Experimentalphysik 3

Einführung in die Moderne Physik: Relativität, Quantenphysik, Struktur der Materie

H.J. Specht

Skript der Vorlesung des Wintersemesters 2000/2001 [1]
(in dieser Form auch im WS 01/02 und WS 02/03 gehalten)

Version 15. Februar 2003

[1]Erster Druckentwurf auf der Grundlage des Handmanuskripts des Autors von Andreas Müsing und Christian Hoffmann, mit Unterstützung von Julia Mieth (Hörer im WS 00/01). Vollständige Überarbeitung und Endredaktion P. Glässel und H.J. Specht.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Spezielle Relativitätstheorie

1.1 Experimentelle Abweichungen vom klassischen Relativitätsprinzip Newtons/Galileis

1.1.1 Galilei-Transformation

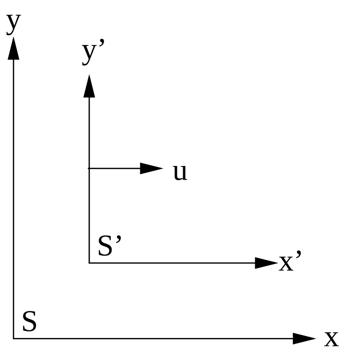
Inertialsysteme

Definition: Ein Inertialsystem ist ein Bezugssystem, in dem das Newton'sche Trägheitsgesetz gilt, d.h. bei Abwesenheit von realen Kräften (wie F_{Feder}, $F_{\text{Reibung}}, \dots$) und Scheinkräften ($F_{\text{Zentrifugal}}$, $F_{\text{Coriolis}}, \dots$) gilt

$$\begin{aligned} \dot{\vec{v}} &= 0 \\ \vec{v} &= \text{const.} \end{aligned}$$

Galilei-Transformation

Das System S' bewegt sich relativ zu S mit gleichförmiger Geschwindigkeit $u = |\vec{u}| = u_x$. Für die Transformation von Raum und Zeit gilt dann



$$\boxed{\begin{aligned} x' &= x - ut \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= t \end{aligned}}$$

Klassisches Relativitätsprinzip

1. Raum und Zeit sind absolut.
2. Alle Inertialsysteme sind im Rahmen der Newton'schen Mechanik gleichwertig, d.h. die physikalischen Gesetze (der Mechanik) sind in allen Inertialsystemen gleich.
3. Absolute Geschwindigkeiten sind sinnlos; es existieren nur relative Geschwindigkeiten.

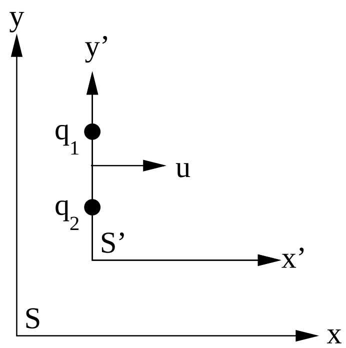
Beispiele

1. Physikalische Gesetze, die physikalische Größen miteinander verknüpfen:
   $\vec{F} = \frac{d}{dt}\vec{p}$, $\vec{M} = \frac{d}{dt}\vec{L}$ (Bewegungsgleichungen)
   $\vec{p} =$ const., $\sum E =$ const. (Erhaltungssätze)
2. Physikalische Größen selbst *können* Galilei-invariant sein:
   Δr, Δt, Δv, $\vec{a} = \frac{d}{dt}\vec{v}$, $\vec{F}, \ldots$, *müssen* aber nicht: $\vec{v}$, $\vec{p}$, E_{kin}.

1.1.2 Verletzung der Galilei-Invarianz I: Elektrodynamik

Die vier Maxwell-Gleichungen bilden das Fundament der klassischen Elektrodynamik. Diese führen aber zu Widersprüchen mit der Galileitransformation:

1. Beispiel: **Lorentzkraft**



Kraft zwischen gleichen Ladungen $q_1 = q_2 = q$

$$\begin{array}{lrcl} \text{in S':} & \vec{F}' & = & \vec{F}'_{\text{el}} = q\vec{E} \\ \text{in S:} & \vec{F} & = & \vec{F}_{\text{el}} + \vec{F}_{\text{magn}} = q(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}_q) < \vec{F}' \\ & \Rightarrow \quad \vec{F} & \neq & \vec{F}' \end{array}$$

$\Rightarrow$ Verletzung der Galilei-Invarianz für die Transformation von Kräften: Im System S' wirkt nur die *abstoßende* elektrostatische Kraft auf die Ladungen, im System S gibt es zusätzlich eine *anziehende* magnetische Kraft.

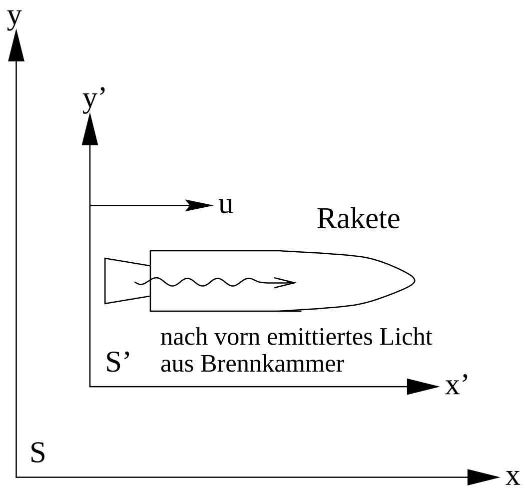
2. Beispiel: **das Ampère'sche Gesetz**

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{\jmath} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

   Die Gleichung enthält explizit eine *absolute* Geschwindigkeit, nämlich c!

3. Beispiel: **Elektromagnetische Wellen**
   Elektromagnetische Wellen sind ein direktes Resultat aus den Maxwellgleichungen. Explizite Vorhersage: Ausbreitung mit c.
   (Hertz: Nachweis von EM, Bestimmung von c); $c = 3.00 \cdot 10^8$ m/s

   Problem erneut: absolute Geschwindigkeit c; relativ wozu? Gedankenexperiment:



Erdbeobachter misst

in S: $v_c = c$

Raketenbesatzung müsste nach Galilei-Transformation messen

in S': $v_c' = c - u$

Dadurch ergibt sich folgendes Dilemma:

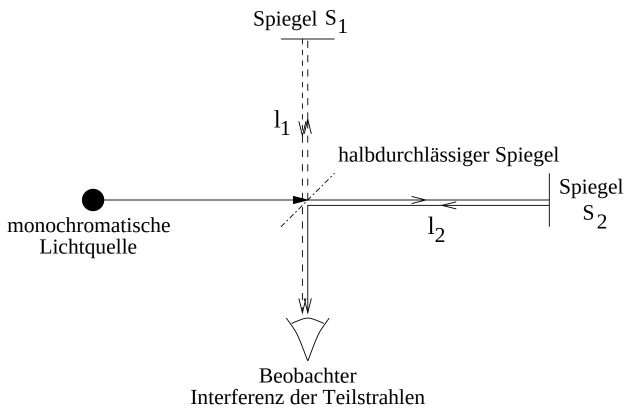
- Entweder sind die Maxwell-Gleichungen falsch, d.h. $c \neq$const. oder
- es sind die Galilei-Transformationen falsch, mindestens für EM-Wellen, oder
- das Relativitätsprinzip ist falsch.

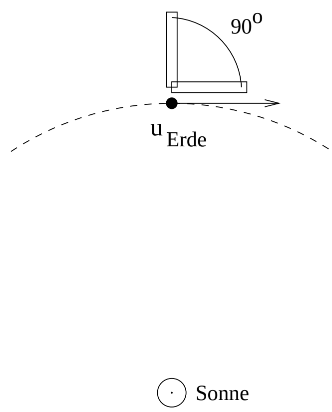
Um die Galilei-Transformationen zu retten, müsste man ein absolutes Bezugssystem einführen.

In Analogie zur Ausbreitung von Schall in Luft, bei der die Ausbreitungsgeschwindigkeit relativ zum Ausbreitungsmedium definiert ist, wurde der "Äther" als Ausbreitungsmedium für Licht und damit als speziell ausgezeichnetes absolutes Bezugssystem postuliert, in dem $v_{\rm vac} = c$; in allen anderen Bezugssystemen wäre dann $v_{\rm vac} \neq c$.

Die Frage, ob ein solches absolutes Bezugssystem existiert, ist nur experimentell entscheidbar! Hierzu zwei Beispiele:

1) Das Michelson-Morley Experiment (historische Entscheidung)





Dieses Experiment wurde 1879 von Maxwell vorgeschlagen, 1881 erstmals von Michelson durchgeführt und dann 1887 von ihm mit seinem Mitarbeiter Morley wiederholt.

Idee: Man nutze die Erde als bewegtes Bezugssystem relativ zum Sonnensystem und messe c in verschiedenen Richtungen. Das absolute Lage des Interferenzmusters ist nicht aussagekräftig. Man hatte daher die geniale Idee, das Gesamtsystem um $90°$ zu drehen. Falls c sich absolut auf den Äther bezieht und die Erde sich mit u relativ zum Äther bewegt, müsste bei Drehung eine Phasendifferenz $\Delta\Phi$ zwischen den Teilstrahlen und damit eine Verschiebung ΔN des Streifenmusters der Interferenz auftreten.

♠ Hinweis Bild: Giancoli's Physics, Fig. 26-3

In der Näherung $u \ll c$, $l_1 \approx l_2 = l$

$$\text{Normalstellung } (0°): \quad \Delta N_0 = \frac{\Delta\Phi_0}{2\pi} = \frac{l}{\lambda}\left(\frac{u}{c}\right)^2$$

$$\text{Gedreht } (90°): \quad \Delta N_{90} = \frac{\Delta\Phi_{90}}{2\pi} = -\frac{l}{\lambda}\left(\frac{u}{c}\right)^2$$

$$\text{Unterschied: } \Delta N = \frac{\Delta\phi}{2\pi} = \frac{2l}{\lambda}\left(\frac{u}{c}\right)^2$$

Erwartete Werte (mit $u = 3 \cdot 10^4$ m/s, $(u/c)^2 = 10^{-8}$, $\lambda = 590$ nm):

Michelson 1881:	$l = 1.2$ m	$\Rightarrow \Delta N = 0.04$
1887:	$l = 11$ m	$\Rightarrow \Delta N = 0.37$
Demo-Exp. im Hörsaal:	$l = 0.1$ m	$\Rightarrow \Delta N = 0.003$

Experimentelles Resultat:

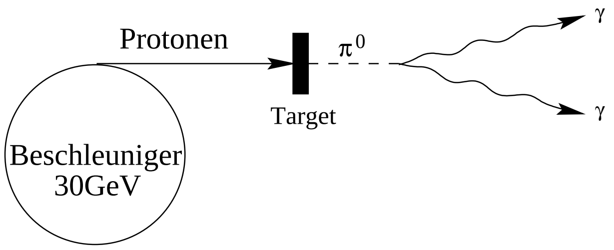
$$\left.\begin{array}{l}\text{Drehungen}\\ \text{Tag- und Nachtunterschiede}\\ \text{Verfolgung über 1 a}\end{array}\right\} \quad \text{immer} \quad \Delta N = 0!$$

♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 4-3

Revolutionäre Schlussfolgerung: c ist isotrop, d.h. in allen Raumrichtungen gleich. Die Galilei-Transformationen sind für Licht nicht anwendbar ($c' = c$). Daraus ergibt sich das Prinzip der Konstanz der Lichtgeschwindigkeit:

Die Vakuumlichtgeschwindigkeit ist konstant, d.h. unabhängig vom Bewegungszustand der Quelle oder des Beobachters.

2) Zerfall von neutralen Pionen, π^0, in zwei Photonen

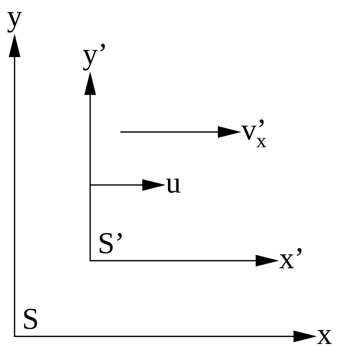


$p + p \to \pi^0 + \ldots$
$\pi^0 \to \gamma + \gamma$ in $\tau_0 \approx 10^{-16}$s
$v_{\pi^0} \approx 0.999c$

Die neutralen Pionen zerfallen im Flug, d.h. sie stellen eine bewegte Quelle dar. Nach der Galilei-Transformation müsste dann gelten $v_\gamma = v_{\pi^0} + c \approx 2c$, stattdessen: $v_\gamma = c$. Die Geschwindigkeit der Quelle teilt sich den γ-Quanten überhaupt nicht mit!

1.1.3 Verletzung der Galilei-Invarianz II: Mechanik

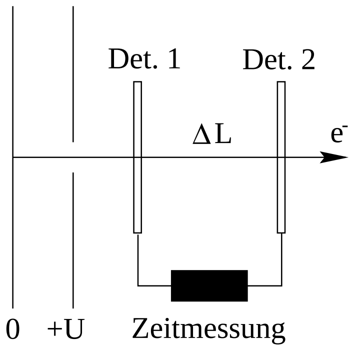
Existenz einer Grenzgeschwindigkeit für materielle Körper

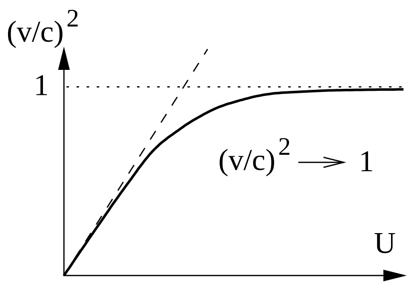


$$v'_x = v_x - u \quad \text{d.h.} \quad v_x = v'_x + u$$

„Additionstheorem" der Geschwindigkeiten: Von S aus betrachtet ist v_x größer als v'_x. Nach der Galileitransformation ist ein sukzessives Addieren von Geschwindigkeiten möglich, so dass es keine Grenzgeschwindigkeit gibt.
Beobachtung stattdessen: Es gibt ein v_{Grenz} mit $v_{\mathrm{Grenz}} = c$.

Beispiel: Elektronen aus einem Beschleuniger





Geschwindigkeit aus Messung: $v = \Delta L / \Delta T$
Erwartete Endgeschwindigkeit aus Energiesatz

$$E_{\mathrm{kin}} = eU = \frac{1}{2} m v^2 \Rightarrow v^2 \propto U$$

$$\text{Befund:} \ \left(\frac{v}{c}\right)^2 \not\propto U$$

Für immer größer werdende Energie findet man stattdessen $(v/c)^2 \to 1$.

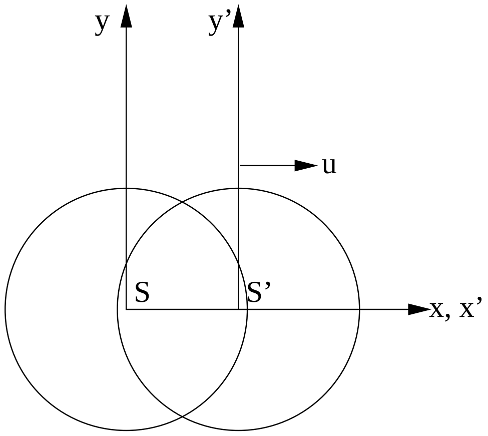
♠ Hinweis Bild: Bergmann-Schäfer I, Fig. A.1, S. 977

♠ Hinweis Tabelle: Bergmann-Schäfer I, Tab. A.1, S. 975 (Experimente zur Konstanz von c und zur Grenzgeschwindigkeit c)

1.2 Lorentz-Transformation

Einsteins Ausgangspostulate (1905):

1. Verallgemeinertes Relativitätsprinzip: Es gibt kein physikalisch bevorzugtes Bezugssystem. Die Gesetze der Physik sind in allen Inertialsystemen gleich.
2. Prinzip der Konstanz von c: Die Vakuumlichtgeschwindigkeit c ist in allen Inertialsystemen gleich.



