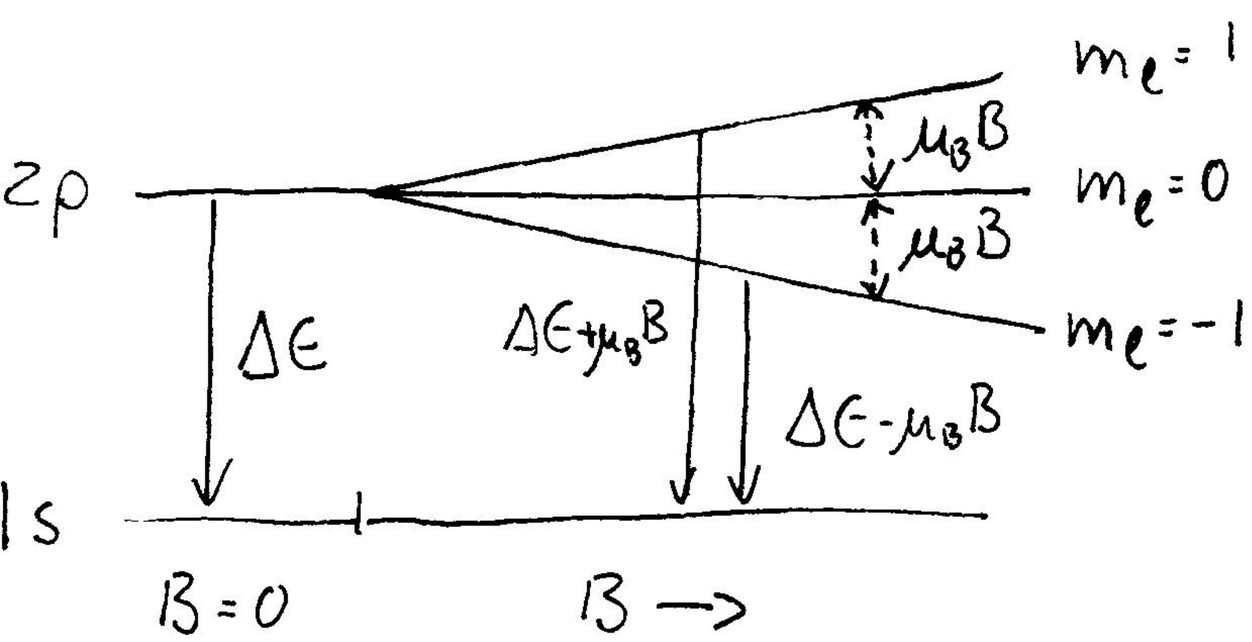
$$= \frac{e\hbar}{2m} B m_\ell = \mu_B B m_\ell$$

Energie eines Elektrons in äußerem Magnetfeld $B = B_z$ wird verschoben um V

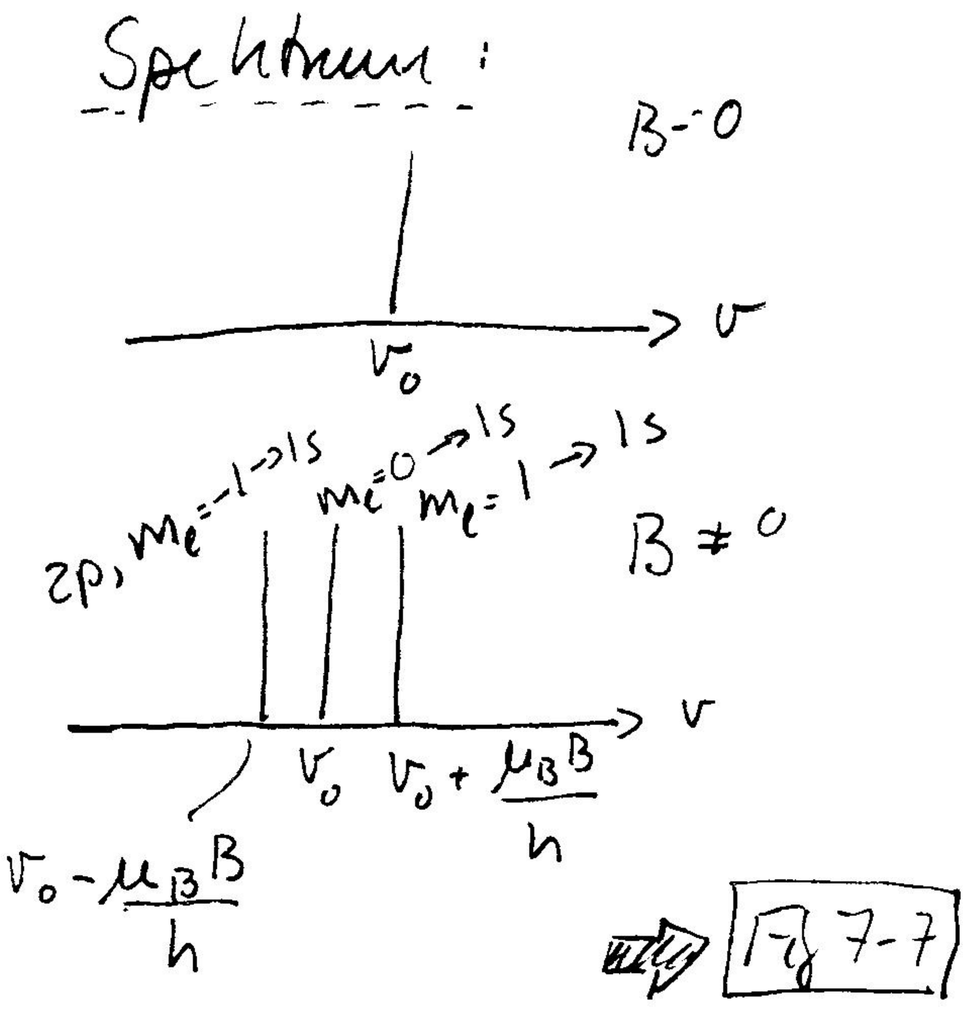
$$\epsilon \longrightarrow \epsilon + \mu_B B m_\ell = -\frac{13.6\,eV}{n^2} + \mu_B B m_\ell$$

kein Magnetfeld — mit Magnetfeld

zuerst beobachtet durch Piet Zeeman 1896
"Zeeman - Effekt"



Spektrum:



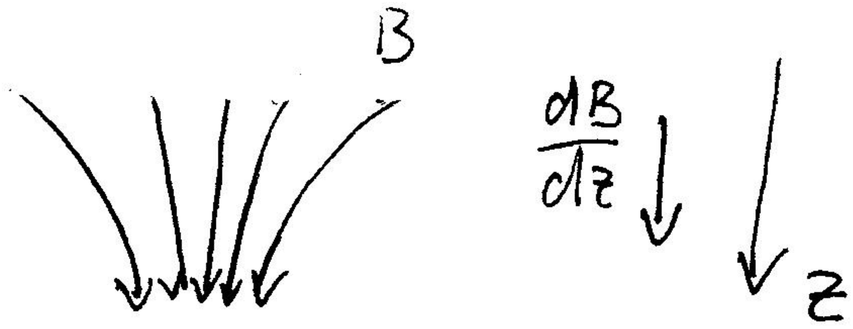
⇒ Fig 7-7

Stern-Gerlach Experiment: Atom im s-Zustand $\ell = 0$, $m_\ell = 0$

sollte im äußeren Magnetfeld keine Energieverschiebung der Elektronenzustände erfahren.
1922 fanden Otto Stern u. Walter Gerlach ein Exp. durch, das zeigt, daß das nicht korrekt ist.