Zur Zeit $t = t' = 0$ sei $x = x' = y = y' = z = z' = 0$.
Am Ursprung wird dann ein kurzer Lichtpuls ausgesandt.
In S: Das Signal breitet sich in alle Richtungen mit $r = ct$ aus.
In S': Das Signal breitet sich in alle Richtungen mit $r' = ct'$ aus. (Kugelflächen)

Da $c =$ const. gilt: (die Quelle „weiß“ nichts von der Bewegung von S')

$$x^2 + y^2 + z^2 - c^2t^2 = {x'}^2 + {y'}^2 + {z'}^2 - c^2{t'}^2 = \text{invariant, d.h. gleich in allen Bezugssystemen}$$

Diese Bedingung wird von der Lorentz-Transformation erfüllt (linearer Ansatz, durch Nachprüfen leicht einsehbar).

$$\boxed{\begin{array}{rclcrcl} x' &=& \gamma\,(x - ut) & & & & \\ y' &=& y & & \gamma &=& \dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \\ z' &=& z & & & & \\ t' &=& \gamma\left(t - \dfrac{u}{c^2}x\right) & & \beta &=& \dfrac{u}{c} \end{array}}$$

Die inversen Transformation erhält man, wenn u überall durch $-u$ ersetzt wird und gestrichene und ungestrichene Variablen vertauscht werden:

$$\boxed{\begin{array}{rcl} x &=& \gamma\,(x' + ut') \\ y &=& y' \\ z &=& z' \\ t &=& \gamma\left(t' + \dfrac{u}{c^2}x'\right) \end{array}}$$

Kommentare:

1. Es gilt $x' = x'(x,t)$, sowie $t' = t'(t,x)$, d.h. Zeit und Ort sind vollkommen symmetrisch miteinander verknüpft, insbesondere gilt $t' \neq t$!

2. Für $u \ll c:\ \gamma \to 1,\ x' \to x - ut,\ t' \to t$: Für kleine Geschwindigkeiten geht die Lorentz-Transformation in die Galilei-Transformation über.

3. $u \to c$: Reelle Lösungen nur für $u < c \Rightarrow$ Die exakte Lichtgeschwindigkeit ist für materielle Körper unerreichbar, d.h. u_{Grenz} ergibt sich hier als Folgerung.

Alternative Herleitung der Lorentz-Transformation (s. Sexl orig., s. Bergmann Schäfer cit.)

Ausreichend sind

1. Das Relativitätsprinzip,

2. die Homogenität der Raumzeit (Koordinaten-Ursprung in Raum und Zeit willkürlich)

3. und Isotropie des Raumes (Raumachsen beliebig)

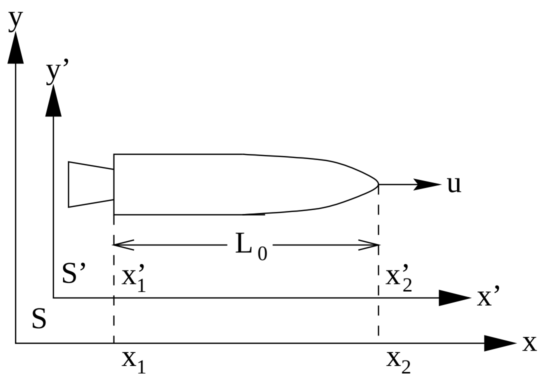
Es folgen Lorentz-Transformation und die Existenz einer Grenzgeschwindigkeit u_{Grenz}. Erneut wird ein experimentelles Faktum benötigt, hier $u_{\text{Grenz}} = c$. Das Prinzip der Konstanz von c ergibt sich dann als Folgerung.

1.3 Relativistische Kinematik

In der Galileitransformation sind $\Delta\vec{r}$, $\Delta t \ldots$ Invarianten. Dies ist in der Lorentz-Transformation nicht mehr der Fall, mit scheinbar sonderbaren Konsequenzen.

1.3.1 Längenkontraktion

(verschiedene Orte, gleiche Zeit)



Die Rakete ruht in S'. Die „Eigenlänge“ $L_0 = x_2' - x_1'$ ist die Länge der Rakete, von der Besatzung in den Punkten x_1' und x_2' gleichzeitig, d.h. für $t_1' = t_2'$, bestimmt (hier kommt es allerdings auf die Gleichzeitigkeit nicht an, da der Maßstab relativ zur Rakete ruht).
Ein Beobachter in S misst $L = x_2 - x_1$, dabei sind x_2 und x_1 durch Ablesen eines Maßstabes zur gleichen Zeit $t_2 = t_1$ in S zu bestimmen:

$$x_2' = \gamma\,(x_2 - ut_2) \quad x_1' = \gamma\,(x_1 - ut_1)$$
$$\Rightarrow L_0 = (x_2' - x_1') = \gamma(x_2 - x_1) = \gamma L$$

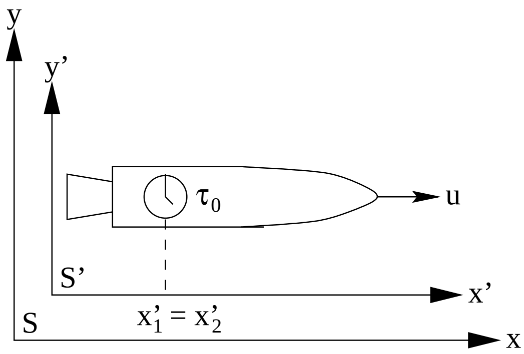
$$\boxed{L = L_0\sqrt{1-\beta^2} < L_0}$$

„Bewegte Maßstäbe sind kürzer“ (in Bewegungsrichtung)

Beispiel:**Magnetfeld eines stromdurchflossenen Drahtes** als direkte Konsequenz der Lorentz-Kontraktion der bewegten Linienladung (s.u.)

1.3.2 Zeitdilatation

(verschiedene Zeiten, gleicher Ort)



Die „Eigenzeit“ $\tau_0 = t'_2 - t'_1$ in S' sei die zeitliche Dauer eines Vorgangs in S', gemessen am gleichen Ort $x'_2 = x'_1$.
Ein Beobachter im System S misst: $\tau = t_2 - t_1$ am gleichen Ort $x'_2 = x'_1$.

$$t_2 = \gamma\left(t'_2 + \frac{u}{c^2}x'_2\right) \quad t_1 = \gamma\left(t'_1 + \frac{u}{c^2}x'_1\right)$$

$$\Rightarrow \quad \tau = t_2 - t_1 = \gamma(t'_2 - t'_1) = \gamma\tau_0$$

$$\boxed{\tau = \frac{\tau_0}{\sqrt{1-\beta^2}} > \tau_0}$$

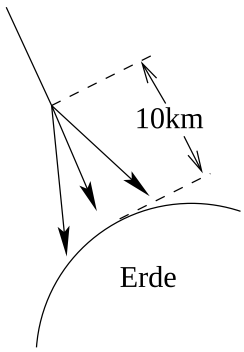
„Bewegte Uhren gehen langsamer“, d.h. der Beobachter in S misst eine längere Periodendauer der bewegten Uhr.

♠ Hinweis Bild: Giancoli's Physics Fig. 26-8

Experimentelle Beispiele

1) Zerfall von Myonen

In der primären kosmischen Strahlung bilden Protonen im Multi-GeV-Bereich ($\gamma \gg 1$) die stärkste Komponente. Diese reagieren mit den Atomen der Erdatmosphäre:



p $\to$ N oder O $\Rightarrow \pi^+, \pi^- + \ldots$ (Schauer-Bildung)

Anschließender Zerfall: $\pi^\pm \to \mu^\pm + \nu$

Lebensdauer der Pionen: $\tau_0 = 2.6 \cdot 10^{-8}$s

Weiter Zerfall: $\mu^\pm \to e^\pm + \nu_e + \nu_\mu$

Lebensdauer der Myonen:$\tau_0 = 2.2 \cdot 10^{-6}$ s

Wegen ihrer Langlebigkeit erreichen nur die Myonen die Erdoberfläche („sekundäre“ kosmische Strahlung). Interessantes Problem: Laufweg $v \cdot \tau_0 \approx c \cdot \tau_0 = 660$ m. Die Bildung der Myonen findet aber im Mittel in einer Höhe von 10 km statt. Der Zerfall folgt dem Gesetz $N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$, d.h. auf der Erdoberfläche dürfte nur ein Bruchteil e^{-15} (10 km/660 m = 15) der Myonen ankommen. Tatsächlich überlebt jedoch ein beträchtlicher Teil, $\approx e^{-1}$.

Erklärung: Die Myonen haben im Mittel eine Geschwindigkeit $\langle v \rangle_\mu = 0.998c \Rightarrow \gamma \approx 15$.

1. Aus Sicht des Erdbewohners gilt: $\tau = \gamma\tau_0 = 15\tau_0 = 30\ \mu$s. Die Lebensdauer des Myons scheint also verlängert (30μs), daher kommen die Teilchen auf einem Weg von 10 km doch zur Erde.
2. Aus Sicht des Myons gilt: Die Lebensdauer ist fest ($2.2\ \mu$s), aber der Weg zur Erde scheint um den Faktor 15 verkürzt zu sein (Längenkontraktion): $L = L_0/\gamma \approx 660$ m, die Myonen kommen also doch bis zur Erdoberfläche.

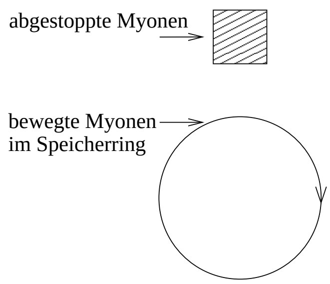
2) Zeitdilatation für bewegte Uhren

a) Uhr im Flugzeug (1971): $v \approx 1000$ km/h, $\beta \approx 10^{-6}$, $\gamma - 1 = 0.5 \cdot 10^{-12}$
Zeitdifferenz nach Rückkehr ($\tau_0 = 45$ h): $\Delta t = \tau - \tau_0 = (\gamma - 1)\tau_0 \approx 0.5 \cdot 10^{-12}\tau_0 \approx 10^{-7}$ s

Space Shuttle: $v = 7.7$ km/s, $\beta = 2.6 \cdot 10^{-5}$, $\gamma - 1 = 3.3 \cdot 10^{-10} \Rightarrow \Delta t/\text{Umlauf} = 1.8\ \mu$s
Hier sind allerdings aufgrund der unterschiedlichen Gravitationspotentiale noch Effekte der Allgemeinen Relativitätstheorie (ART) zu beachten.

3) Erzeugung von Myonen mit Beschleuniger

Ein Teil der Myonen wird abgestoppt: $v \approx 0, \tau = \tau_0 = 2.2 \cdot 10^{-6}$ s. Ein anderer Teil verbleibt im Speicherring mit $\gamma \gg 1$, $\tau \gg \tau_0$ und überlebt entsprechend länger.

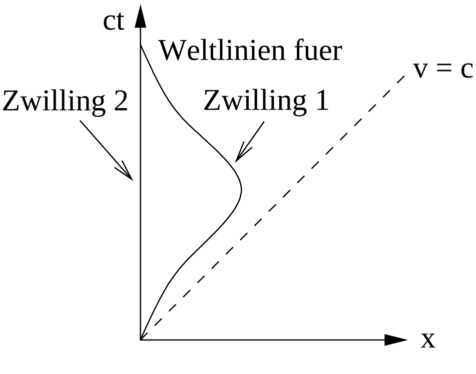


♠ Hinweis Tabelle: Bergmann-Schäfer I, Tab. A.1, S. 975 (Experimente zur Zeitdilatation mit Myonen)

4) Das Zwillingsparadoxon

Zwilling 1 verlässt die Erde in einem schnellen Raumschiff mit $\gamma = 20$, während sein Bruder 2 auf der Erde bleibt. Nach 20 Jahren Erdzeit kehrt Zwilling 1 zu seinem Bruder auf die Erde zurück. Seine biologische Uhr wurde auf $20\text{a}/\gamma = 1\,\text{a}$ verlangsamt.

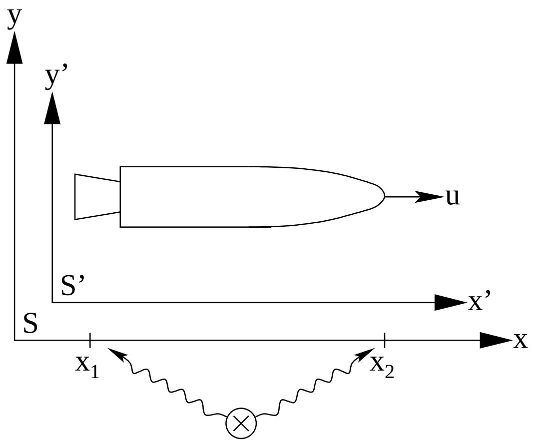
Im Minkowski Diagramm lässt sich der Verlauf der Reise darstellen.



Paradoxon: Warum gilt die umgekehrte Schlussfolgerung nicht, dass sich vom Standpunkt des Raumfahrers aus der Erdbewohner bewegt und dieser deshalb nur wenig gealtert sein dürfte?
Lösung: zweifacher Wechsel der Inertialsysteme des Raumfahrers ist ursächlich für die Unsymmetrie des Problems.

1.3.3 Relativität der Gleichzeitigkeit

(verschiedene Orte, verschiedene Zeiten)



In S:
Zwei Ereignisse gleichzeitig an verschiedenen Orten, z.B. Lichtsignal aus der Mitte von den Punkten x_1 und x_2: $t_1 = t_2$
⇒Synchronisierung von Uhren in S

In S':

$$t'_2 = \gamma\left(t_2 - \frac{u}{c^2}x_2\right),\ t'_1 = \gamma\left(t_1 - \frac{u}{c^2}x_1\right)$$

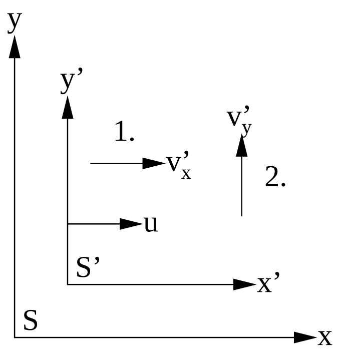
$$\Rightarrow \Delta t' = t'_2 - t'_1 = -\gamma\frac{u}{c^2}(x_2 - x_1) < 0$$

$t'_2 < t'_1$: Das Ereignis bei x_2 erscheint dem Beobachter zeitlich vor x_1

„Gleichzeitigkeit ist relativ.“ Zwei Uhren, die in einem System an verschiedenen Orten synchronisiert sind, sind in keinem anderen relativ dazu bewegten Bezugssystem synchron.

♠ Hinweis Bild: Giancoli's Physics Fig. 26-7

1.3.4 Relativistische Addition von Geschwindigkeiten



Allgemeine Lösung für v'_x, v'_y, v'_z gleichzeitig $\neq 0$: siehe Literatur.
Hier Beschränkung auf Sonderfälle. Dabei wird verwendet, dass:

$$x = \gamma(x' + ut'), \quad dx = \gamma(dx' + udt') \text{ sowie}$$

$$t = \gamma(t' + \frac{u}{c^2}x'), \quad dt = \gamma(dt' + \frac{u}{c^2}dx')$$

Sonderfall 1: $v'_x \neq 0$, $v'_y = 0$

$$v_x = \frac{dx}{dt} \Rightarrow \boxed{v_x = \frac{v'_x + u}{1 + \frac{uv'_x}{c^2}}, \quad v_y = v_z = 0}$$

- Beispiel: $u \to c$, $v'_x \to c \Rightarrow v_x \to c$ (nicht $2c$ wie bei Galilei-Transformation)
- Beispiel: Zwei Teilchen kommen sich mit je $0.9c$ entgegen. Die Relativgeschwindigkeit ist $0.995c$ und nicht $1.8c > c$ wie nach Galilei ⇒ Grenzgeschwindigkeit c

Sonderfall 2: $v'_y \neq 0$, $v'_x = 0$

$$v_y = \frac{dy}{dt} = \frac{dy'}{\gamma dt'} = \frac{v'_y}{\gamma} \Rightarrow \boxed{v_y = \sqrt{1-\beta^2}\, v'_y \quad v_x = u}$$

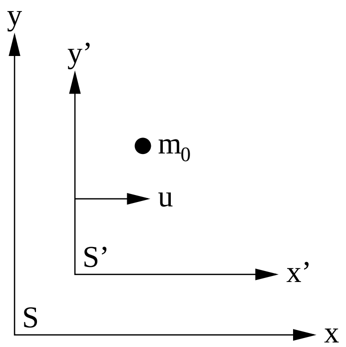
- Beispiel: $u \to c \Rightarrow v_x \to c$, $v_y \to 0$, unabhängig von v'_y! (Grenzgeschwindigkeit c)

1.4 Relativistische Dynamik

Dynamik behandelt Begriffe wie Masse, Impuls und Kraft sowie ihren Zusammenhang (z.B. Bewegungsgleichungen). Eine Modifikation dieser Begriffe ist notwendig, damit die fundamentalen Gesetze (Bewegungsgleichungen, Erhaltungssätze) entsprechend dem Relativitätsprinzip in allen Systemen gelten, d.h. Lorentz-invariant sind.

1.4.1 Masse und Impuls

Die Definition $\vec{p} = m\vec{u}$ wird beibehalten, aber: $m = m(u)$



In S': Masse m_0 ruhend (Ruhemasse).
In S gilt $m > m_0$ (bewegte Masse).

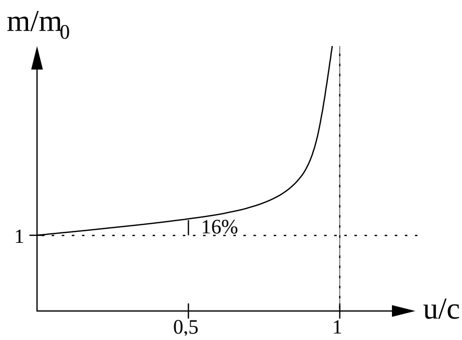
$$\boxed{\begin{gathered} m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma m_0 \\ \vec{p} = \gamma m_0 \vec{u} \end{gathered}}$$

„Bewegte Massen sind träger/größer." Die Trägheit ist abhängig vom Bewegungszustand.

Grenzfälle

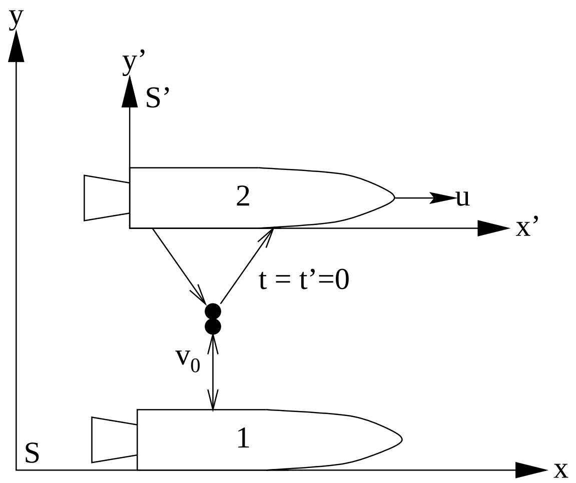
a) $u \ll c \;\Rightarrow\; m \approx m_0$ (Galilei-invariant),
$\vec{p} = m_0\vec{u}$ wie früher

b) $u \to c \;\Rightarrow\; m \to \infty$
Der Grenzfall $m \to \infty$ ist konsistent mit der Existenz der Grenzgeschwindigkeit c: Bei Vorhandensein einer konstanten Kraft F geht für $m \to \infty$ die Beschleunigung $a \to 0$ und „verhindert" so eine weitere Geschwindigkeitszunahme.



♠ Hinweis Tabelle: Bergmann-Schäfer I, Tab. A1, S. 975 (Experimente zur relativistischen Massenzunahme)

Relativistischer Impuls und Begründung für $m = m(u)$



Gedankenexperiment: Zwei Raumschiffe fliegen mit der Geschwindigkeit $\vec{u}$ aneinander vorbei. In jedem Raumschiff wird ein Ball $\perp$ zur Flugrichtung geworfen, so dass sich die Bälle zentral treffen und vollkommen elastisch reflektiert werden. Die Zeichnung entspricht der Betrachtung von S aus: elastische Reflexion der beiden Bälle zur Zeit $t = t' = 0$.
Annahme: vollständige Symmetrie im jeweiligen System, d.h.
$v_1 = v_2 = v_0$
$m_1 = m_2 = m_0$
$v_0 \ll c$

Anwendung der Impulserhaltung

- In Längsrichtung: aus der Symmetrie des Problems folgt: kein Impulsaustausch in x-Richtung, d.h. $p_{1x} = 0$, $p_{2x} = const.$ (vor und nach dem Stoß)
- In Querrichtung:
  Quergeschwindigkeit von Ball 1 in S: $v_y = v_0$, Impuls von Ball 1: $p_{1y} = m_0 v_0$
  Quergeschwindigkeit von Ball 2 in S': $v'_y = v_0$, Impuls von Ball 2: $p'_{2y} = m_0 v_0$

Transformation für Ball 2 auf S:

$$v_y = \frac{v_0}{\gamma} \text{ wird kleiner, } m = \gamma m_0 \text{ wird größer.}$$

Die Impulskomponente $p_{2y} = m v_y = m_0 v_0 = p_{1y}$ bleibt erhalten, aber auch $p_{2y} = p'_{2y}$

1) Die Forderung $m = m(u)$ ist notwendig, um Impulserhaltung sicherzustellen.

2) Der Querimpuls $p_y = p'_y$ ist Lorentz-invariant.

1.4.2 Bewegungsgleichung und Transformation von Kräften

Gemäß dem Relativitätsprinzip gilt in allen Bezugssystemen: $\vec{F} = \dfrac{d\vec{p}}{dt}$

$$\text{Mit } \vec{p} = m\vec{u} \Rightarrow \vec{F} = \vec{u}\left(\frac{dm}{dt}\right) + m\left(\frac{d\vec{u}}{dt}\right)$$

$\vec{F}$ ist *nicht* Lorentz-invariant;
im Allgemeinen ist $\vec{F}$ nicht parallel zu $\vec{a}$.

a) Vereinfachung: $v'_x = 0$, d.h. $m = m_0$ ruhend in S'.
   Wirkt darauf eine Kraft $\vec{F'}$, so ist $\vec{F'} = \dfrac{d\vec{p}\,'}{dt'}$.
   Für die Transformation ins System S gilt dann

in y-Richtung $F_y = \frac{dp_y}{dt} = \frac{dp'_y}{\gamma dt'} = \frac{1}{\gamma} F'_y < F'_y \qquad (p_y = p'_y; dt = \gamma dt')$

in x-Richtung $F_x = F'_x$

$$\Rightarrow \boxed{F_\perp = \frac{1}{\gamma} F'_\perp, \quad F_\| = F'_\|}$$

b) Allgemeine Transformationsgleichungen für $F_\perp$ und $F_\|$ für $\vec{v}' \neq 0$ (siehe Literatur):

$$\boxed{F_\perp = \frac{F'_\perp}{\gamma\left(1 + \frac{uv'_x}{c^2}\right)} \qquad F_\| = \frac{F'_\| + \frac{u}{c^2}\left(\vec{F}' \times \vec{v}'\right)_\|}{\left(1 + \frac{uv'_x}{c^2}\right)}}$$

1.4.3 Äquivalenz von Masse und Energie

Definition der Arbeit nach der Newton'schen Mechanik:

$$A = \int_{\text{Weg}} \vec{F} d\vec{r}.$$

Die Arbeit, die benötigt wird, um ein Teilchen der Masse m_0 auf die Geschwindigkeit u zu bringen, heißt „kinetische Energie“

$$E_k = \int_{u=0}^{u} \vec{F} d\vec{r}.$$

Annahme: Bewegung in x bzw. in x'-Richtung

$$dE_k = F\,dx = \frac{dpdx}{dt} = u\,dp = u\,d(mu) = u^2\,dm + mu\,du$$

Verwende die Gleichung für die relativistische Gesamtenergie:

$$\begin{aligned} m_0^2 &= m^2\left(1 - \left(\frac{u}{c}\right)^2\right) \\ m^2c^2 &= m^2u^2 + m_0^2c^2 \mid \text{differenzieren} \\ c^2\,dm &= u^2\,dm + mu\,du \\ \Rightarrow dE_k &= c^2\,dm \\ E_k &= c^2 \int_{u=0}^{u} dm = c^2\,(m(u) - m_0) \end{aligned}$$

$$\boxed{E_k = mc^2 - m_0c^2}$$

Grenzfall für $u \ll c$:

$$\text{mit } \frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{u}{c}\right)^2}} \approx 1 + \frac{1}{2}\frac{u^2}{c^2} \Rightarrow E_k \approx \left(1 + \frac{1}{2}\frac{u^2}{c^2} - 1\right) m_0 c^2 = \frac{1}{2} m_0 u^2$$

Dies entspricht dem klassischen, nicht-relativistischen Ausdruck.

Einsteins revolutionäre Interpretation der Gleichung: Jede Zunahme an Bewegungsenergie entspricht auch einer Massenzunahme.

Einsteins noch weitergehende Verallgemeinerung: Dies ist auch separat gültig für die beiden Teile der Gleichung.

$$\boxed{E_0 = m_0 c^2}$$

nennt man *„Ruheenergie“* der Masse m_0, sie ist bereits vorhanden, bevor die Kraft $\vec{F}$ Arbeit an m_0 geleistet hat.

$$\boxed{E = mc^2} = E_k + E_0$$

ist die *„Gesamtenergie“* (ohne E_{pot}) der Masse m_0 mit der Geschwindigkeit u.

Beispiele zur Energie-Masse-Äquivalenz

1. **Ruheenergie/Masse:**

Teilchen	$e^\pm$	$\mu^\pm$	$\pi^\pm$	π^0	p	n
Ruheenergie in MeV	0.51	105.7	139.6	135.0	938.3	939.6

2. **Umwandlung von Bewegungsenergie in Ruhemasse:**

   Ein Elektron und ein Positron (Leptonen) mit den Ruheenergien m_0c^2 und den kinetischen Energien $mc^2 \gg m_0c^2$ treffen aufeinander: $e^+ + e^- \rightarrow$ neue Teilchen mit $m_0 \gg m_{\text{el}}$, z.B. $\rho, \Phi, J/\psi, \Upsilon, Z_0$

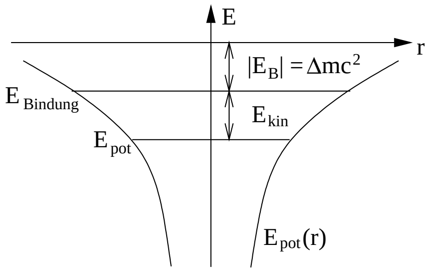
   ♠ Hinweis Bild: Povh „Teilchen + Kerne” Fig. 9.3

3. **Umwandlung von Ruhemasse in Strahlungsenergie:**

   Ein Positronium-„Atom“ aus e^- und e^+ kann unter der Aussendung von zwei γ-Quanten in elektromagnetische Strahlung zerfallen.

4. **Massendefekt:**

   Gebundene Systeme haben eine Bindungsenergie $E_B < 0$, d.h. die Gesamtmasse ist etwas geringer als die Summe der einzelnen Massen.



Beispiel 2-Körperproblem mit $1/r$-Potential (Erde-Sonne; H-Atom)

bindende Kraft	Körper	$\Delta m/m$
Gravitation	Erde-Sonne	10^{-14}
	Sterne (H)	10^{-6}
	Sterne (Fe)	10^{-3}
	Neutronensterne	0.2
Elekromag. WW	H-Atom	10^{-8}
	Pb-Atom	10^{-6}
Starke WW	Atomkerne	10^{-2}

1.4.4 Energie und Impuls

Verwende noch einmal die Gleichung für die relativistische Gesamtenergie:

$$\begin{aligned} m^2\left(1-\frac{u^2}{c^2}\right) &= m_0^2 \qquad \Big| \cdot c^4 \\ m^2c^4 &= m^2u^2c^2 + m_0^2c^4 \end{aligned}$$

$$\boxed{E^2 = p^2c^2 + \left(m_0c^2\right)^2}$$

oder $E^2 - p^2c^2 = E_0^2 =$ invariant gegenüber Lorentz-Transformation (analog zu $r^2 - c^2t^2$).

Durch Einsetzen von $E = E_k + m_0c^2$ ergibt sich

$$\boxed{E_k^2 + 2m_0c^2E_k = (pc)^2}$$

Grenzfälle

1. Nichtrelativistischer Bereich: $E_k \ll m_0c^2: \quad E_k = \dfrac{p^2}{2m} \propto p^2$
2. Extrem relativistischer Bereich: $E_k \gg m_0c^2: \quad E_k = pc \propto p$,
   $p = mu = \dfrac{E}{c^2}u = \dfrac{p}{c}u \quad \Rightarrow \quad u \to c$

Teilchen mit der Ruhemasse 0

Für $m_0 = 0$ gilt streng $u = c$.

$m_0 = 0: \quad u = c \quad E = pc \quad E = E_k$
Teilchen mit der Ruhemasse 0 bewegen sich mit Lichtgeschwindigkeit!

Beipiele

1. „Bindeteilchen der fundamentalen Wechselwirkungen" (alles Bosonen, siehe §3)

Schwache WW	Intermediäre Bosonen Z, $W^{\pm}$	$m_0 \neq 0$
Elektromagn. WW	Photonen γ	$m_0 = 0$
Starke WW	Gluonen g	$m_0 = 0$

2. „Fundamentale Strukturteilchen" (alles Fermionen, siehe §3)

Quarks q	u,d,s,c,b,t	$m_0 \neq 0$	dynamischer Bereich über
geladene Leptonen	e, μ, τ	$m_0 \neq 0$	Faktor 10^5
neutrale Leptonen	ν_e, ν_μ, ν_τ	m_0 „fast" 0	

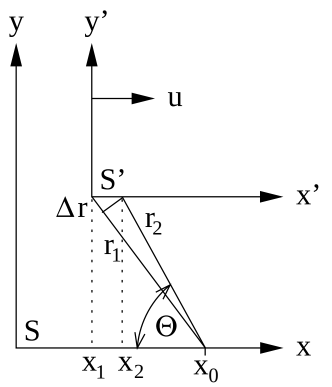
Der große dynamische Bereich der Massen der Quarks und geladenen Leptonen ist unverstanden. Es gibt erste Hinweise, dass auch die ungeladenen Leptonen Ruhemassen haben (viele Zehnerpotenzen leichter als die zugehörigen geladenen Leptonen, im sub-eV-Bereich für ν_e, Stand 2001).