Exp. m. Silber-Atomen, da leicht nachweisbar mit photographischer Technik. Elektronisch dem Wasserstoff ähnlich. Bei einem Leitungselektron, Elektron bewegt sich im Coulombpotential gebildet durch ein Ladung $-e$ und pos. Ladung von 47 Protonen u. neg. Ladung von 46 inneren Elektronen. $L=0 \sim \ell=0, m_\ell=0$ $n=5$ 5s

Strahl von Ag-Atomen durch inhomogenes Magnetfeld:



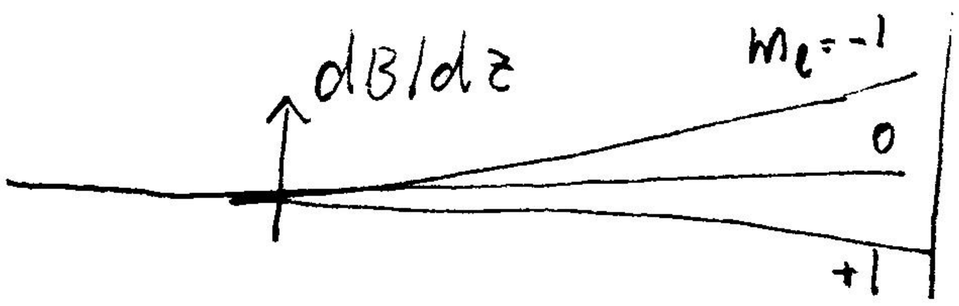
jetzt nicht ein Drehmoment sondern direkt Kraft auf elektrischen oder magnetischen Dipol

$$\vec{F} = \nabla \underbrace{\vec{\mu}\vec{B}}_{\text{pot. Energie}} = \mu_z \frac{dB}{dz} \hat{z} \quad \text{Einheitsvektor in z-Richtung}$$

$$|\vec{F}| = -\mu_B m_\ell \frac{dB}{dz}$$

Strahl von Atomen, die magn. Feldgradienten durchquert, wird abgelenkt, je nach Richtung von μ_z, bzw. Wert der Quantenzahl m_ℓ
↪ direkter Beweis der Richtungsquantisierung
z.B. Wasserstoff $n=1$ $\ell=0$ $m_\ell=0$ → keine Ablenkung erwartet

Elektron in $n=2$ $\ell=1$ Zustand $m_\ell=0, \pm 1$



photographische Platte

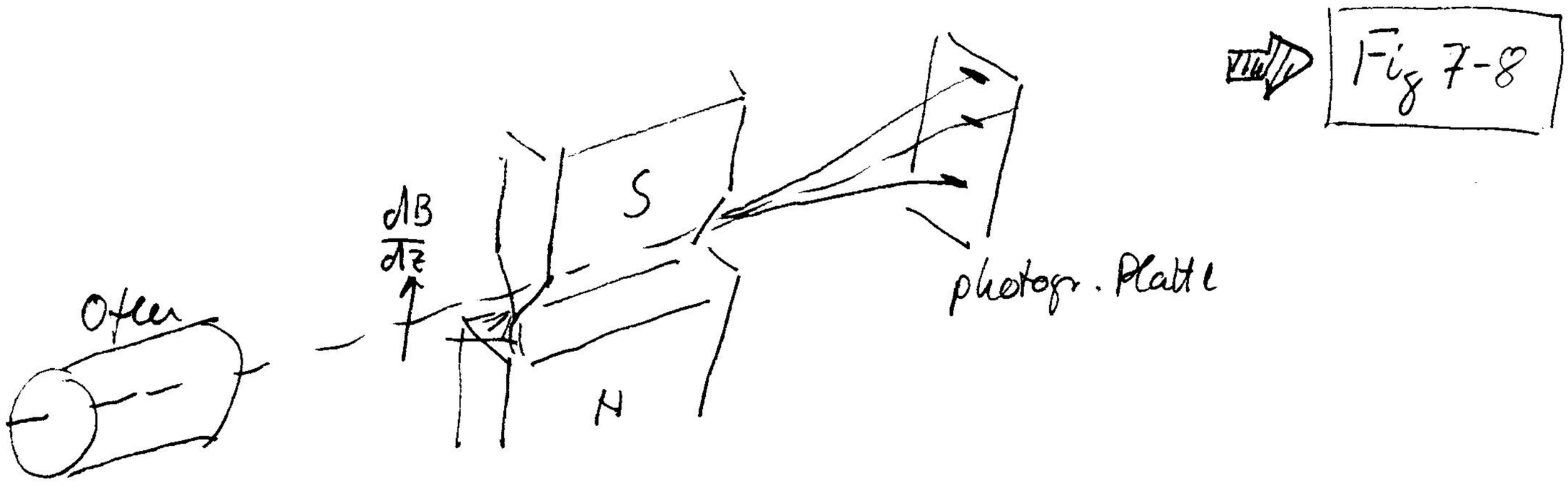


Fig 7-8

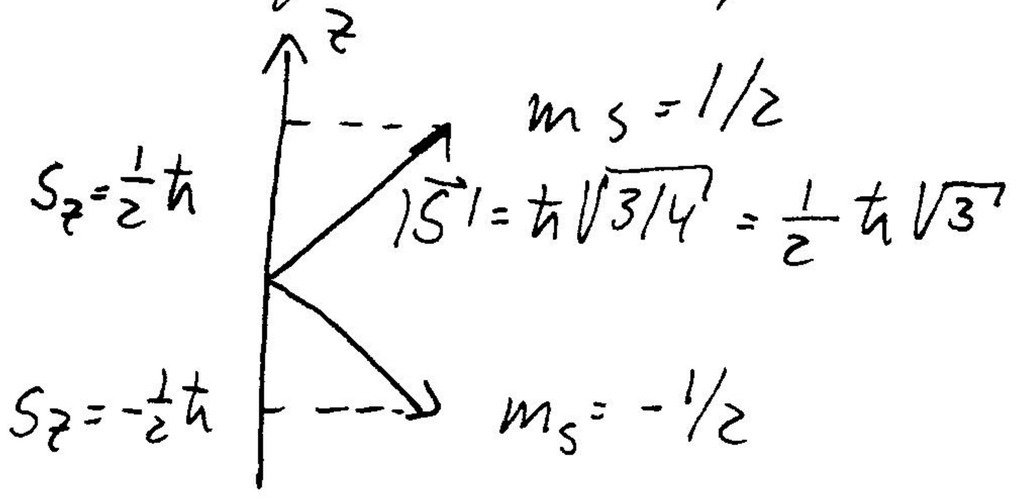
u. Ag-Strahl eine Linie erwartet, es wurden aber 2 beobachtet; Ablenkung in und entgegen Richtung des Feldgradienten

d.h. selbst ohne Bahndrehimpuls hat Elektron magnetisches Moment; mit 2 möglichen z-komp.
Bereits 1921 Idee von Compton, daß Elektron eine eigene Achse rotiert
1925 postulierten Sam Goudsmit und George Uhlenbeck, daß Elektron mechanischen Drehimpuls hat & fühlt ein magn. Moment, selbst wenn Bahndrehimpuls = 0.
Ebenfalls 1925 wurde von Dirac gefunden daß Schrödinger Gleichung für relativistisches Elektron (Dirac-Gleichung) diese neue Eigenschaft enthält; zwei zusätzliche Quantenzahlen
(aber: Spin ist kein relativistischer Effekt, Gamin Theo Phys IV, 13)

Mechanischer Drehimpuls oder Spin $\vec{S}$ *
mit Länge $|\vec{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ s = Spin-Quantenzahl
$= \hbar\sqrt{3/4}$ für Elektron $s = 1/2$
mit magn. Quantenzahl
$m_s = s, s-1 \ldots -s$ } $m_s = 1/2, -1/2$

ebenfalls wie Richtungsquantelung,
* Achtung: Name darf nicht wörtlich genommen werden, keine Rotation des Elektrons um eigene Achse!

so daß z-komponente $S_z = m_s \hbar$



"Spin up"

"Spin down"

↳ nur 2 mögl. Orientierungen

wie L präzediert S um z-Achse, mit Mittel verschwinden x- und y-komponenten

$\langle \vec{S} \rangle = S_z = m_s \hbar$

↝ magnetisches Moment reflektiert auch nur z-komponente von S, aber gyromagnetisches Verhältnis fast genau doppelt so groß wie für Bahnbewegung

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m}\vec{S}$$ Spin magn. Moment

$$\langle \vec{\mu}_s \rangle = \mu_{sz} = -\frac{e}{m} m_s \hbar$$

$$= -2\mu_B m_s = \mp \mu_B \text{ für } m_s = \pm 1/2$$

in inhomogenem Magnetfeld $F_z = \mp \mu_B \frac{dB}{dz}$ ↝ 2 Linien

(1927 von Phipps & Taylor für H selbe Beob.) 1943 Nobelpreis O. Stern

⊛ Feinstruktur 7-21 a+b

7.5. Übergänge zwischen Zuständen am Wasserstoffatom

Photon hat intrinsischen Drehimpuls charakterisiert durch Quantenzahl $s = 1$ ↝ $|\vec{S}| = \hbar\sqrt{1 \cdot 2}$

Nur Orientierungen mit $m_s = +1$ und -1 erlaubt entsprechend den zwei Polarisierungsrichtungen des Photons. $m_s = 0$ nicht erlaubt ← Effekt der

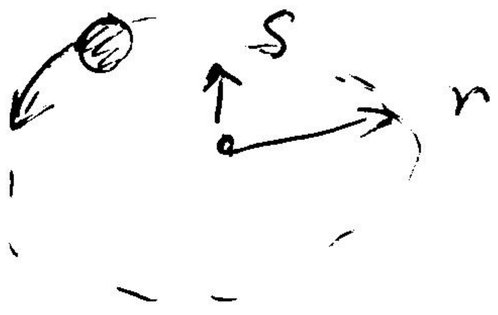
Spin führt zu sogenannten Feinstrukturen:

Elektron mit Bahndrehimpuls L bewegt sich im Ruhesystem d. Atoms. Im Ruhesystem d. Elektrons sieht es Strom durch Kreisen-des Proton $\rightsquigarrow$ Magnetfeld am Ort des Elektrons. Effekt gleich wie durch ext. homog. Magnetfeld. $\longrightarrow$ Energieverschiebung