Transformation von Energie und Impuls

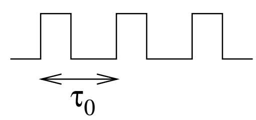
Formal: Die entsprechenden Transformationsgleichungen erhält man durch Austauschen von x durch p beziehungsweise t durch E/c^2 in der Lorentztransformation (siehe Literatur).

$$\boxed{\begin{aligned} p_x &= \gamma\left(p'_x + \frac{u}{c^2}E'\right) \\ p_y &= p'_y \\ p_z &= p'_z \\ E &= \gamma\left(E' + up'_x\right) \end{aligned}}$$

1.5 Doppler-Effekt elektromagnetischer Strahlung



Lichtquelle ruhend in S' bei $x' = 0$, Aussendung eines periodischen Signals mit der Frequenz $\nu_0 = 1/\tau_0$



1. Berücksichtigung der Zeitdilatation

$$\tau = t_2 - t_1 = \gamma\left(t'_2 - t'_1\right) = \gamma\tau_0 > \tau_0$$

2. Berücksichtigung der endlichen Signalausbreitung

   Ein Beobachter im System S an der Stelle x_0 misst den ersten Impuls zur Zeit

$$t_1^* = t_1 + r_1/c,$$

den zweiten Impuls zur Zeit

$$t_2^* = t_2 + r_2/c$$

Zeitdifferenz der Ankunftszeiten bei x_0:

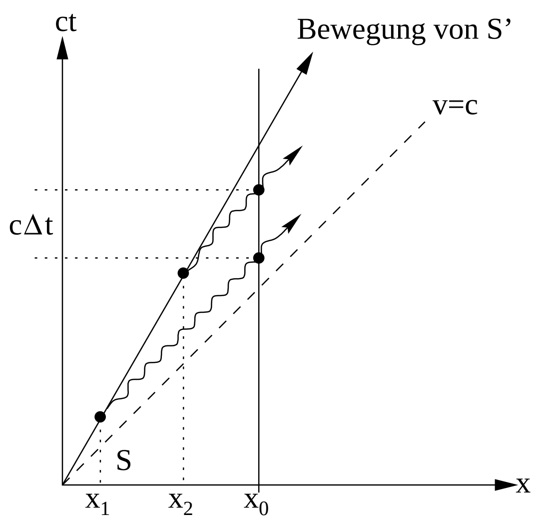
$$\Delta t = t_2^* - t_1^* = (t_2 - t_1) - \frac{1}{c}(r_1 - r_2)$$

$$\begin{array}{lrcl} \text{Mit} & \Delta r & = & r_1 - r_2 = (x_2 - x_1)\cos\Theta = (t_2 - t_1)\,u\cos\Theta \\ & \Delta t & = & (t_2 - t_1)\left(1 - \frac{u}{c}\cos\Theta\right) \quad < \tau_0 \text{ für } \Theta < 90^\circ \end{array}$$

$$\nu = \frac{1}{\Delta t} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\nu = \nu_0 \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1 - \beta\cos\Theta}}$$

Diese Gleichung ist wegen des Relativitätsprinzips unabhängig davon, ob die Quelle oder der Beobachter bewegt ist.

Verdeutlichung in „Weltlinien-Diagramm":



Sonderfälle

a) $\Theta = 0^\circ$

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

Erhöhung der Frequenz bei Annäherung

b) $\Theta = 180^\circ$

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

Erniedrigung der Frequenz bei Entfernung

hierzu ein Beispiel: **Rotverschiebung von Spektrallinien** in der Astrophysik.

Es existiert eine Korrelation zwischen der Quellgeschwindigkeit und der Entfernung R astronomischer Objekte (Hubblesche Expansion des Alls)

$$v_H = H\,R,$$

wobei H die *Hubblekonstante* ist. Gegenwärtig gilt

$$H \approx 71\,\mathrm{km/MPc\cdot s} \qquad (1\text{ Mpc} = 3.26 \cdot 10^6 \text{ Lichtjahre})$$

Der genaue Wert ist noch immer strittig.

$$\frac{1}{H} = 14 \cdot 10^9 \text{ a}$$

ist ein ungefährer Wert für das Alter des Universums.

♠ Hinweis Bilder: French "Spezielle Relativitätstheorie", Figs. 5.6 – 5.10 (Beispiele für Spektren mit Rotverschiebung), Fig. 5.11 (v_H vs. R), NN (v_H und H vs. R)

c) $\Theta = 90°$: „Transversaler Dopplereffekt":

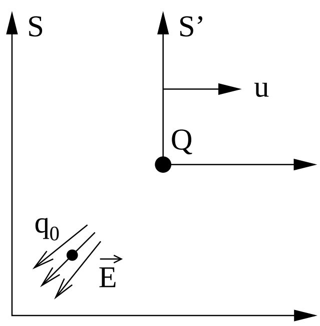
$$\nu = \nu_0 \sqrt{1-\beta^2}, \; \tau = \gamma \tau_0$$

Die Dopplerverschiebung beruht hier allein auf der Zeitdilatation. Der Effekt wird für Präzisionsmessungen zur speziellen Relativitätstheorie benutzt. Schwierigkeit: Schon kleinste Abweichungen $\Delta\Theta = 0.2°$ von $90°$ lassen den Effekt sehr klein werden gegenüber dem normalen Dopplereffekt. Ausweg: Messung bei $0°$ und $180°$ mit anschließender Differenzbildung eliminiert ebenfalls den linearen Dopplereffekt.

♠ Hinweis Tabelle: Bergmann-Schäfer I, Tab. A.1 (Experimente zum linearen und quadratischen (transversalen) Dopplereffekt)

1.6 Bewegte Ladungen und Felder

1.6.1 Elektrisches Feld und ruhende/bewegte Ladungen



Elektrische Felder werden von ruhenden oder bewegten Ladungen erzeugt.

Q sei fest in S' und erzeugt $\vec{E}'$ in S' und $\vec{E}$ in S.

Messvorschrift für $\vec{E}$ in S: Messung der Kraft $\vec{F}$ auf eine *ruhende* Ladung q am Ort $\vec{r}$ mit

$$\boxed{\vec{F} = q \cdot \vec{E}}$$

$\vec{E}$ ist ein polarer Vektor.

Gaußsches Gesetz in S:

$$\epsilon_0 \oint \vec{E}\, d\vec{f} = Q \text{ bzw. } \sum Q_i$$

Der experimentelle Befund: Das Gaußsche Gesetz gilt unabhängig davon, ob Q relativ zu S bewegt ist oder nicht.

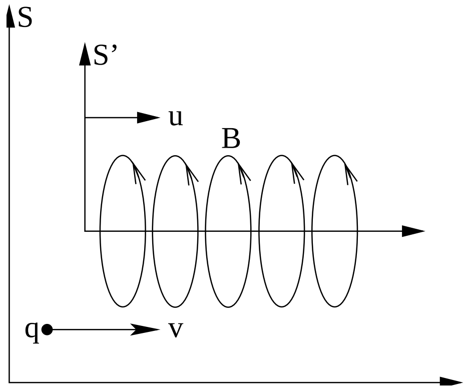
Q ist Lorentz-invariant

Q ist Erhaltungsgröße

Es gilt daher auch

$$\oint_A \vec{E}\, d\vec{f} = \oint_{A'} \vec{E}'\, d\vec{f}' = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

1.6.2 Magnetfeld und bewegte Ladungen



Magnetfelder werden von bewegten Ladungen erzeugt, z.B. einer bewegten Linienladung = Strom. Messvorschrift für $\vec{B}$ in S: Messung der Kraft $\vec{F}_L$ auf eine in S mit der Geschwindigkeit $\vec{v}$ *bewegte* Ladung (Lorentzkraft)

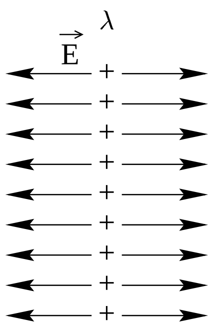
$$\boxed{\vec{F}_L = q\vec{v} \times \vec{B}}$$

$\vec{B}$ ist ein axialer Vektor.

1.6.3 Magnetfeld eines Stromes und Lorentzkraft als relativistische Effekte

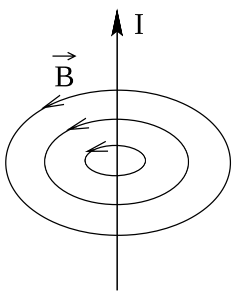
Vorbemerkung:

Elektrisches Feld einer Linienladung



$$|\vec{E}| = \frac{1}{2\pi\epsilon_0}\frac{\lambda}{r}$$

Magnetfeld eines Stromes I



$$|\vec{B}| = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I}{r}$$

Beide Felder sind rotationssymmetrisch. Die Ähnlichkeiten zwischen den Gleichungen für $\vec{E}$ und $\vec{B}$ sind kein Zufall!

Zwischen elektrischen und magnetischen Feldern besteht eine sehr enge Beziehung. Durch den Wechsel des Bezugssystems wandeln sich elektrischer Felder in magnetische (und umgekehrt). Im Sprachgebrauch ist es also besser, vom „*elektromagnetischen Feld*“ zu sprechen.

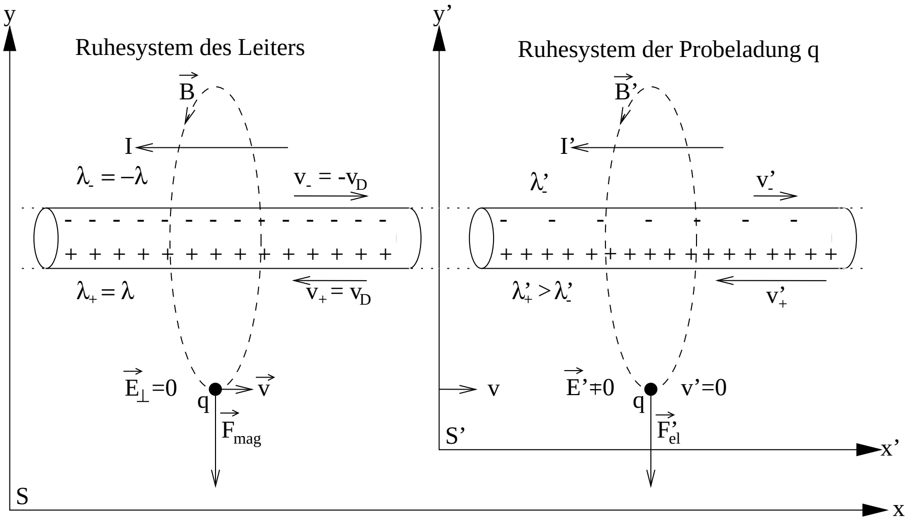
Historische Anmerkung: Einsteins berühmte erste Veröffentlichung zur speziellen Relativitätstheorie hatte den Titel „Zur Elektrodynamik bewegter Körper”.

Im Folgenden werden an einem Beispiel die beiden zentralen Aspekte bewegter Ladungen diskutiert:

1. Wie entsteht $\vec{B}$ aus bewegten Ladungen?
2. Wie entsteht die Lorentzkraft $\vec{F}_L$ auf eine bewegte Ladung in einem Magnetfeld?

Gerader, stromführender Leiter

Voraussetzung ist die Lorentz-Invarianz der Ladung. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass der Strom zusammengesetzt ist aus einer Bewegung von positiven und negativen Ladungsträgern mit entgegengesetzt gleichen Geschwindigkeiten (z.B. Halbleiterstrom). Dies ist aber nicht zwingend erforderlich (im Metall bewegen sich z.B. nur die Elektronen, der Leiter ist aber dennoch ungeladen)



Im System S: Probeladung q mit $\vec{v}$ bewegt, Leiter ungeladen

Elektrischer Strom I

$$I = \lambda_+ v_+ - \lambda_- v_- = 2\lambda v_D \qquad \text{(2 Beiträge)}$$

$$\text{(erinnere : Stromdichte} \quad j = n \cdot q \cdot v_D = \rho v_D = \frac{\lambda}{S} v_D; \quad I = \lambda v_D)$$

Magnetfeld B des Stromes I

$$B = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I}{r} \qquad \Rightarrow \left(B = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{\lambda v_D}{r} = \frac{1}{2\pi\epsilon_0 c^2}\frac{\lambda}{r} v_D = \frac{v_D}{c^2}E, \quad \text{siehe 1.64} \right)$$

Linienladung λ_{eff}

$$\lambda_{\text{eff}} = \lambda_+ + \lambda_- = 0$$

Elektrisches Feld $E_\perp$ der Linienladung λ_{eff}

$$E_\perp = \frac{\lambda_{\text{eff}}}{2\pi\epsilon_0 r} = 0$$

Kräfte auf *mit v bewegte* Probeladung q (zur Feststellung von $\vec{B}$ und $\vec{E}$)

$$\begin{aligned} F_{\text{magn}} &= q \cdot v \cdot B = q \cdot v \left(\frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I}{r} \right) \neq 0 \\ F_{\text{el}} &= q \cdot E_\perp = 0 \end{aligned}$$

Richtung: vom Draht wegstoßend für q positiv ($\hat{=}$ antiparallele Ströme)

Im System S': Probeladung q ruhend, $v' = 0$

keine Lorentzkraft möglich wegen $v' = 0$. Bewegt sich dann Probeladung *nicht* vom Draht weg? Dies wäre im Widerspruch zum *Relativitätsprinzip*, das die Gleichwertigkeit der Betrachtung in den beiden Systemen verlangt $\Rightarrow$ Existenz einer elektrischen Kraft, d.h. eines ***elektrischen Feldes!***

Elektrischer Strom I'

$$I' \neq I \neq 0$$

Magnetfeld B' des Stromes I'

$$B' \neq B \neq 0$$

Linienladung λ'_{eff}

$$\lambda'_{\text{eff}} = \lambda'_{+} + \lambda'_{-} \neq 0 \qquad (> 0)$$

es ist $v'_{+} > v_D, \quad v'_{-} < v_D$

$\Rightarrow$ System S_+, in dem $\oplus$ Ladungsträger ruhen, erscheint von S' aus stärker *Lorentz-kontrahiert* als System S_-, in dem $\ominus$ Ladungsträger ruhen: $L = L_0/\gamma$

Q selbst zwar invariant, nicht jedoch Längen L in Bewegungsrichtung, daher auch nicht Linienladungen $\lambda = Q/L$

Quantitativ:

$$\lambda'_{\text{eff}} = +2\lambda \frac{v_D v}{c^2}\gamma = +I\frac{v}{c^2}\gamma \qquad \left(\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)$$

(Details siehe Literatur, insbesondere Berkeley II, Transformation von λ zunächst nach S_+ bzw. S_-; außerdem korrekte relativistische Geschwindigkeitsaddition beachten! Einfachere Versionen in der übrigen Literatur.)

Elektrisches Feld $E'_{\perp}$ der Linienladung λ'_{eff}

$$E'_{\perp} = \frac{\lambda'_{\text{eff}}}{2\pi\epsilon_0 r} \neq 0$$

mit λ'_{eff}

$$E'_{\perp} = v\frac{I}{2\pi\epsilon_0 c^2 r}\gamma \qquad \left(\Rightarrow \vec{E}' = (\vec{v}\times\vec{B})\gamma,\ \text{siehe 1.64}\right)$$

Kräfte auf *ruhende* Probeladung q

$$\begin{aligned} F'_{\text{magn}} &= 0 \qquad (\text{weil } v' = 0,\ B' \text{ selbst} \neq 0) \\ F'_{\text{el}} &= q \cdot E'_{\perp} \neq 0 \end{aligned}$$

Richtung: Draht mit $\lambda'_{\text{eff}} > 0 \rightarrow$ vom Draht wegstoßend

mit $E'_{\perp}$:

$$F'_{\text{el}} = q \cdot v \frac{I}{2\pi\epsilon_0 c^2 r}\gamma$$

Rücktransformation von F' nach S: $F_{\perp} = F'_{\perp}/\gamma$ (siehe 1.42)

$$\Rightarrow F_{\perp} = F_{\text{magn}} = \frac{F'_{\text{el}}}{\gamma} = q \cdot\ v\frac{I}{2\pi\epsilon_0 c^2 r} = q \cdot v \cdot B \qquad \text{wegen } \mu_0 = \frac{1}{\epsilon_0 c^2}$$

d.h. die *rücktransformierte Kraft* ist gerade die Lorentzkraft.

Zusammenfassung und Interpretation

Im System S', in dem q ruht, wirkt der Leiter elektrisch geladen. Die hierdurch bedingten *elektrischen* Kräfte nennt man in S *magnetisch.*

1. Das Magnetfeld ist die Folge der Lorentz-Invarianz der Ladungen, des Coulombpotentials und des Relativitätsprinzips.
2. Die Lorentzkraft ist die elektrische Kraft $q \cdot E'$ im Eigensystem der Probeladung q', rücktransformiert auf S.

In diesem Sinne sind magnetische Kräfte zwischen bewegten Ladungen relativistische Effekte.

Historische Anmerkung: Einstein wird in einem Interview des Jahres ?? mit folgender Bemerkung zitiert: „Nichts hat mich so sehr zur speziellen Relativitätstheorie gebracht wie meine Überzeugung, dass die Lorentzkraft auf eine bewegte Ladung in einem Magnetfeld nichts anderes ist als eine elektrische Kraft."

Wieso kann man überhaupt relativistische Effekte bei den geringen Driftgeschwindigkeiten der Ladungen im Leiter ($v_D \approx 1\text{mm/s}$) erwarten? Der Grund ist, dass das elektrisches Feld in „Reinkultur" (d.h. unabgeschirmt) extrem stark ist. Im *Makroskopischen* sind die Ladungen jedoch nahezu völlig kompensiert und die Effekte von $\vec{E}$ und $\vec{B}$ deshalb vergleichbar.

1. Beispiel: **Makroskopisch dissoziierte H-Atome:**

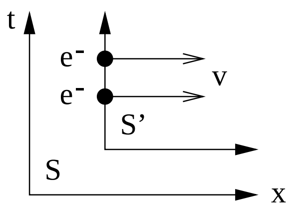
   Trennung der Elektronen und Protonen von 1 g Wasserstoff $\hat{=}\, 6 \cdot 10^{23}$ Atomen auf die Distanz Nordpol-Südpol der Erde ($R = 12\,800$ km):

   $$\text{Geamtladung} \quad q = 96\,000\text{C}$$

   $$\text{Kraft} \quad F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q^2}{R^2} \approx 5 \cdot 10^5 \text{ N} = 50 \text{ Tonnen!}$$

   Kleinste Verschiebungen aus dem Ladungs-Gleichgewicht führen deshalb zu nennenswerten makroskopischen Effekten.

2. Beispiel: **Direkt-Vergleich elektrischer und magnetischer Kräfte**



Zwei Elektronen, parallel bewegt mit v

Im Eigensystem S': nur F'_{el}, Abstoßung

Im Laborsystem S:

$$F_{\text{el}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2}\gamma \qquad \text{abstoßend}$$

$$F_{\text{magn}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2}\beta^2\gamma \qquad \text{anziehend (parallele Ströme)}$$

$$\boxed{\frac{F_{\text{magn}}}{F_{\text{el}}} = \left(\frac{v}{c}\right)^2}$$

$$F_{\text{total}} = F_{\text{el}} + F_{\text{magn}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2}\left(1-\beta^2\right)\gamma = (\ldots)\frac{1}{\gamma}$$

$$\left\{\text{auch direkt aus} \quad F'_{\text{el}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \qquad F = \frac{F'}{\gamma}\right\}$$

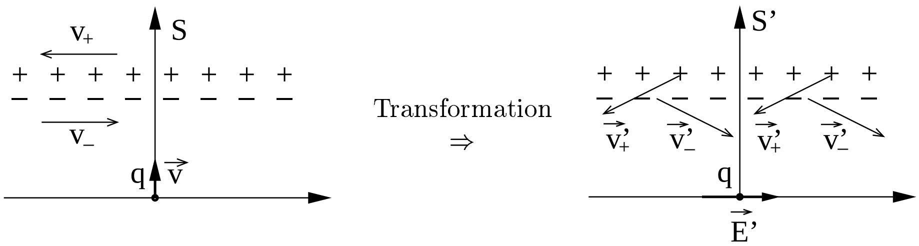
a) Leitungselektronen

$F_{\text{magn}}/F_{\text{el}}$ mit $v_D \approx 1$ mm/s von der Größenordnung 10^{-22}, d.h. die elektrischen Kräfte wären 10^{22}-fach stärker als die magnetischen, gäbe es keine perfekte lokale Ladungskompensation.

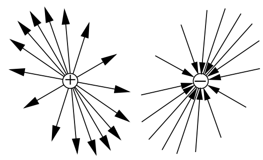
b) Atome (innerhalb der Hülle)

$F_{\text{magn}}/F_{\text{el}}$ im Bereich 10^{-4} bis 10^{-1} (keine lokale Kompensation)

3. **Ergänzung**



In S bewegt sich die Ladung q senkrecht zum elektrischen Strom, das Magnetfeld des Stroms bewirkt die Lorentzkraft $\vec{F} = q\,\vec{v} \times \vec{B}$. Wie wird daraus in S', im Ruhesystem der Ladung, ein elektrisches Feld $\vec{E}'$? Die transformierten Geschwindigkeiten $\vec{v}'_+$, $\vec{v}'_-$ sind völlig symmetrisch bezüglich der y'-Achse. Die Lösung, d.h. ein in positive x-Richtung weisendes elektrisches Feld $\vec{E}'$, kommt hier aus der Feldverzerrung bewegter Ladungen, siehe 1.64.



1.6.4 Transformation elektrischer und magnetischer Felder

Verallgemeinerung:

Die abgeleiteten Gleichungen enthalten nicht λ oder I oder v_D selbst, falls man $\vec{B}$ einführt, sondern nur die Relativgeschwindigkeit $\vec{v}$ der beiden Systeme S und S'.

Umgekehrt also – falls das $\vec{B}$-Konzept sinnvoll sein soll, muss der beschriebene Sachverhalt *unabhängig von Herkunft von* $\vec{B}$ sein (gleichgültig, ob $\vec{B}$ erzeugt durch Strom eines geraden Leiters, eines gebogenen Leiters, durch einen Permanent-Magneten etc. ...)

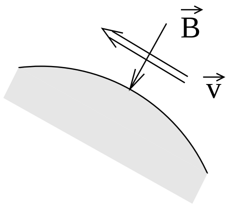
Zunächst einige Sonderfälle:

Fall 1: $\vec{E} = 0$, $\vec{B} \neq 0$ im System S (wie oben)

$$\text{direkt abzulesen (siehe 1.63)} \qquad \vec{E}' = \gamma(\vec{v} \times \vec{B})$$

> In jedem System S', das sich relativ zu S (wo $\vec{E} = 0$, $\vec{B} \neq 0$) mit $\vec{v}$ bewegt, existiert ein elektrisches Feld $\vec{E} \neq 0$.
>
> Ferner ist $\vec{B}' \neq \vec{B}$ (s. unten).

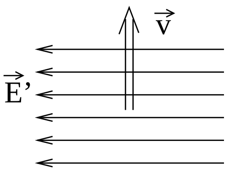
Beispiel: **schnell fliegendes Flugzeug** im Erdmagnetfeld



für $v = 250m/s$ (900 km/h) $\qquad B = 10^{-5}$ T

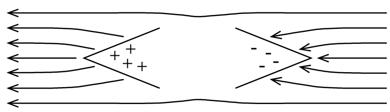
$$\gamma \approx 1$$

$$E' \approx v \cdot B = 0.01V/m \qquad (1\ \mathrm{V}/100\ \mathrm{m})$$



durch Influenz
(Tragflächen = Leiter)

$\Rightarrow$



Ist damit eine „Geschwindigkeitsmessung" möglich? Prinzipiell denkbar, aber kaum praktikabel (Störungen aller Art).

Hinweis (s. Bild rechts): Frühere Sprechweise – Lorentzkraft führt zu Ladungstrennung (*Hall-Effekt*): Man nutzt den Effekt zur Messung von B-Feldern. Hier jetzt verallgemeinerter Standpunkt:

E' ist im bewegten System unabhängig von der Existenz freier Ladungen vorhanden.

Fall 2: $\vec{E} \neq 0$, $\vec{B} = 0$ im System S

a) Aus der Umkehrung des obigen Beispiels (Linienladung λ ruhend in S, daher dort $\vec{B} = 0$, $\vec{E} \neq 0$. Vom bewegten System S' aus jedoch gleichbedeutend mit Strom I' und daher Magnetfeld $\vec{B}' \neq 0$).

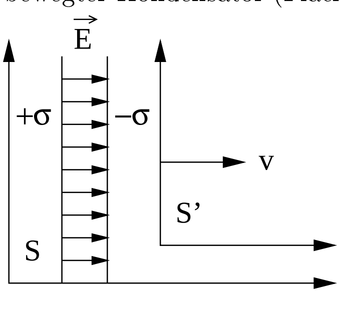
$$\vec{B}' = -\gamma \left(\frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E} \right)$$

> In jedem System S', das sich relativ zu S (wo $\vec{E} \neq 0$, $\vec{B} = 0$) mit $\vec{v}$ bewegt, existiert ein magnetisches Feld $\vec{B} \neq 0$.
>
> Ferner ist $\vec{E}' \neq \vec{E}$ (s. unten).

b) Transformation von $\vec{E}$

1. Parallele Komponente

bewegter Kondensator (Flächenladung, $\perp$ Flugrichtung)



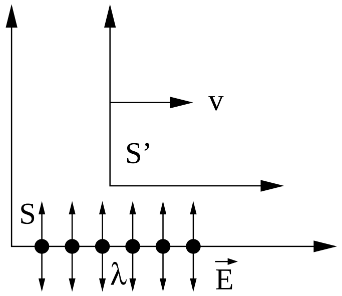
Lorentzkontraktion nur in Bewegungsrichtung, senkrecht dazu keine Längenänderung

$$\Rightarrow \sigma' = \sigma$$

$$\Rightarrow E'_x = E'_{\parallel} = E_{\parallel} \qquad \left(E_{\parallel} = \frac{\sigma}{\epsilon_0} \right)$$

2. Senkrechte Komponente

   bewegte Linienladung λ (Achse $\|$ Flugrichtung, siehe 1.63)



$$\lambda' = \gamma\lambda$$

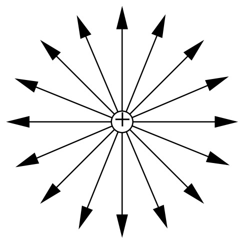
$$E'_\perp = \gamma E_\perp \qquad \left(E_\perp = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0 r}\right)$$

Verallgemeinerung

Falls $\vec{E}$ überhaupt ein nützliches Konzept ist, kann man $\vec{E}$ nicht ansehen, aus welchen Ladungsanordnungen es entstanden ist; auch die Umrechnung auf $\vec{E}'$ darf dann nicht davon abhängen. Somit allgemein für $\vec{B} = 0$ in S:

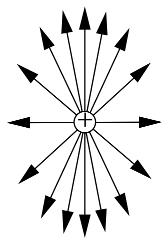
$$\begin{aligned} E'_\perp &= \gamma E_\perp \\ E'_\| &= E_\| \end{aligned}$$

Beispiel: **Elektrisches Feld einer bewegten Punktladung:**



im Eigensystem S:
Feld radial, sphärisch symmetrisch

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



gesehen von S':
Feld radial, *nicht* sphärisch symmetrisch

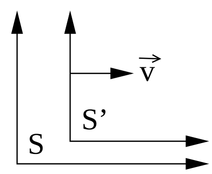
$$\mathbf{rot}\vec{E}' \neq 0 \quad \text{bzw.} \quad \oint \vec{E}'\, dr' \neq 0$$

(nicht überraschend: $\vec{E}'$ zeitabhängig an festem Ort in S', $\vec{B}' \neq 0$ etc.)

(Hinweis: Das in senkrechter Richtung verstärkte elektrische Feld ist verantwortlich für den relativistischen Anstieg des spezifischen Energieverlusts geladener Teilchen in Materie)

Zusammenfassung als allgemeiner Fall $\vec{E} \neq 0$, $\vec{B} \neq 0$:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{E}'_\| &= \vec{E}_\| & \vec{B}'_\| &= \vec{B}_\| \\ \vec{E}'_\perp &= \gamma\left(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B}\right)_\perp & \vec{B}'_\perp &= \gamma\left(\vec{B} - \frac{\vec{v}}{c^2}\times\vec{E}\right)_\perp \end{aligned}}$$



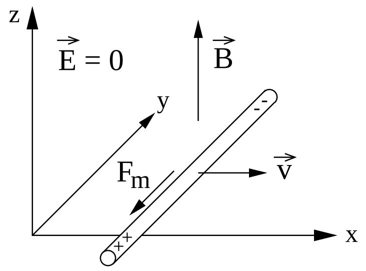
1. Elektrische und magnetische Felder (und Kräfte) bilden gemeinsam die *elektromagnetische Wechselwirkung*.
2. Die Auftrennung nach elektrischen und magnetischen Anteilen ist nicht Lorentz-invariant, sondern eine Frage des Bezugssystems. Beim Übergang von einem System zum andern wandeln sich elektrische Felder in magnetische und umgekehrt. Nur die vollständige elektromagnetische Bescheibung ist konsistent mit dem Relativitätsprinzip.

1.6.5 Zeitabhängige elektromagnetische Felder

Beschränkung auf das Induktionsgesetz als *ein* Beispiel!