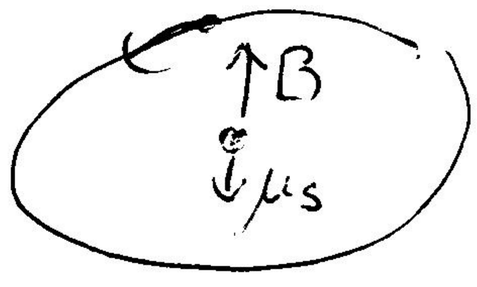
$$V = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m} S_z B = \pm \underbrace{\frac{e\hbar}{2m}}_{\mu_B} B$$

Ruhesystem d. Proton:

Ruhesystem d. Elektrons



$\hat{=}$



grobe Abschätzung der Feinstrukturaufspaltung im Bohrmodell: approximiere Proton wieder als Stromschleife

$$B = \frac{\mu_0 \cdot i}{2r} = \frac{\mu_0 \cdot e}{2r\,T} = \frac{\mu_0 e v}{2r\,2\pi r} \rightsquigarrow \Delta E = 2\mu_B B = \frac{\mu_0 e v}{2\pi r^2}\mu_B$$

benutze wieder $|\vec{L}| = mvr = n\hbar$ (Bohr) und substituiere für v und benutze $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$

$$\Delta E = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2 n}{4\pi m^2 r^3}$$

substituiere Bohr radius

$$1/r = \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}\,\frac{1}{n^2}$$

(schreibe hier expl. $4\pi\varepsilon_0$, da μ_0 aufgehoben)

$$\Delta E = \frac{\mu_0 m e^8}{256\pi^4 \varepsilon_0^3 \hbar^4}\,\frac{1}{n^5} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} = c^2$$

und $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137}$

$$\Delta E = (mc^2)\,\alpha^4 \frac{1}{n^5}$$

z.B. $n=2$ in H $\quad \Delta E = 4.5 \cdot 10^{-5}$ eV

gesehen in Lyman Serie von Wasserstoff

Energieniveaus $\propto \alpha^2/n^2$ Effekt selbe Größe

Faktor α^2 im Vergleich zu E; Name "Feinstruktur"

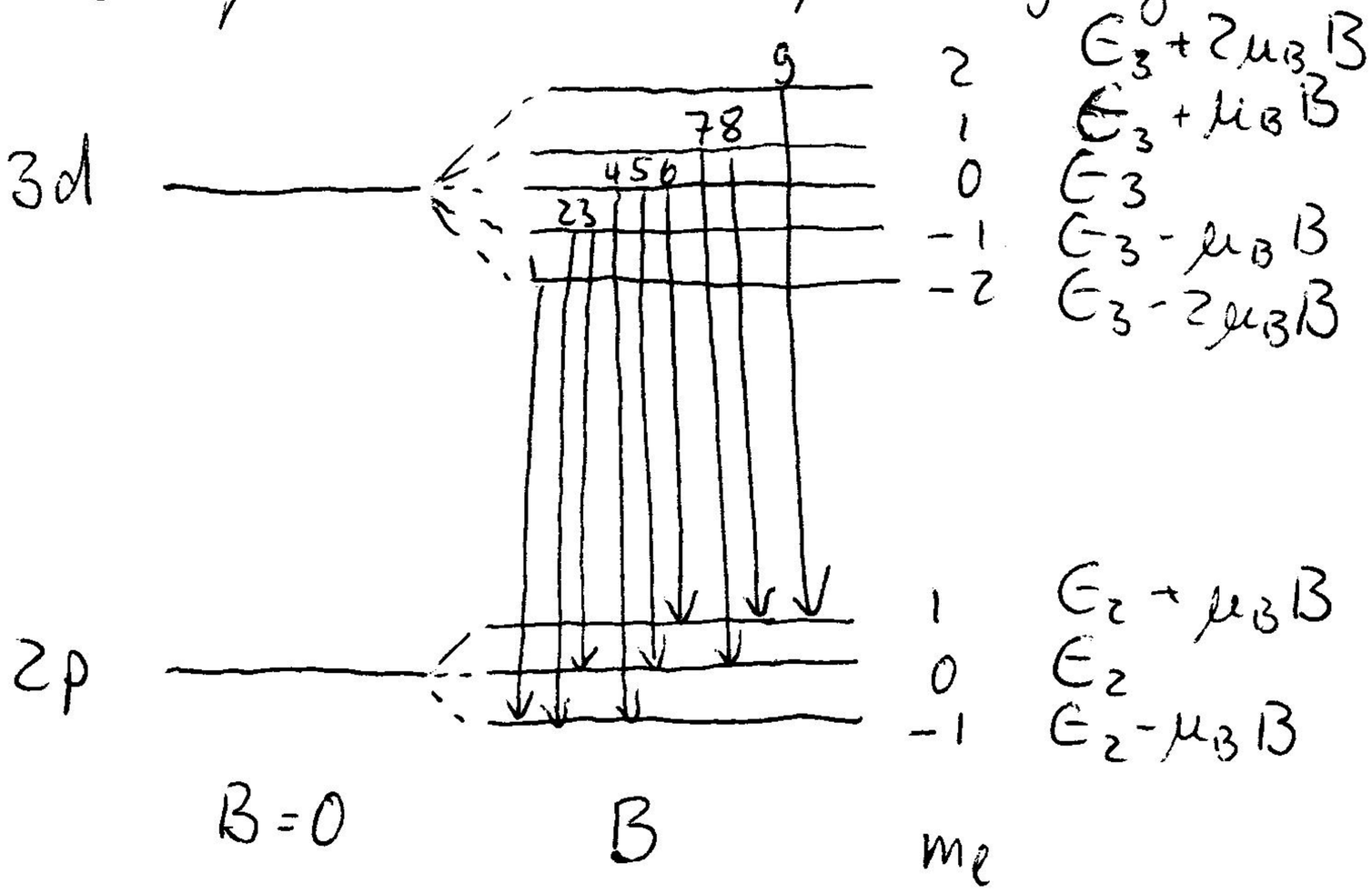
- Natürlich auch Kopplung zwischen Bahndrehimpuls und Spin des Elektrons (siehe unten)
  $\leftrightarrow$ Einfluß auf Zahl und Lage d. Spektrallinien (Zeeman)

speziellen Relativitätstheorie; es gibt kein System, in dem Photon in Ruhe ist.
Drehimpulserhaltung (und Symmetrien des Operators für elektromagnetischen Übergang) führen zu sogenannten "Auswahlregeln", die sagen welche Übergänge durch Absorption oder Emission eines Photons stattfinden.

1) Keine Auswahlregel für Δn
2) nur bis gewisse mit $\Delta l = \pm 1$ wahrscheinlich
   z.B. $3p \to 2s$
   $1s$
   nicht $3p \to 2p$
3) $\Delta m_l = 0, \pm 1$

$l=2$ $l=1$

Beispiel $3d \to 2p$ Übergänge im Magnetfeld



Übergänge

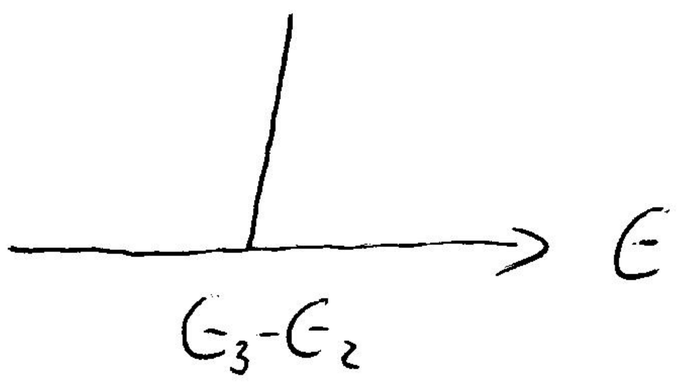
1	$E_3 - 2\mu_B B - (E_2 - \mu_B B) = E_3 - E_2 - \mu_B B$
2	$E_3 - E_2$
3	$E_3 - E_2 - \mu_B B$
4	$E_3 - E_2 + \mu_B B$
5	$E_3 - E_2$
6	$E_3 - E_2 - \mu_B B$
7	$E_3 - E_2 + \mu_B B$
8	$E_3 - E_2$
9	$E_3 - E_2 + \mu_B B$

→ nur 3 Übergangsenergie mit Intensitätsverhältnis $E_3 - E_2 + \mu_B B$: $E_3 - E_2$: $E_3 - E_2 + \mu_B B$