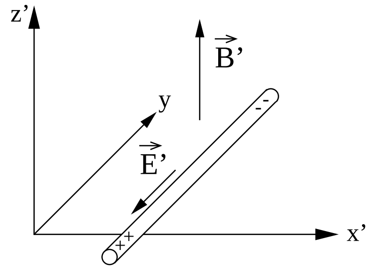
Induktion in bewegten und ruhenden Leitern

a) Bewegter Leiter im homogenen Magnetfeld $\vec{B}$, $\vec{v}$ gleichförmig



vom System S betrachtet:

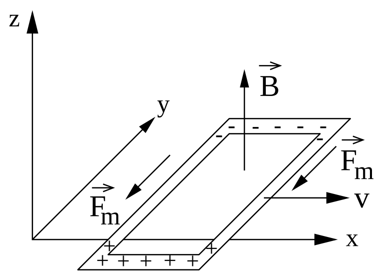
Lorentzkraft $\vec{F}_{\mathrm{magn}} = q \cdot \vec{v} \times \vec{B}$
treibt Ladungen auf eine Seite
(erinnere Halleffekt)



vom System S' betrachtet:

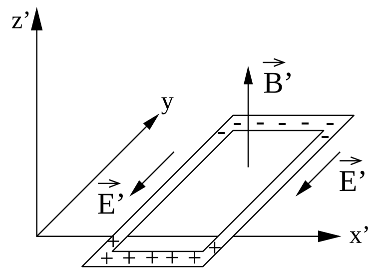
es existiert ein $\vec{E}' = \gamma(\vec{v} \times \vec{B})$
$\vec{E}' = \vec{v} \times \vec{B}'$
Leiter im Feld $\vec{E}'$ $\Rightarrow$ Influenz, Oberflächenladung
somit gleicher Effekt
(erinnere Flugzeug im Erd-B-Feld)

b) Bewegte Leiterschleife im *homogenen* Magnetfeld $\vec{B}$



$\vec{F}_m$ vorn und hinten gleich
Ansammlung von Ladungen,
sonst kein Effekt

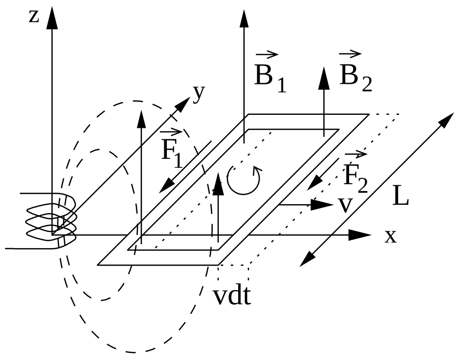
$$\oint_{\text{Schleife}} \vec{E}\, d\vec{r} = \frac{1}{q} \oint_{\text{Schleife}} \vec{F}\, d\vec{r} = 0$$



$\vec{E}'$ vorn und hinten gleich
gleiche Anordnung von Ladungen
(abgesehen von Lorentzkontraktion)

$$\oint_{\text{Schleife}} \vec{E}'\, d\vec{r}' = 0$$

c) Bewegte Leiterschleife im *inhomogenen* Magnetfeld $\vec{B}$



$\vec{F}_m$ vorn und hinten nicht gleich
⇒ resultierende elektromotorische Kraft
⇒ Kreisstrom

$$\vec{F}_{\mathrm{m1}} = q\,\vec{v} \times \vec{B}_1$$

$$\vec{F}_{\mathrm{m2}} = q\,\vec{v} \times \vec{B}_2$$

$$\begin{aligned} U_{\mathrm{ind}} &= \frac{1}{q} \oint_{\mathrm{Schleife}} \vec{F}\,d\vec{r} \\ &= v(B_1 - B_2)L \end{aligned}$$

(auf Seitenstücken 0 wegen $\vec{F} \perp d\vec{r}$)
Mit magnetischem Fluss

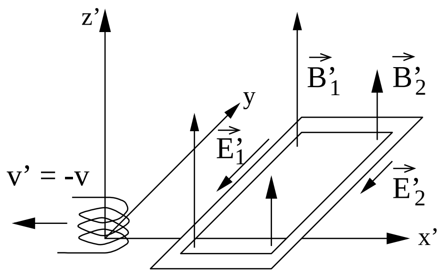
$$\Phi_m = \int_{\mathrm{Schleife}} \vec{B}\,d\vec{A}$$

⇒ Fluss ändert sich durch Bewegung!

$$d\Phi_m(1) = -B_1 L(v\,dt) \quad \text{abnehmend bei (1)}$$
$$d\Phi_m(2) = +B_2 L(v\,dt) \quad \text{zunehmend bei (2)}$$

$$d\Phi_m = -\left\{v(B_1 - B_2)L\right\} dt$$

$$\Rightarrow U_{\mathrm{ind}} = -\frac{d\Phi_m}{dt}$$



$\vec{E}'$ vorn und hinten nicht gleich

$$\oint_{\mathrm{Schleife}} \vec{E}'\,d\vec{r}' \neq 0$$

B' am Ort der Schleife explizit zeitabhängig

die Ableitung des Induktionsgesetzes läuft analog:

$$\begin{aligned} \vec{E}'_1 &= \ldots \\ \vec{E}'_2 &= \ldots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

mit dem Endresultat:

$$U'_{\mathrm{ind}} = -\frac{d\Phi'}{dt'}$$

(Faradaysches Induktionsgesetz)

Ein sich ändernder magnetischer Fluss durch eine Leiterschleife erzeugt in ihr eine EMK U_{ind}.

Hier also Folge der Lorentzkraft auf bewegte Ladung (in S) bzw. einfache Folge der Feldtransformation (in S').

Kapitel 2

Welle-Teilchen-Dualismus

2.1 Elektromagnetische Wellen und Photonen

2.1.1 Elektromagnetische Wellen

1. Allgemeine Vorbemerkungen

Eine Welle ist die Ausbreitung eines „Erregungszustandes" durch den Raum. Beispiele: mechanische Wellen wie Seilwellen, Wasserwellen und Schallwellen in Gasen und Festkörpern; elektromagnetische Wellen. Mechanische Wellen benötigen ein Medium für ihre Ausbreitung, elektromagnetische Wellen nicht (siehe Kapitel 1). Die Störung des Mediums wandert, nicht das Medium selbst! Eine Welle transportiert Energie, da es Energie kostet, die Störung hervorzurufen. Es gilt: Energie $\propto$ Amplitude^2.

Man unterscheidet zwei Arten von Wellen:

- Longitudinalwellen (z.B. Schallwellen): Die Auslenkung der Störung und ihre Ausbreitungsrichtung haben dieselbe Richtung
- Transversalwellen (z.B Wasserwellen, elektromagnetische Wellen): Die Auslenkung der Störung steht senkrecht zur Ausbreitungsrichtung. Im 3-dimensionalen Fall (elektromagnetische Wellen) gibt es zwei orthogonale Polarisationsrichtungen senkrecht zur Ausbreitungsrichtung.

Vorsicht: die in der Quantenphysik auftretende Wellennatur aller mikroskopischen Vorgänge passt nicht in dieses Schema. Es handelt sich hier um die Beschreibung der „Wahrscheinlichkeit" von Vorgängen. Dies ist der zentrale Teil von Kapitel 2.

2. Mathematische Beschreibung von Wellen

Mathematisch wird eine Welle durch eine Wellenfunktion beschrieben. Einfachster Fall ist eine eindimensionale, periodische, harmonische ebene Welle in x-Richtung:

$$\psi(x,t) = \underbrace{\psi_0}_{Amplitude} \cdot \sin(\underbrace{kx - \omega t}_{Phase}) \quad \text{mit} \quad \boxed{k = \frac{2\pi}{\lambda}} \quad \text{Wellenzahl}, \quad \boxed{\omega = \frac{2\pi}{T}} \quad \text{Kreisfrequenz}$$

Für x fest (z.B. $x = 0$): $\psi(t) = \psi_0 \sin(\omega t)$; dies ist eine harmonische Schwingung, d.h. es gilt hier ein lineares Kraftgesetz für die Störung des Mediums.

Für t fest (z.B. $t = 0$, Schnappschuss): $\psi(x) = \psi_0 \sin(kx)$; harmonisches Schwingungsmuster im Ortsraum. Bewegt sich die Welle in mehreren Dimensionen, ist $\vec{k}$ ein Vektor.

Komplexe Darstellung des allgemeinen Falls:

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Mit der Phasengeschwindigkeit einer Welle bezeichnet man die Geschwindigkeit, mit der sich Punkte gleicher Phase bewegen, d.h. die Geschwindigkeit, mit der sich das Wellenbild mit der Zeit fortpflanzt.

$$\begin{aligned} kx - \omega t &= \text{const} \\ x &= \frac{\text{const}}{k} + \frac{\omega t}{k} \\ \frac{dx}{dt} &= v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} = \nu\lambda = \frac{\lambda}{T} \\ \Rightarrow \quad \psi &= \psi_0 \sin k(x - v_{ph} t) \end{aligned}$$

3. Elektromagnetische Wellen und Wellengleichung

Die Wellengleichung für EM-Wellen lässt sich aus den Maxwellschen Gleichungen herleiten:

$$\begin{aligned} &1. & \vec{\nabla}\vec{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ &2. & \vec{\nabla}\vec{B} &= 0 \\ &3. & \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ &4. & \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \left(\vec{\jmath} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

Im Vakuum: $\rho = 0$, $\vec{\jmath} = 0$. Multipliziere Gl. 3 vektoriell mit $\vec{\nabla}$:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{E} \right) &= -\vec{\nabla} \times \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} \\ \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\vec{E}\right) - \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}\right) \vec{E} &= -\Delta \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times \vec{B} \\ -\Delta \vec{E} &= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \end{aligned}$$

Analog lässt sich ein Ausdruck für $\vec{B}$ herleiten: (verwende $c^2 = 1/\mu_0\epsilon_0$)

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta \vec{E} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \\ \Delta \vec{B} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} \end{aligned}}$$

$\vec{E}$ und $\vec{B}$ bilden gemeinsam ein System von Wellengleichungen. Eine spezielle Klasse von Lösungen sind gerade die oben erwähnten ebenen Wellen mit $v_{\mathrm{ph}} = c$. Für Fortpflanzung in z-Richtung gilt dann

$$\begin{aligned} E_x(z,t) &= E_{x0} \sin k(z-ct) \\ B_y(z,t) &= B_{y0} \sin k(z-ct) \end{aligned}$$

$\vec{E}$ und $\vec{B}$ stehen also senkrecht aufeinander.

Ergänzungen

1. Beweis für Transversalwellen

Ansatz $\quad \vec{E} = E_x(z,t)\vec{x}_0 + E_y(z,t)\vec{y}_0 + E_z(z,t)\vec{z}_0$

Maxwell I: $\quad \vec{\nabla}\vec{E} = 0$

$$\underbrace{\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y}}_{\substack{\text{trivial } 0, \text{ weil} \\ \text{nur von } z \text{ abh.} \\ \text{(ebene Welle)}}} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow \quad E_z = const, \text{ z.B. } \quad E_z = 0 \quad \text{(“Eichung”)}$$

$\Rightarrow \quad$ nur $E_x, E_y \neq 0 \quad$ (dies sind die zwei möglichen Polarisationsrichtungen)

dito Maxwell II: $\quad \vec{\nabla}B = 0 \quad \Rightarrow \quad$ nur $B_x, B_y \neq 0$

2. Beweis für B ⊥ E

Maxwell III $\quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\dfrac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

Maxwell IV $\quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

Wähle eine Polarisationsrichtung, z.B. E_x

x-Komponente von IV $\quad \cancel{\dfrac{\partial B_z}{\partial y}} - \dfrac{\partial B_y}{\partial z} = \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial E_x}{\partial t} \quad$ (a)

y-Komponente von III $\quad \dfrac{\partial E_x}{\partial z} - \cancel{\dfrac{\partial E_z}{\partial x}} = -\dfrac{\partial B_y}{\partial t} \quad$ (b)

$\Rightarrow \quad E_x$ und B_y *gekoppelt* durch lineare partielle DGL 1. Ordnung (nicht unabhängig voneinander)

für ebene Welle: $\quad E_x = E_{x0} \sin k(z-ct)$

$\quad B_y = B_{y0} \sin k(z-ct)$

$$\Rightarrow \frac{\partial E_x}{\partial z} = kE_{x0}\cos k(z-ct)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial B_y}{\partial t} = -kcB_{y0}\cos k(z-ct)$$

mit (b) $\Rightarrow \quad E_{x0} = cB_{y0}$

$E_x = cB_y; \quad E_x$ und B_y überall *in Phase*

2.1.2 Photonen

In der Planckschen Vorstellung (1900) der Schwarzkörperstrahlung waren die „Oszillatoren" gequantelt, die ihre Energie an das elekromagnetische Strahlungsfeld abgeben (s. Kapitel 3). Einstein (1905) postulierte die Quantelung der elekromagnetischen Strahlung selbst und interpretierte das Verhalten dieser Quanten wie das von Teilchen mit den Grundeigenschaften

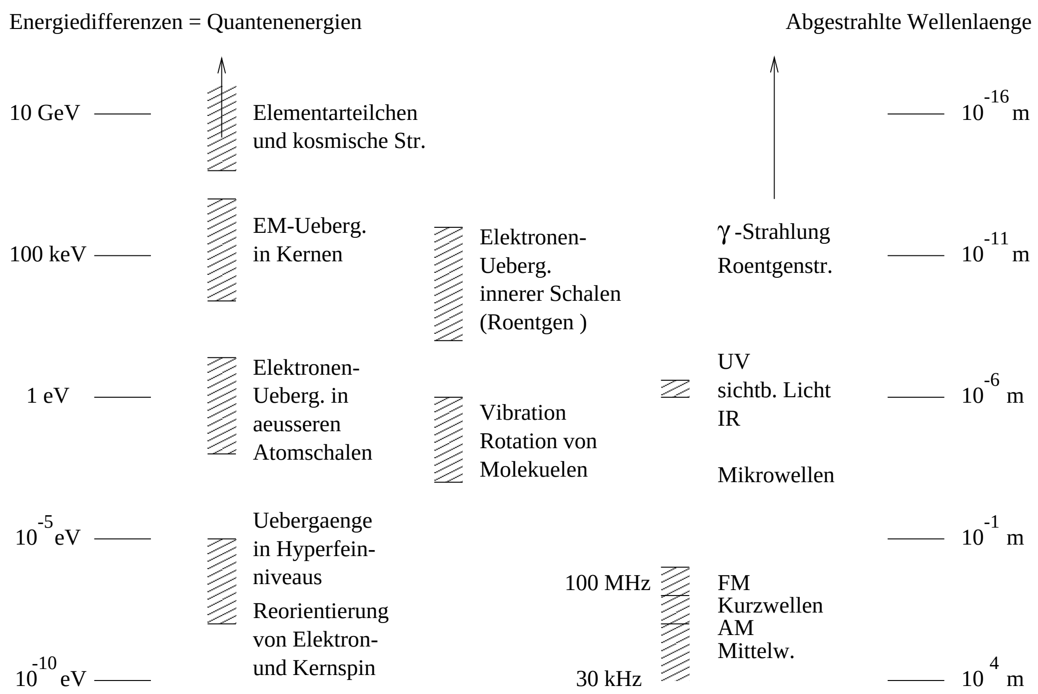
$$\boxed{\text{Energie } E = h\nu = \hbar\omega \qquad \text{Impuls } p = \hbar k = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} \qquad \text{Eigendrehimpuls } I = 1 \cdot \hbar}$$

Die Teilchennatur der Quanten und die zugrundeliegenden Phänomene (Photoeffekt, Comptoneffekt etc.) werden ausführlich in 2.2 behandelt.