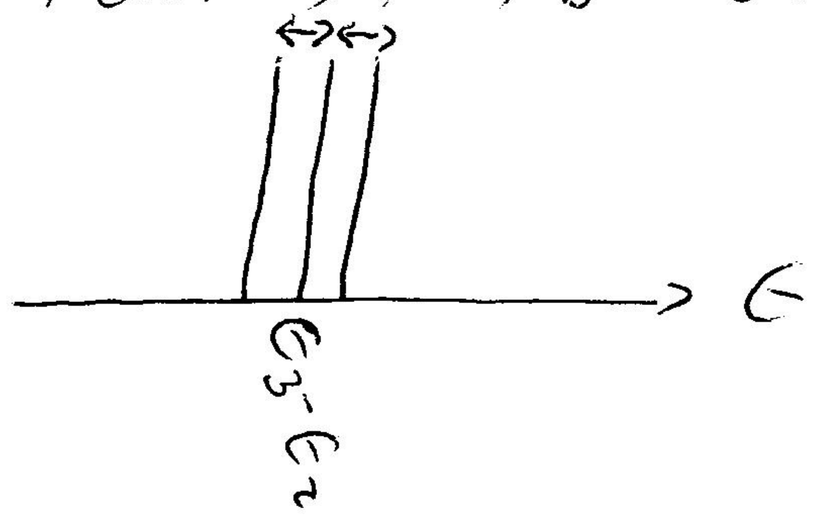
von 3 : 3 : 3

d.h. alle gleich

ohne Feld



mit Feld $\mu_B B = 5{,}8 \cdot 10^{-5} \cdot B(T)$ eV



Praktische Auswahlregel: 4) $\Delta m_s = 0$

Spinumkehr mag nicht sich nicht

8. Mehrelektronensysteme

8.1. Pauliprinzip und Quantenstatistik

Elementarteilchen werden nach ihrem Spin eingeteilt:

ganzzahliger Spin: Bosonen
Photon, Gluon, Alphateilchen
halbzahliger Spin: Fermionen
Elektron, Proton, Neutron, Quarks

Systeme identischer Teilchen: Teilchen sind i.A. ununterscheidbar und das hat Konsequenzen für die Symmetrie von Vielteilchensystemen (z.B. Mehrelektronensystemen)

Einteilchenwellenfunktion $\psi(1)$
Zweiteilchenwellenfunktion $\psi(1,2)$
und Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(1,2)|^2$
wenn Teilchen identisch (d.h. ununterscheidbar)
muß Wahrscheinlichkeitsdichte invariant bezüglich Vertauschung der beiden Teilchen sein
$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2$
die Wellenfunktion hat bezüglich der Vertauschung 2 Möglichkeiten

1. $\psi(1,2) = +\psi(2,1)$ gilt für <u>Bosonen</u> <u>symmetrisch</u> bez. Vert.
2. $\psi(1,2) = -\psi(2,1)$ gilt für <u>Fermionen</u> <u>antisymmetrisch</u> bez. Vert.

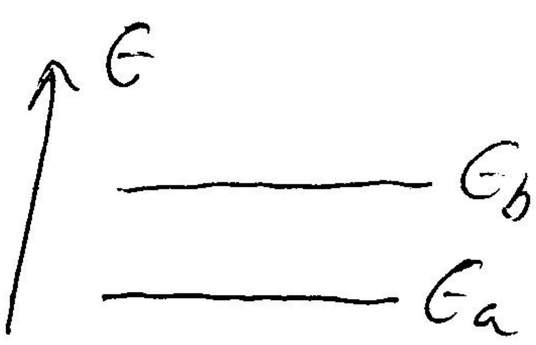
für n-Teilchenwellenfunktion gilt das Ent-

spreizende für Vertauschung von je 2 Teilchen.

Wellenfunktion ist typischerweise Produkt aus räumlicher Funktion, Spinfunktion + u.U. weiteren Teilen (Farbfunktion für Quarks und Anderes). Totale Wellenfunktion muß richtige Symmetrie bzüglich Vertauschung haben.

Kein einfacher (plausibler) Grund für Existenz der beiden Teilchenklassen mit Symmetrien von Wellenfunktionen. U.U. gibt es SUSY (könnte am LHC gefunden werden). Zu jedem Boson gibt es ein Partnerfermion.

Pauli-Prinzip: Betrachten wir 2 identische Teilchen 1,2 in zwei Zuständen a, b



möglich: $\psi_a(1)$ und $\psi_b(2)$
aber nicht unterscheidbar von
$\psi_a(2)$ und $\psi_b(1)$

2T-Wellenfunktion muß definierte Symmetrie bzüglich Vertauschung haben, nicht einfach
$\psi = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2)$

symmetrisch: $\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1) \right)$
oder
antisymmetrisch: $\psi_{as}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\text{“} - \text{“})$

Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ wegen Normierung der Wahrscheinlichk.
für 2 Fermionen (z.B. Elektronen) muß
ψ_{as} gewählt werden. Wichtige Konsequenz:

wenn wir Zustände a, b identisch wählen verschwindet ψ_{as}:

$$\psi_{as}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(1)\,\psi_a(2) - \psi_a(2)\,\psi_a(1)\right) = 0$$

> 2 Fermionen können nicht gleichzeitig einen Zustand besetzen, der in allen Quantenzahlen identisch ist ≡ "Pauli Prinzip"
> "Pauli exclusion principle"

(Vorschlag W. Pauli 1925, Nobelpreis 1945)

⇒ Fig 8-1

essentielle Komponente zum Aufbau der Atome zu verstehen; jedes durch einen individuellen Satz von Quantenzahlen definierte Zustand kann nur von einem einzigen Elektron besetzt werden

z.B. 1s - Zustand

$n=1$	$\ell=0$	$m_\ell=0$	$s=1/2$	$m_s=+1/2$	1 Elektron
"	"	"	"	$m_s=-1/2$	"

im 1s-Zustand können sich 2 Elektronen befinden, analog 6 in 2p

$m_\ell = 1$	$m_s = \pm 1/2$
0	"
-1	"

<u>für 2 Bosonen</u>: wähle $\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(1)\psi_a(2) + \psi_a(2)\psi_a(1)\right)$

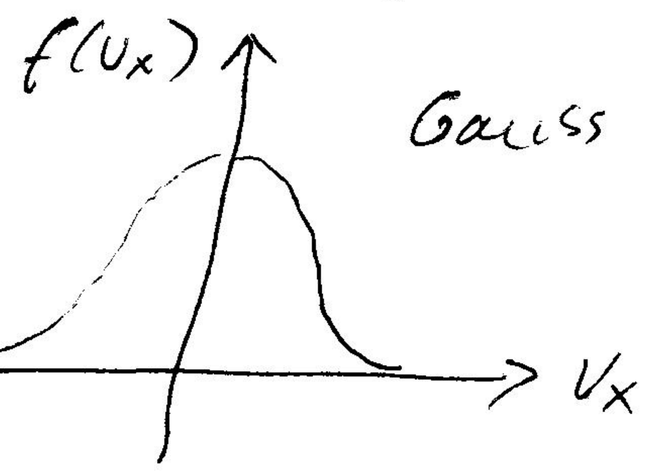
$|\psi_s(1,2)|^2 = 2\,\psi_a(1)\,\psi_a(2)$ Wahrscheinlichkeit 2 Bosonen im gleichen Quantenzustand zu finden doppelt so groß wie ohne Symmetrisierung der Wellenfunktion, spricht Bass. Teilchen

generell für n Bosonen gilt
Wahrscheinlichkeit $P_n = n! P_1^n$
wobei P_1 Wahrscheinlichkeit ist, daß Zustand mit 1 Boson besetzt ist.
für jedes weitere Bosen wächst Wahrscheinlichkeit um Faktor n+1 mit Vergleich zu Zustand n Bosonen zu finden (wichtig für Photonen und Laser)

Statistische Physik: Analyse wie sich in einem System mit vielen Teilchen die Energie auf einzelne verteilt - statistische Verteilung der möglichen Ausgänge z.B. für Messung der Geschwindigkeit (und Energie) eines einzelnen Gasatoms in einem Ensemble von vielen.

kinetische Gastheorie sagt wie totale zur Verfügung stehende Energie sich auf die kinetische Energie von N Molekülen verteilt.
können wir z.B. durch Messung der Geschwindigkeitsverteilung der Moleküle messen

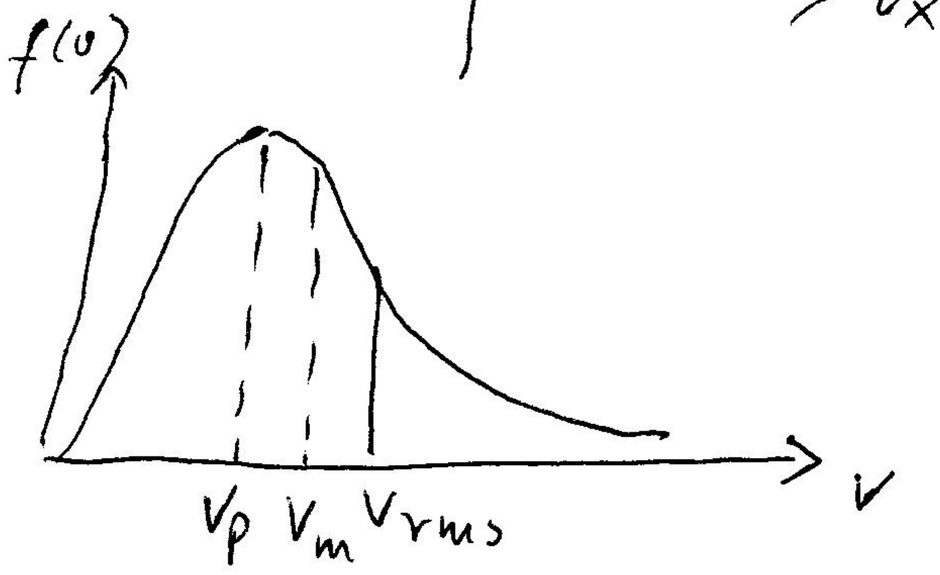
$$f(v_x)\,dx = \frac{1}{A_x} \exp(-b v_x^2)\, dv_x$$



$$f(v)\,dv = \frac{4\pi}{A} \exp(-b v^2)\, v^2 dv$$

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

Maxwellverteilung



Normierung $\int_0^\infty f(v)\,dv = n$ Anzahl der Teilchen pro Volumen

mittlere kinetische Energie pro Teilchen bei Temperatur T $\quad \bar{E}_{av} = \int \frac{1}{2} m v^2 f(v)\,dv = \frac{3}{2} kT$

$$\rightsquigarrow \quad b = \frac{m}{2kT} \quad \text{und} \quad \frac{1}{A} = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2}$$

$$f(v) = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \exp(-mv^2/2kT)$$

$$v_p = \left(\frac{2kT}{m} \right)^{1/2} \qquad v_m = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2} \qquad v_{rms} = \left(\frac{3kT}{m} \right)^{1/2}$$

die zugehörige Verteilung in der kinetischen Energie:

$$\epsilon = \frac{1}{2} m v^2 \qquad d\epsilon = mv\,dv \qquad dv = \frac{d\epsilon}{mv} = \frac{d\epsilon}{\sqrt{2m\epsilon}}$$

$$\rightsquigarrow \quad f(\epsilon)\,d\epsilon = 2\pi n \left(\frac{1}{\pi kT} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} \exp(-\epsilon/kT)\,d\epsilon$$

das ist Energieverteilung, wenn es nur kinetische Energie der Translation gibt.

wie sieht es aus, wenn verschiedene Formen von Energie im System vorhanden sind?
Normierung kann aus Zus.hang $\langle \epsilon \rangle$ und $\bar{T}$ $\bar{v}$ aus $d\epsilon$ und Vol.element $v^2 dv$
<u>aber</u>: der exponentielle Faktor $\exp(-\epsilon/kT)$ ist für alle Formen von Energie korrekt
z.B. Rotationsenergie, Vibrationsenergie, Anregungsenergie elektronischer Zustände

Maxwell-Boltzmann Verteilung

$$f_{MB}(E) = A^{-1} \exp(-E/kT)$$

$$p(E) = \underbrace{g(E)}\, f_{MB}(E)$$

Zustandsdichte: Anzahl von Möglichkeiten wie System eine gegebene Energie E haben kann

$g(E)\,dE$ Zahl der Zustände im Energieintervall dE bei Energie E

- im Fall der Geschwindigkeitsverteilung für Gasmoleküle ist Zustandsdichte durch Volumenelement $4\pi v^2 dv$ bzw. $\sqrt{E}\,dE$ gegeben
  d.h. $g(E) = \sqrt{E}$
- wenn wir angeregte Zustände im atomaren System betrachten ist $g(E)$ der Entartungsgrad eines gegebenen Zustands

Beispiele: atomares Wasserstoffgas bei Raumtemperatur. Relative Bevölkerung von 1. elektronisch angeregtem Zustand relativ zum Grundzustand

$E_n = -13.6\,eV/n^2$ Entartungsgrad $2n^2$

$kT = 0.0252\,eV$

$$\frac{p(E_2)}{p(E_1)} = \frac{8}{2} \exp(-10.2\,eV/0.0255\,eV) = 4\exp(-405)$$

$$= 0.6 \cdot 10^{-175}$$! verschwindend

bei welcher Temperatur wird $\frac{p(E_2)}{p(E_1)} = \frac{0.1}{0.9}$?

$kT = 2.85\,eV \;\hat{=}\; T = 3.3 \cdot 10^4\,K$

bei einigen 10000 K elektronische Anregung relevant.

für ununterscheidbare Quantenteilchen ist die Maxwell-Boltzmann Verteilung nicht mehr korrekt.

Spin-Statistik Theorem: alle Elementarteilchen mit halbzahligem Spin (Fermionen) folgen der Fermi-Dirac Statistik
alle mit ganzzahligem Spin (Bosonen) der Bose-Einstein Statistik
(W. Pauli konnte dieses Theorem in der relativistischen Quantenfeldtheorie - Quantentheorie komb. mit spezieller Relativitätstheorie beweisen)

Zusammenhang zwischen Spin eines Teilchens und seinem kollektiven Verhalten in einer Gruppe ununterscheidbarer Teilchen nicht trivial.

Fermi-Dirac Verteilung: $f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{A \exp(\epsilon/kT) + 1}$

Bose-Einstein Verteilung: $f_{BE}(\epsilon) = \frac{1}{A \exp(\epsilon/kT) - 1}$

$A = \exp \alpha$ Parameter der vom System abhängen, von der Teilchenzahl* (siehe oben $\frac{1}{A} \propto n$) u.U. der Temperatur, Festlegung je nach Beispiel

* wegen $A \propto \frac{1}{n}$ ist bei kleinen Dichten die Maxwell-Boltzmann Verteilung eine gute Approximation, bei höherer Dichte ist die quantenstatistische Verteilung wichtig.

für Bosonen i.a. meistens Fällen von prakt. Interesse ist A unabhängig von T, oft $\alpha = 0$ $A = 1$

für Fermionen: A ist stark temperaturabhängig $A = \exp(-E_F/kT)$ mit der Fermienergie E_F (siehe unten)

Bosonen (danke $A = 1$): für kleine T wird exp. Faktor groß für E groß $f_{BE} \to 0$
für $E \approx 0$ $\exp 0 = 1 \sim f_{BE}$ divergiert $\to \infty$
Konsequenz: wenn T klein, werden alle Teilchen des Systems den niedrigsten Energiezustand besetzen (Bose-Kondensation)