2.1.3 Wellen- und Teilchenaspekte

1. Quantenenergien und Wellenlängen

$$\text{aus} \quad E = h\nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \Rightarrow E \cdot \lambda = hc = 1.24 \cdot 10^{-6} \ (\text{eV}\cdot\text{m})$$



2. Energiefluss

a) im Wellenbild

Im Wellenbild definiert der Poyntingvektor $\vec{S}$ den Energiefluss:

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0}\left[\vec{E} \times \vec{B}\right] \qquad \left[\vec{S}\right] = \frac{\text{J}}{\text{sec} \cdot \text{m}^2}$$

Der Vektor zeigt in Ausbreitungsrichtung der Welle. Der mittlere Energiefluss für eine ebene Welle in z-Richtung ist:

$$\begin{aligned}\overline{S_z} &= \frac{1}{\mu_0} E_{x_0} B_{y_0} \overline{\sin^2(kz - \omega t)} \\ &= \frac{1}{2\mu_0}\frac{E_{x_0}^2}{c} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_{x_0}^2\end{aligned}$$

Der mittlere Energiefluss ist also $\propto$ zum Amplitudenquadrat des elektrischen oder magnetischen Feldvektors.

b) im Teilchenbild

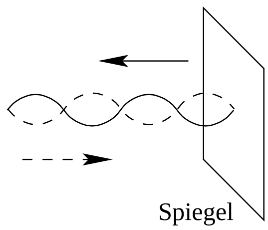
Der mittlere Energiefluss für *viele* Teilchen ($N \gg 1$) ist:

$$\overline{S_z} = N \cdot h\nu$$

N ist der Teilchenfluss, $[N] = \frac{\text{Zahl der Teilchen}}{\text{Zeit}\cdot\text{Fläche}}$

3. Energiedichte und Strahlungsdruck

a) im Wellenbild



Reflexion am Spiegel erzeugt eine stehende Welle. Auf der leitenden Oberfläche wird durch $\vec{E}(t)$ ein Strom induziert, auf den von $\vec{B}(t)$ Kräfte ausgeübt werden. Somit entsteht ein Druck auf die Oberfläche, der *Strahlungsdruck*.

Bei allen Arten von Wellen gilt für den Strahlungsdruck:

$$P = \text{räumliche Energiedichte} = \frac{\text{Energie}}{\text{Volumen}} = \frac{E}{V}$$

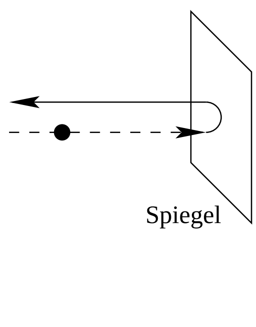
Bei Absorption gilt

$$P = \frac{E}{V} = \frac{\bar{S}_z}{c}$$

bei Reflexion

$$P = \frac{2E}{V} = 2\frac{\bar{S}_z}{c} \qquad \text{(Beitrag von hin- und rücklaufender Welle)}$$

b) im Teilchenbild



$$\text{Druck} = \frac{\text{übertragener Impuls}}{\text{Zeit}\cdot\text{Fläche}} \qquad \text{(vgl. ideales Gas)}$$

$$P = 2p \cdot N = 2\frac{h\nu N}{c} = 2\frac{\bar{S}_z}{c}$$

$\Rightarrow$ Es ergibt sich in beiden Bildern das selbe Resultat.

Beispiele:

1. **Sonneneinstrahlung** auf die Erde:

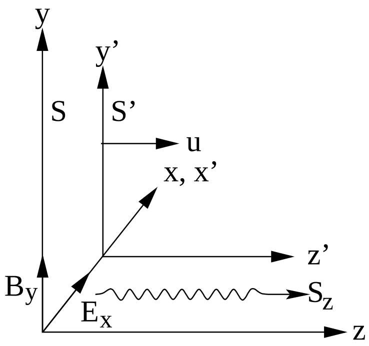
$$S \approx 1.4 \text{ kW/m}^2 \quad \Rightarrow \quad P = 10^{-5} \text{ N/m}^2 = 10^{-10} \text{ bar} = 10 \text{ N/km}^2$$

   Nutzung als Sonnensegel im Weltraum? Effekte klein.

2. **Sterne**: Die Gravitation der Sterne würde eine andauernde Kontraktion bewirken. Es existieren also Gegenkräfte, die ein statisches Gleichgewicht erzeugen: der hydrostatische Druck und der Strahlungsdruck. Letzterer ist besonders relevant für Sterne mit $M \gg M_{\text{Sonne}}$.

2.1.4 Transformationseigenschaften

Erinnerung:



Ebene Welle in S mit Poyntingvektor S_z. Wie sieht die Welle in S' aus?
Schon bekannt: $c = c'$. Wie groß ist S'_z?

a) im Wellenbild

   Bei dieser Herleitung wird vereinfachend angenommen, dass $u \ll c$ und somit $\gamma \approx 1$, sie ist aber allgemeingültig.

$$\begin{aligned}
\text{mit} \quad E'_\perp &= \gamma\left(\vec{E} + \vec{u} \times \vec{B}\right)_\perp \\
\text{sowie} \quad B'_\perp &= \gamma\left(\vec{B} - \frac{\vec{u}}{c^2} \times \vec{E}\right)_\perp \\
E'_x &= E_x - uB_y = E_x\left(1 - \frac{u}{c}\right) \qquad\qquad B_y = \frac{E_x}{c} \\
B'_y &= B_y - \frac{u}{c^2}E_x = B_y\left(1 - \frac{u}{c}\right) \\
\Rightarrow \quad S'_z &= S_z\left(1 - \frac{u}{c}\right)^2 \approx S_z\left(1 - 2\frac{u}{c}\right)
\end{aligned}$$

   Es ergibt sich also ein mit der Geschwindigkeit sinkender Energietransport in S'!

b) im Teilchenbild

$$S_z = \underbrace{N \cdot h\nu}_{N \cdot E} \quad \Rightarrow \quad S'_z = \underbrace{N' \cdot h\nu'}_{N' \cdot E'}$$

Die Energie E' lässt sich durch Lorentztransformation von E und p finden:

$$E' = \gamma\,(E - up_x) \approx E - uE/c = E\,(1 - u/c)$$

Alternative: Dopplereffekt: $\nu' \approx \nu(1-\beta)$ für $\beta \ll 1$

N' lässt sich berechnen aus dem mittleren zeitlichen Abstand der Teilchen Δt in S (Berücksichtigung der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit):

$$\begin{aligned} \Delta t' &= \Delta t\,(1 + u/c) \\ \Rightarrow N' &= N\,(1 - u/c) \\ \Rightarrow S'_z &= S_z\,(1 - u/c)^2 \approx S_z\,(1 - 2u/c) \end{aligned}$$

Wellen- und Teilchenbild liefern auch hier *identische* Ergebnisse!

Es stellt sich die Frage, weshalb S'_z mit steigender Geschwindigkeit sinkt und wo die fehlende Energie bleibt. Die fehlende Energie dient, bildlich gesprochen, zum „Auffüllen des Zwischenraumes" mit räumlicher Energiedichte. Beachte also: EM-Wellen transformieren sich nicht ungeändert (wie man wegen $c' = c$ denken könnte), sondern unter Änderung des Poynting-Vektors.

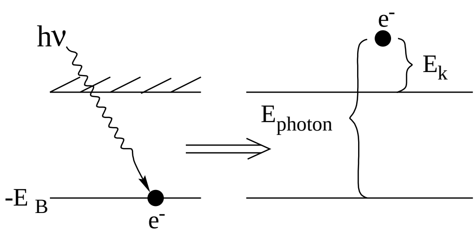
Zusammenfassung:

Eine Reihe von Phänomenen können im Wellen- und Teilchenbild äquivalent beschrieben werden. Dualität bzw. Komplementarität im strengeren Sinne sind hier noch nicht sichtbar.

2.2 Photonen

2.2.1 Photoeffekt

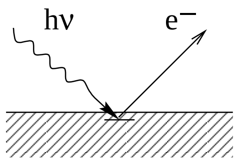
Grundprozess in der Deutung von Einstein (Veröff. 1905, „Über einen die Erzeugung und Verwandlung von Licht betreffenden heuristischen Gesichtspunkt"):



Übertragung der Gesamtenergie eines Photons $E = h\nu$ auf ein gebundenes Elektron mit Bindungsenergie $-E_B$ führt zu einem freien Elektron mit kinetischer Energie E_K.

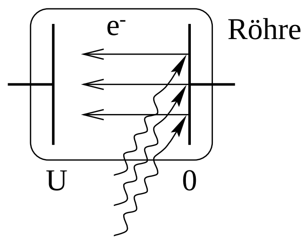
$$\boxed{E_k = h\nu - E_B}$$

1) Photoelektronen aus Festkörpern (hist.)



Einstrahlung von Licht löst Photoelektronen aus der Oberfläche heraus (Hertz 1887, Lenard 1902, Millikan 1916).

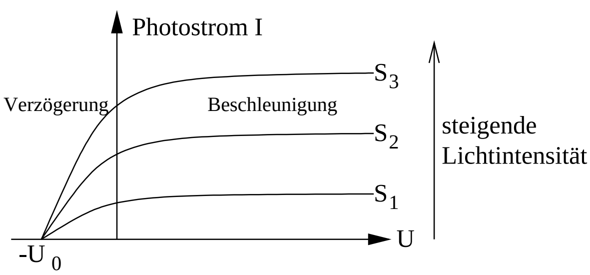
Der Millikanversuch (1916)

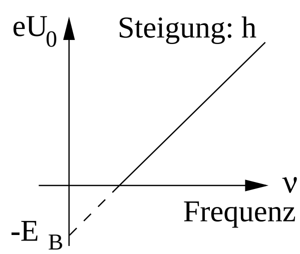


"Primitive" Energiemessung:

Ist die Spannung U negativ (verzögernd) und so gewählt ($U = -U_0$), dass die Elektronen gerade gestoppt werden, d.h. gerade kein Strom mehr fließt, gilt $E_k = |eU_0|$.

Beobachtung:





1. Die notwendige Stoppspannung U_0 steigt linear mit der Frequenz ν, ist aber unabhängig von der Lichtintensität S.

2. Der Photostrom I, d.h. die Zahl der Elektronen, ist proportional zur Lichtintensität S.

Typische Zahlenwerte sind z.B. $\lambda = 0.63\ \mu$m (orange), $E_\nu = 2.0$ eV, $E_B = 0 \ldots 1$ eV, je nach Material. Die Planck'sche Konstante h lässt sich aus der Steigung h bestimmen, es ergibt sich der Zahlenwert:

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \mathrm{J/s}$$

Interpretation

1) Im Wellenbild

Im klassischen Wellenbild ist dieses Ergebnis völlig unverständlich!

a) Erwartung: $\vec{E}$ verursacht erzwungene Schwingungen der Elektronen; eine Erhöhung von $\vec{E}$ müsste größere Amplituden und damit (bei Abtrennung) größere kinetische Energien erzeugen; stattdessen ist nur der Sättigungsstrom von der Feldstärke abhängig und gerade nicht E_k bzw. U_0.

b) Energiebetrachtung: Lichtstrom sei 10^{-10} W/cm^2 $\Rightarrow$ 10^9 eV/cm^{2}s. Die Absorption des Lichtes sei in den ersten 10 Atomlagen $\Rightarrow$ 10^{16} Atome/cm^2; der Lichtstrom verteilt sich also auf 10^{16} Atome. Erst in 10^7 s (1 Jahr) würde sich dann im Mittel eine Energie von 1 eV auf 1 Atom ansammeln – eine offensichtlich unsinnige Vorstellung.

Folgerung: Die Energie muss diskontinuierlich auftreten, sie muss sich temporär auf ein einzelnes Elektron konzentrieren

$\Rightarrow$ radikaler Bruch mit der klassischen Wellenvorstellung

2) Im Teilchenbild

Ein Quant benimmt sich wie ein klassisches Teilchen in einem Stoß mit Energie- und Impulserhaltung. Der Impuls wird auf das Elektron und an das Gitter übertragen, die Energieerhaltung ist über $E_K = E_\nu - E_B$ gesichert. Die Intensität, also die Anzahl der Photoelektronen ist proportional zur Zahl der Quanten N_ν:

$$eU_0 = h\nu - E_B$$

$$\text{Strom } I = \text{Zahl der Photoelektronen} \propto \text{Zahl der Quanten } N_\nu$$

Im Teilchenbild lässt sich also alles ganz zwanglos erklären. Es dauerte von 1905 an ein Jahrzehnt, bis diese Vorstellung akzeptiert war (1913 ging anlässlich der Empfehlung Einsteins für einen Sitz in der Preussischen Akademie der Wissenschaften ein Brief Planck's an das Preussische Erziehungsministerium, worin er schrieb: „... ist gelegentlich spekulativ wie bei der Lichtquantenhypothese ...").

Anwendung des Photoeffekts in festen Körpern

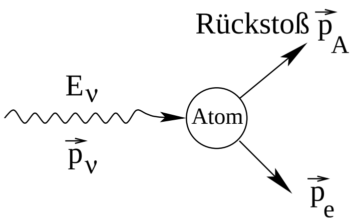
Allgemein lässt sich der Photoeffekt zum qualitativen und quantitativen Nachweis von Licht verwenden. Er wird in vielen technischen Geräten ausgenutzt:

1. Photodioden(Halbleiter); ortsempfindlich: CCD's (z.B. in Fernseh- oder, zunehmend, Stillbild-Kameras)

2. Photomultiplier; Empfindlichkeit bis zur Messung einzelner Photonen; exzellente Zeitauflösung (im Bereich $< 10^{-9}$ s); siehe Lehrbücher

2. Photoeffekt in einzelnen Atomen

a) Energetische Betrachtung



Wie bei einem klassischen Stoß gelten Energie- und Impulserhaltung gleichzeitig.

Rückstoßimpuls des Atoms: $\vec{p}_A = \vec{p}_\nu - \vec{p}_e$. Alle Impulse sind von gleicher Größenordnung.

Die *Rückstoßenergie* des Atoms dagegen ist klein, da

$$E_A = \frac{p_A^2}{2m_A} = \frac{|\vec{p}_\nu - \vec{p}_e|^2}{2m_A}$$

Dies ist von der Größenordnung

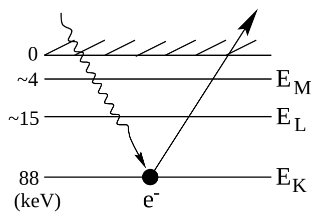
$$E_R \leq \frac{p_\nu^2}{2m_A} = \frac{E_\nu^2}{2m_A c^2}$$

d.h.

$$\frac{E_A}{E_\nu} \leq \frac{E_\nu}{2m_A c^2}$$

Beispiel: $A = 100 \quad \left\{ \begin{array}{r} h\nu = 2 \ \text{eV} \\ 20 \ \text{keV} \end{array} \right. \Rightarrow \begin{array}{c} 10^{-11} \\ 10^{-7} \end{array}$

Es gilt weiterhin der „Energiesatz” $E_K = E_\nu - E_B$. Hier kann jedoch bei großen Energien $h\nu$ der Photoeffekt in allen Elektronenschalen des Atoms auftreten und auch Elektronen mit höheren Bindungsenergien ablösen.