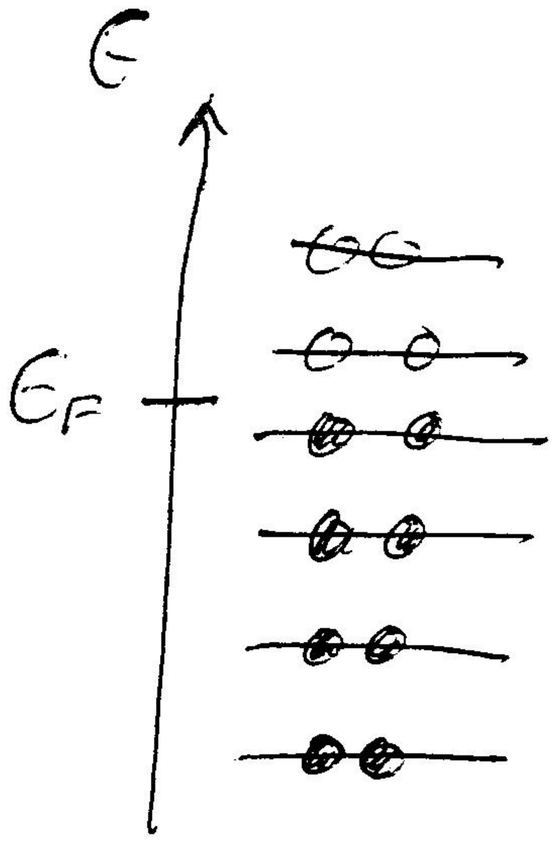
⇒ Fig 8-2

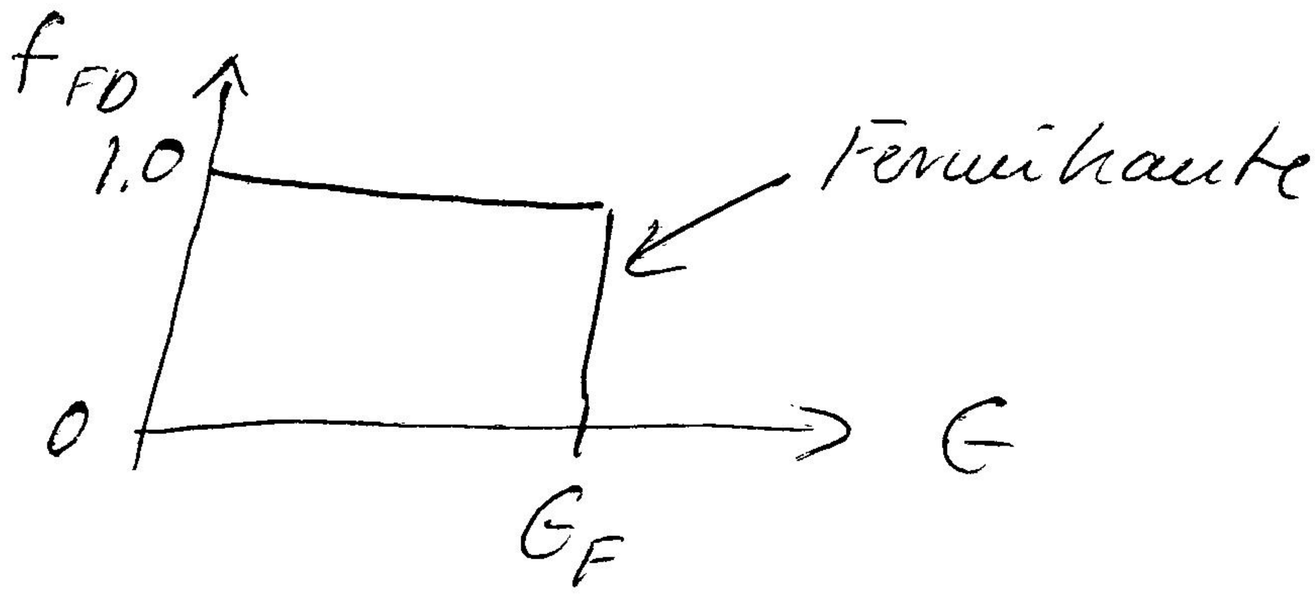
Fermionen: für $E > E_F$ und T klein wird exp. Faktor groß $f_{FD} \to 0$ ähnlich wie f_{BE} und f_{FB}
für $E < E_F$ wird $E - E_F$ negativ und $\exp(E - E_F/kT) \to 0$ für kleine T, d.h. $f_{FD} \to 1$, also Besetzungswahrscheinlichkeit pro Quantenzustand gleich eins, wie bosonen! Pauli-Prinzip

⇒ Fig 8-2

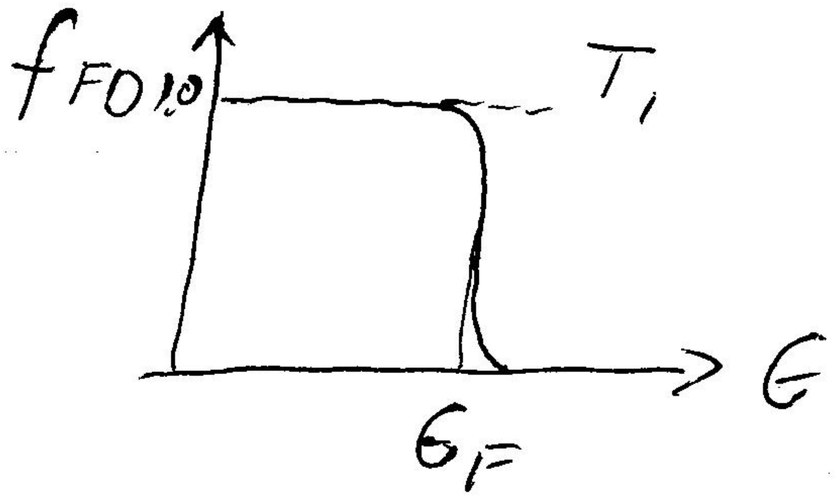
wenn $E \gg kT$ immer exponentieller Abfall, die Unterschiede sind bei kleinen Energien

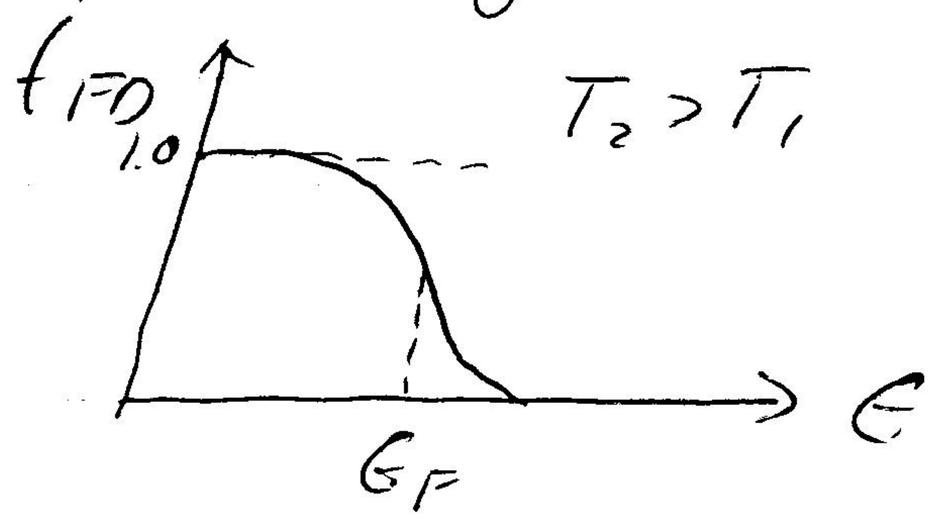
bei $T = 0$ sind alle Energieniveaus bis zu E_F besetzt $\to f_{FD} = 1.0$, und alle Niveaus darüber nicht besetzt $\to f_{FD} = 0$. z.B. für 2-fach entartete Niveaus



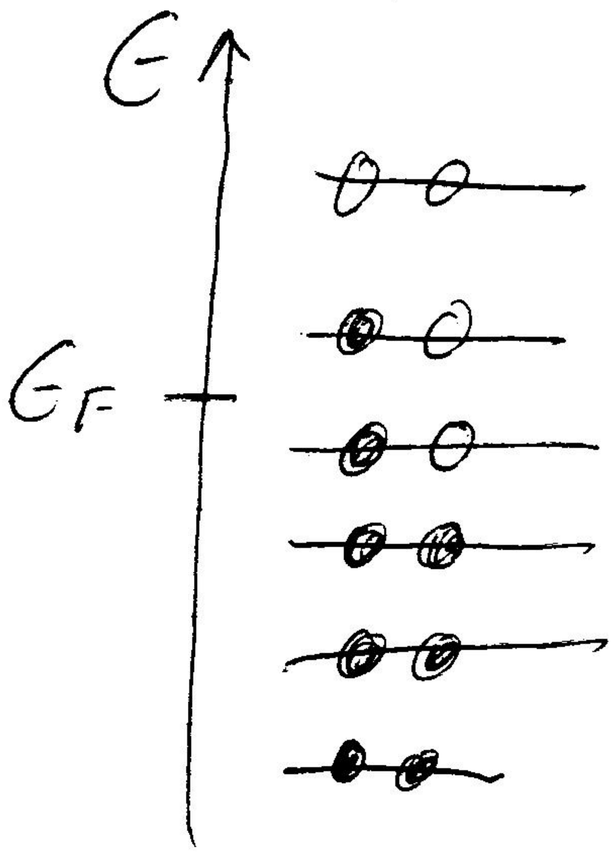


für $T > 0$ erfolgt Aufweichung der Fermihaute:





es gibt eine gewisse Wahrscheinlichkeit ein Elektron in einem Zustand oberhalb von E_F zu finden



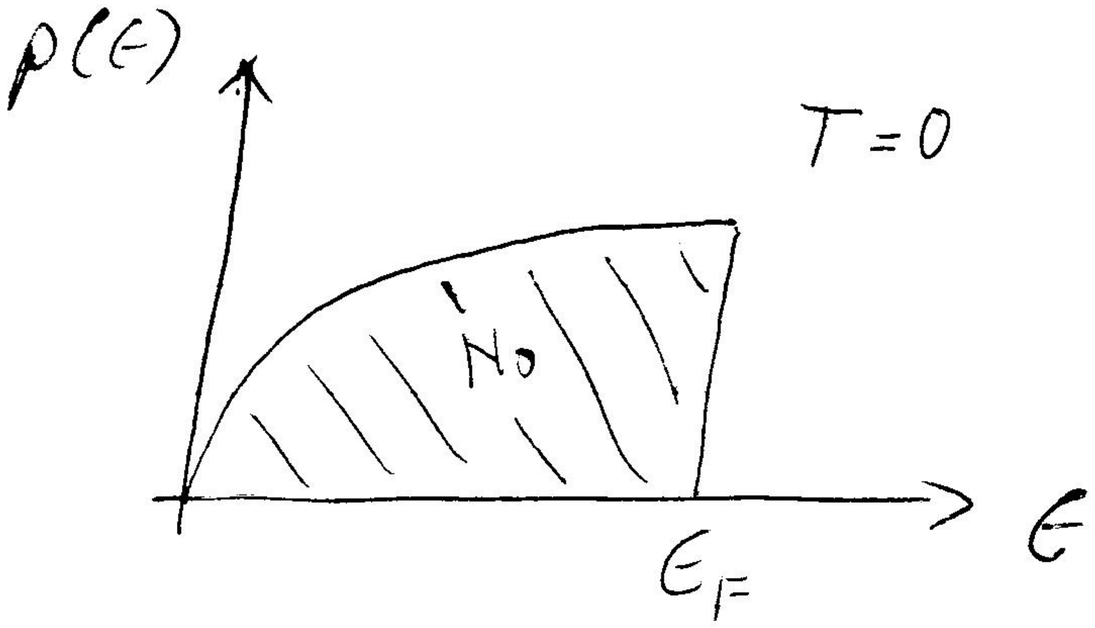
Beispiel Leitungselektronen in Metall: nicht stark gebunden, können sich relativ frei im Metall bewegen. Behandlung als Gas, ab die Fermi-Dirac Statistik gehorchend

etwa 1-2 Leitungselektronen / Atom $n = 2.5 \cdot 10^{22} e^- / cm^3$.

$$g(\epsilon)\,d\epsilon = \frac{8\sqrt{2}\,\pi\, V\, m^{3/2}}{h^3}\,\epsilon^{1/2}\,d\epsilon$$

(siehe Schwarzkörperstrahlung)

$$p(\epsilon)\,d\epsilon = \frac{8\sqrt{2}\,\pi\, V\, m^{3/2}}{h^3}\,\frac{\epsilon^{1/2}\,d\epsilon}{\exp(\epsilon - \epsilon_F/kT) + 1}$$



totale Anzahl von Teilchen : N

$$N = \int_0^\infty p(\epsilon)\,d\epsilon$$ und das Argument ϵ_F bei $T = 0$

$$N_0 = \frac{8\sqrt{2}\,\pi\, V\, m^{3/2}}{h^3}\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2}\,d\epsilon$$

$$\rightarrow \quad \epsilon_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3N_0}{\pi V}\right)^{2/3} \qquad \frac{N_0}{V} = n$$

$$\epsilon_F \propto n^{2/3}$$

mittlere Energie d. Elektronen

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{N_0}\int_0^\infty \epsilon\, p(\epsilon)\,d\epsilon = \frac{2}{3}\,\epsilon_F$$

typische Werte $\epsilon_F = 2 - 7$ eV $\gg kT$

Fermiverteilung bei Raumtemp. sehr scharf

8.2. Das Periodensystem der Elemente

Atome nehmen - wie andere Systeme - den Zustand minimaler Energie ein. D.h. Schalen werden von unten aufgefüllt und jeweils mit dem Pauli-Verbot entsprechenden Zahl von Elektronen besetzt.

$s = 2$ Elektronen
$p = 6$
$d = 10$
$f = 14$
} damit hat jedes Elektron einen eindeutigen Satz von Quantenzahlen

jede Schale kann von $2n^2$ Elektronen besetzt werden

$n = 1$ $(1s)^2$ ← Notation sagt 2 El. in 1s
$n = 2$ $(2s)^2 (2p)^6$ → 8
$n = 3$ $(3s)^2 (3p)^6 (3d)^{10}$ → 18
$n = 4$ $(4s)^2 (4p)^6 (4d)^{10} (4f)^{14}$ → 32
$n = 5$ $(5s)^2 (5p)^6 (5d)^{10} (5f)^{14}$

He	$Z = 2$	Elektronenkonfiguration	$1s^2$
Li	3		$1s^2 2s^1$
C	6		$1s^2 2s^2 2p^2$
Ne	10		$1s^2 2s^2 2p^6$

mit He ist Schale $n=1$ abgeschlossen
mit Ne " 2 "
damit sind alle m_l Unterzustände mit je einem $m_s = 1/2$ und $m_s = -1/2$ Elektron besetzt. Totaler Bahndrehimpuls
$\vec{L} = \sum \vec{l}_i = 0$ totaler Spin $\vec{S} = \sum \vec{s}_i = 0$

für $n \geq 3$ wird Schema komplizierk.
Im Wasserstoff sind alle ℓ Zustände entartet (haben gleiche Energie). In Mehrelektronensystemen ist das nicht mehr der Fall. Verschiedene ℓ/Werte

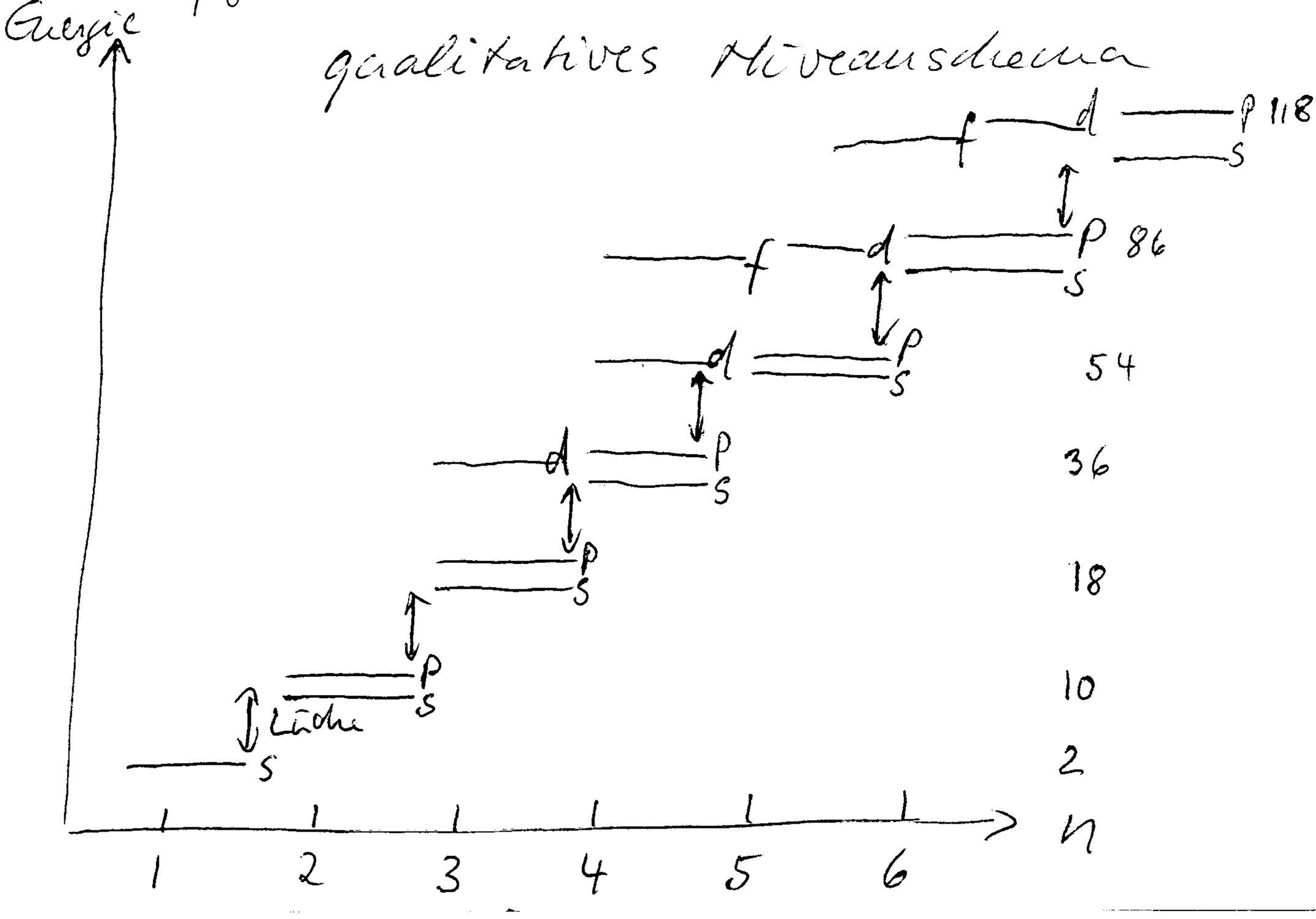
a) Kernladung $Z \rightarrow$ Bindungsenergie $\propto Z^2$ stärker gebunden

b) Coulombabstossung der Elektronen schirmen z.T. Z ab; also $Z_{eff} < Z$

c) Z_{eff} abhängig von Abstand von Kern innen Schalen schon wenige Abschirmung. s-Elektronen schon wenige als p

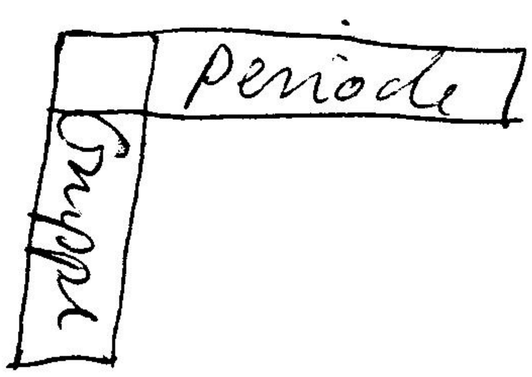
d) Zustände m. versch. ℓ haben verschiedene radiale Wellenfunktion. Bevorzugt je größeres ℓ größere Abstand $\sim$ stärkere Abschirmung $\sim$ ℓ-Entartung wird aufgehoben

qualitatives Niveauschema



durch Lücken getrennte Gruppen füllen zu Schalenstrukturen. Unterschalen mit verschiedenen Bahndrehimpuls. Allerdings ist 3d energetisch nach 4s und vor 4p etc.

Periodensystem der Elemente zuerst 1870 von Mendelejew aufgestellt, Gruppierung nach chemischer Ähnlichkeit. Valenzelektronen, d.h. die Elektronen der äussersten, nicht abgeschlossenen Schale bestimmen die chemischen Eigenschaften.



8 Hauptgruppen (2s u 6p El.)
7 Perioden ≙ Hauptquantenzahl

⟹ Fig 8-4

Nebengruppen:
Übergangsmetalle (Lanthaniden)
Seltene Erden (Aktiniden)

Füllen der 3d- u. 4d-Schale
f Schalen

kurze Diskussion Alkalimetalle, Erdalkalimetalle, Halogene, Edelgase, Halbleiter ↔ Isolatoren ↔ Metalle

ab $Z > 92$ Elemente generell nicht mehr in der Natur vorkommend, instabil, nur relativ kurze Lebensdauer. Bisher im Labor hergestellt und eindeutig nachgewiesen bis $Z = 112$

Zentralsymmetrisches Potential bedeutet, daß alles bis zu einer Lücke aufgefüllt ist. Energieniveaus des letzten gebundenen ⇒ Fig 8-5
Elektronen füllen Schalen und Unterschalenstrukturen.
Beispiel Atomradien

8.3. Drehimpulskopplung

Spins und Bahndrehimpulse der einzelnen Elektronen koppeln zu einem totalen Drehimpuls $\vec{J}$.
Bei Elektron: $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ wegen Richtungsquantisierung von $\vec{l}$ und $\vec{s}$ ebenfalls quantisiert $|\vec{j}| = \hbar \sqrt{j(j+1)}$

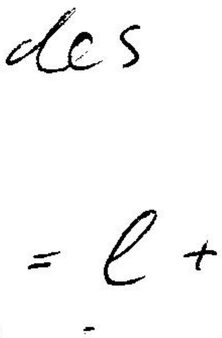
$j_z = m_j \hbar$

da zu 2 Orientierungen des Spins zu fixiert jedes m_l 2 mögliche m_j: $m_j = m_l + 1/2$
$m_j = m_l - 1/2$

$j = l + s$ und $j = |l - s|$

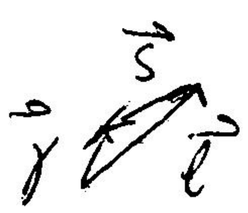
(Dreiecksungleichung $|\vec{j}| \leq |\vec{l}| + |\vec{s}|$
$|\vec{j}| \geq |\vec{l}| - |\vec{s}|$
mit $|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar$ ist nur $j = l \pm s$ möglich)

z.B. $l = 1$ $s = \frac{1}{2}$ 1. $j = l + s = 3/2$ $m_j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$



$|\vec{j}| = \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} = \hbar \sqrt{\frac{15}{4}}$

2. $j = l - s = 1/2$ $m_j = -1/2, 1/2$



$|\vec{j}| = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \hbar \sqrt{\frac{3}{4}}$

für Mehrelektronensysteme gibt es grundsätzlich zwei Kopplungsschemata.

a) Bahndrehimpulse der einzelnen Elektronen können zu einem Gesamtbahndrehimpuls koppeln, ditto für Spins.

$\vec{L} = \sum \vec{l}_i \qquad |\vec{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}$

$L = L_{max}, L_{max}-1, \dots, L_{min}$

$L_z = m_L \hbar \qquad m_L = L, L-1, L-2, \dots, -L$

L, m_L: ganzzahlig oder 0

z.B. 2 Elektronen

$L_{max} = l_1 + l_2 \qquad L_{min} = |l_1 - l_2|$; alle l_i präzedieren um Richtung von $\vec{L}$, daher $m_L = \sum_i m_{l_i}$

ebenso für Spins: $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$

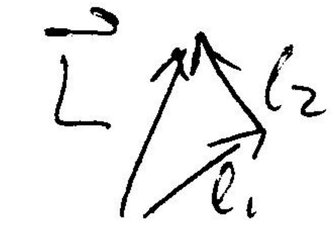
$|\vec{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)} \qquad S = S_{max}, S_{max}-1, S_{min}$

$S_z = m_S \hbar \qquad m_S = \sum_i m_{s_i}$

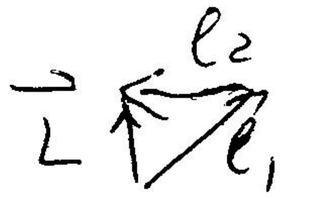
2 Elektronen $S_{max} = 1 \qquad S_{min} = 0$

Kohlenstoff: ${}^{12}_{6}C \quad 1s^2 2s^2 2p^2$

1s und 2s abgeschlossen, bleiben zu L und S Null bei. $2p^2$: 3 Möglichkeiten



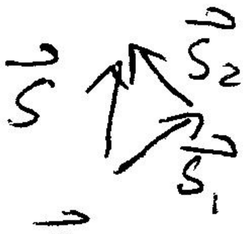
$L = 2 \qquad |\vec{L}| = \sqrt{2\cdot 3}\,\hbar \qquad m_L = 2, 1, 0, -1, -2$



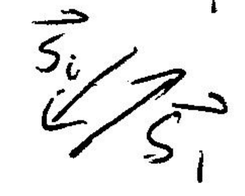
$L = 1 \qquad |\vec{L}| = \sqrt{1\cdot 2}\,\hbar \qquad m_L = 1, 0, -1$

$L = 0 \qquad |\vec{L}| = 0\,\hbar \qquad m_L = 0$

Spins:



$S = 1 \qquad |\vec{S}| = \sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}\,\hbar \qquad m_S = 1, 0, -1$



$S = 0 \qquad |\vec{S}| = 0\,\hbar \qquad m_S = 0$

Diese Kopplung heisst LS-Kopplung oder Russell-Saunders Kopplung und überwiegt für den grössten Teil des Periodensystems.

Jedoch Korrektionen von $\vec{l}_i$ und $\vec{s}_i$ sind bezeichnet (englisch tief)[2].

Coulombabstossung → Elektronen möglichst weit voneinander entfernt, daher erstmal $(2l+1)$ mit Multiplizität niedrigst einfach dann doppelt

1. Hundsche Regel: Von verschiedenen relativen Orientierungen des Spins ist der Zustand mit maximalem Gesamtspin bevorzugt ↔ Spins möglichst parallel orientieren

2. Hundsche Regel: Wenn verschiedene Konfigurationen mit demselben Spin möglich sind ist die mit maximalem Gesamtbahndrehimpuls $|\vec{L}|$ bevorzugt

z.B. 2p-Schale

			1	0	-1	m_l	S	L	J
B	$Z=5$	$1s^2 2s^2 2p^1$	↑				1/2	1	1/2, 3/2
C	6	$2p^2$	↑	↑			1	1	2, 1, 0
N	7	$2p^3$	↑	↑	↑		3/2	0	3/2
O	8	$2p^4$	↑↓	↑	↑		1	1	2, 1, 0
F	9	$2p^5$	↑↓	↑↓	↑		1/2	1	1/2, 3/2
Ne	10	$2p^6$	↑↓	↑↓	↑↓		0	0	0

$\vec{L}$ und $\vec{S}$ sind totale Bahndrehimpuls und Spin

mit "guten" Quantenzahlen L und S
und "koppeln Vektoriell zum Gesamtdrehimpuls J. Für L>S kann J 2S+1 Werte annehmen, für L<S nimmt J 2L+1 Werte an

Diese Russell-Saunders Kopplung gilt für fast alle Atome ausser sehr schwere und ausser bei Fall sehr starken externen Felder.

b) jj - Kopplung
für jedes Elektron koppeln $\vec{l}_i$ und $\vec{s}_i$ zu Gesamtdrehimpuls $\vec{j}_i$ mit $j = l+s, |l-s|$
die $\vec{j}_i$ koppeln dann zum totalen Drehimpuls $\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$

diese jj-Kopplung tritt bei schweren Atomen (Aktiniden) oder bei starken externen Feldern auf (wenn WW mit externem Feld grösser als WW-Coulomb - zwischen den Elektronen

2 Schemata

l_1 l_2 ----- → L
s_1 s_2 --- → S
↓ ↓ ↓
j_1 j_2 --- → J