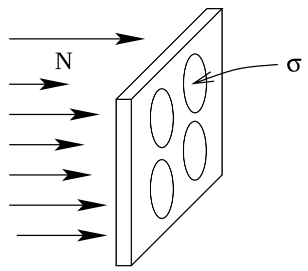


Zahlenbeispiele (s.a. Kap. 4)

		^{208}Pb, $Z = 82$	^{40}A, $Z = 18$
K-Schale	E_K	88 keV	3.2 keV
L-Schale	E_L	15.9, 15.2, 13.0 keV	~0.3 keV
M-Schale	E_M	5 Werte $\leq$ 3.9 keV	~0.02 keV
etc.			

b) Wahrscheinlichkeit, Wirkungsquerschnitt und Massenabsorptionskoeffizient

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dieses Prozesses? Es ist unmöglich, auf ein einzelnes Atom zu zielen. Das ist jedoch kein Problem, da alle Atome eines bestimmten Elements gleich und ununterscheidbar sind. Die Messungen werden also immer an großen Mengen gleichzeitig vorgenommen. Die einzelnen Treffer sind statistisch.

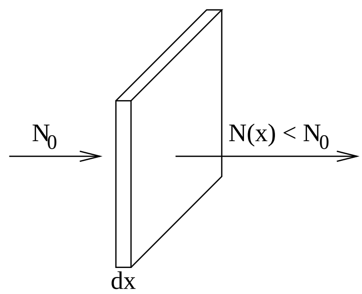


Ein homogener Strahl von Photonen trifft auf eine Schicht von Atomen. Jedem Atom der Schicht wird eine Kugel mit der Projektionsfläche σ („Wirkungsquerschnitt”) zugeordnet, die i.A. nichts mit den geometrischen Abmessungen zu tun hat und für jeden Prozess verschieden ist. σ hat die Dimension einer Fläche, die übliche Einheit ist das „barn”$= 10^{-24}$ cm^2.
Zusätzliche Annahme: keine Mehrfachtreffer („dünne Schicht”)

Die Trefferwahrscheinlichkeit lässt sich dann definieren als:

$$W_{\text{treff}} = \frac{\text{Zahl der Treffer}}{\text{Zahl der einfallenden Teilchen}} = \frac{\text{Zahl derTargetteilchen}}{\text{Fläche}} \cdot \sigma$$

Jedes Quant, das den Photoeffekt auslöst, verschwindet aus dem einfallenden Strahl von Quanten, daher gilt für die Abnahme der Intensität:



$$-\frac{dN}{N} = \text{Trefferwahrscheinlichkeit} = (\sigma \, dx) \cdot n$$

n ist die Zahl der Atome/Volumen

$$\Rightarrow \boxed{N(x) = N_0 e^{-(\sigma n)\,x}}$$

Die Zahl der einfallenden Quanten nimmt somit exponentiell mit der durchlaufenen Schichtdicke ab. Man definiert

Linearer Schwächungskoeffizient:

$$\mu = \sigma n = \sigma \frac{N_L \rho}{A} \qquad [\mu] = 1/\text{Länge}$$

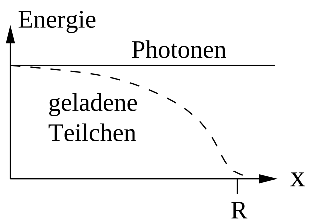
dabei Avogadrozahl $N_L = 6 \cdot 10^{23}\ \mathrm{mol}^{-1}$; A ist das Atomgewicht in g/mol

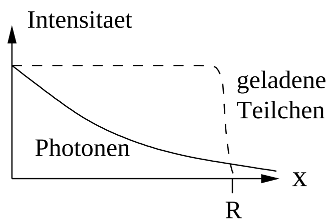
Massenabsorptionskoeffizient:

$$\frac{\mu}{\rho} = \sigma \frac{N_L}{A}, \qquad \left[\frac{\mu}{\rho}\right] = \frac{\text{Fläche}}{\text{Masse}}$$

$$\Rightarrow N(x) = N_0 e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)(\rho x)}$$

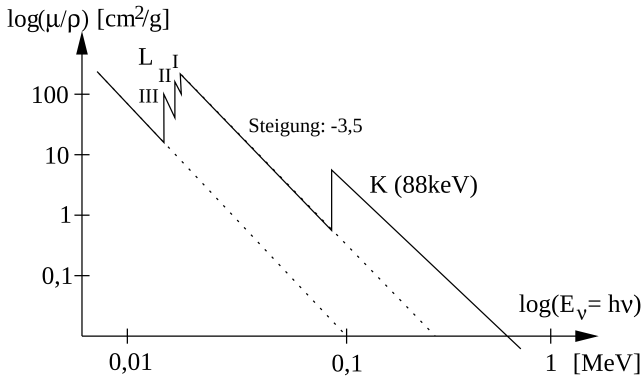
Beachte die Unterschiede beim Durchgang durch Materie:





R Reichweite (nur für geladene Teilchen definiert)

Der Massenabsorptionskoeefizient μ/ρ (bzw. μ bzw. σ) hängt ab von der Quantenenergie und der Ordnungszahl Z der Atome.



Beispiel Pb (siehe hierzu 4.3.6):

Die Sprünge um den Faktor 10 treten bei den Energien auf, bei denen gerade eine neue Schale energetisch zugänglich wird.
Merkregel an Sprungstellen: $\sigma \approx$ geometrische Größe der neuen Schale.

Analytisch gilt im abfallenden Teil weg von den Kanten:

$$\sigma_{\text{photo}} = 4\sqrt{2}\,\sigma_{\text{Thompson}}\,\alpha^4 Z^5 \left(\frac{E_\nu}{m_e c^2}\right)^{-7/2}$$

$$\text{mit} \qquad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hbar c}$$ („Kopplungskonstante" der EM-Wechselwirkung, s. Kap. 4)

so dass

$$\frac{\mu}{\rho} \propto \frac{Z^4}{E_\nu^{7/2}} \qquad (A \propto Z)$$

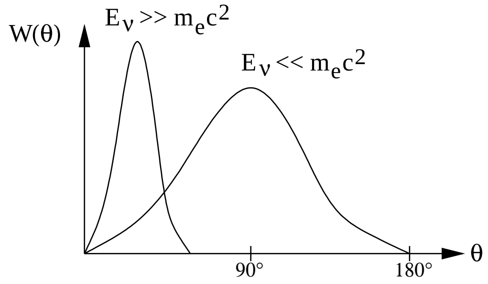
Dieser Ausdruck steigt steil mit Z und sinkt steil mit E.

Anwendungen:

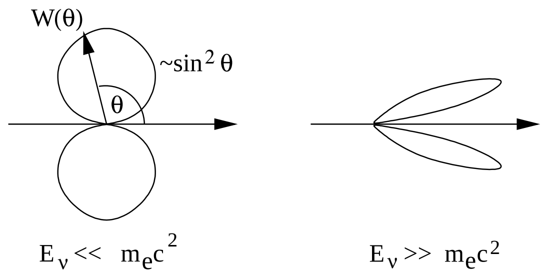
1) Bleiabschirmung gegenüber Röntgenstrahlung

2) Nachweis und Spektroskopie von Röntgen- und γ-Strahlung mit Detektoren mit hohem Z.

c) Winkelverteilung der Photoelektronen



Die Winkelverteilung kann man auch in Polardiagrammen darstellen, ähnlich der üblichen Darstellung des Abstrahlungsverhaltens eines Hertz'schen Dipols:



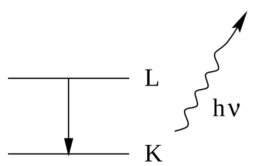
Für $E_\nu \ll m_ec^2$ Erinnerung an Wellennatur, der Feldvektor $\vec{E}$ und damit die Kraft auf die Elektronen steht senkrecht zur Strahlrichtung. Für $E_\nu \gg m_ec^2$ setzt sich die Teilchennatur durch: der Impuls des Quants wird so groß, dass alles nach „vorne" gerichtet ist. Die effektive Masse des Quants ist $m_{\text{eff}}c^2 = h\nu$, entsprechend $\dfrac{m_{\text{eff}}}{m_e} = \dfrac{h\nu}{m_ec^2} \gg 1$ im Grenzfall hoher Energien.

d) Nachweis des Photoeffekts

Es bieten sich mehrere Möglichkeiten an:

1. Messung der Schwächung eines Strahls von Quanten (Vorsicht: $\sigma = \sum \sigma_i$, s. 2.24)
2. Messung der *Folgeerscheinungen*

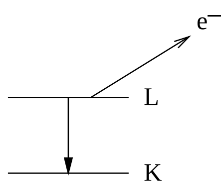
   (a) Emission charakteristischer Röntgenstrahlung

   Emission eines „K-Röntgenquants" (s. 4.3.6)

   $$h\nu = |(E_K - E_L)|$$

   (b) Emission von Auger-Elektronen (strahlungsloser Übergang)

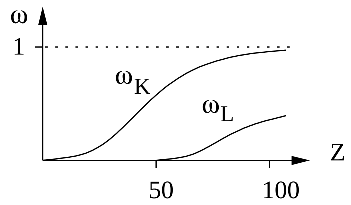
   

   Energie des emittierten Auger-Elektrons:

   $$E_{K_{e-}} = |(E_K - E_L) - E_L)|$$

Konkurrenz der beiden Prozesse durch „Fluoreszenzausbeute" ω beschrieben, definiert als

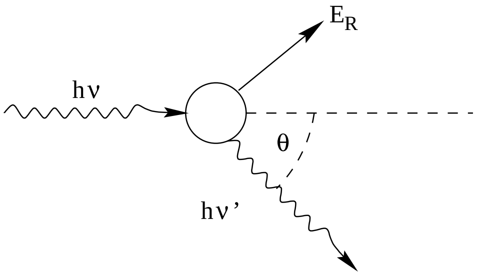
$$\omega = \frac{N_X}{N_X + N_{\text{Auger}}}$$



Außer bei der K-Schale in schweren Atomen dominiert die Emission von Augerelektronen!

2.2.2 Thompson-, Rayleigh- und Comptonstreuung

Bisher wurden nur Prozesse betrachtet, bei denen das Photon absorbiert wird, d.h. die Energie hν vollständig auf andere Teilchen übertragen wird. Als nächstes werden Streuprozesse diskutiert, d.h. Wechselwirkungen eines Photons mit einzelnen Elektronen oder ganzen Atomen, bei denen das Photon „überlebt", aber seine Richtung ändert und seine Energie entweder konstant bleibt oder abnimmt.



Allgemeine Darstellung eines Streuprozesses.

Man unterscheidet bei Photonen folgende Haupttypen von Streuprozessen:

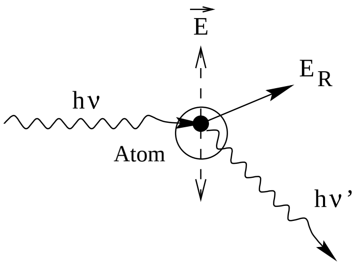
1. *Thompson-Streuung*: Streuung von $h\nu$ an einzelnen, als frei zu betrachtenden Elektronen mit h$\nu \ll$ m$_0c^2$. Dabei bleibt als (idealisierter Grenzfall) die Photonenenergie gleich, d.h. $h\nu' = h\nu$. Die Streustrahlung ist kohärent, d.h. es besteht eine feste Phasenbeziehung zwischen Streu- und Primärstrahlung.

2. *Rayleigh-Streuung*: Streuung von $h\nu$ an der Gesamtheit der *gebundenen* Elektronen, wobei $h\nu \ll$ oder $\approx$ oder $\gg |E_{\text{Bindung}}|$. Auch hier ist $h\nu' = h\nu$ und es herrscht Kohärenz.

3. *Compton-Streuung*: Streuung an einzelnen, als frei zu betrachtenden Elektronen, aber $h\nu$ nicht $\ll m_\text{e}c^2$. Hier wird $h\nu' < h\nu$, und die Streuung ist inkohärent.

Beachte: Thompson- und Rayleigh-Streuung sind „klassisch" behandelbar, d.h. mit elektromagnetischen Wellen (h kommt nicht vor); Compton-Streuung ist allein mit der Teilchennatur beschreibbar (h kommt explizit vor).

1) Thompson-Streuung



Voraussetzungen:

1. h$\nu \ll m_ec^2$, kein Energie- und Impulsübertrag
2. h$\nu \gg E_B$, Elektronen sind „frei", am ehesten trifft dies auf die Elektronen der äußeren Hülle zu.
3. $E_R \to 0$

Im Wellenbild: Das quasifreie Elektron wird durch das elektrische Feld beschleunigt gemäß

$$m_e\ddot{x} = eE_{x_0}\sin\omega t$$

und strahlt dabei wie ein klassischer Hertz'scher Dipol:

$$\begin{array}{lrcl} \text{Ausgestrahlter Energiefluss:} & \overline{S_{\text{aus}}} & = & \overline{S_z} \propto \overline{(\ddot{p}_{\text{Dipol}})^2} = \overline{(e\ddot{x})^2} \propto \dfrac{e^4}{m_e^2}E_{x_0}^2 \\ \text{Eingestrahlter Energiefluss:} & \overline{S_{\text{ein}}} & = & \overline{S_z} \propto E_{x_0}^2 \end{array}$$

Im Teilchenbild: Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess:

$$\sigma_{\text{Thompson}} \propto \frac{\text{Zahl der gestreuten Quanten}}{\text{Zahl der einfallenden Quanten}} = \frac{\overline{S_{\text{aus}}}}{\overline{S_{\text{ein}}}} \propto \frac{e^4}{m_e^2}$$

Quantitativ: $\boxed{\sigma_{\text{Thompson}} = \frac{8\pi}{3}r_e^2}$ mit $\boxed{r_e = \frac{e^2}{m_ec^2}\cdot\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 2.8\cdot 10^{-13}\ \text{cm}}$

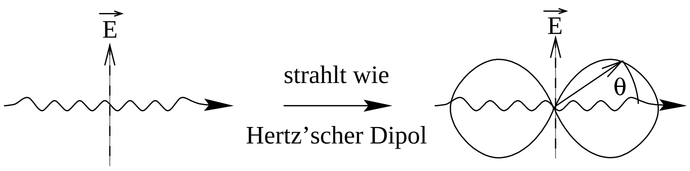
Die Abkürzung r_e wird als „klassischer" Elektronenradius bezeichnet. Vorstellung: Ruheenergie des Elektrons m_ec^2 = Coulomb-Selbstenergie. Diese Vorstellung hat mit der Realität allerdings nichts zu tun; das Elektron ist nach heutigem Kenntnisstand „punktförmig"; die obere experimentelle Grenze für seine Ausdehnung ist etliche Zehnerpotenzen kleiner als r_e.

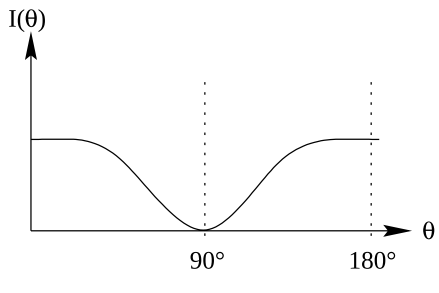
Diskussion

1. $\sigma_{\text{Thompson}} = 0.66\cdot 10^{-24}\text{cm}^2 = 2/3$ barn
2. σ_{Thompson} ist unabhängig von der Frequenz bzw. Energie der Strahlung.
3. Für das Atom als Ganzes summieren sich die Beiträge der einzelnen Elektronen:

$$\begin{array}{rcl} \sigma_{Atom} & = & Z\sigma_{Thompson,e^-} \\ \Rightarrow \dfrac{\mu}{\rho} & = & \dfrac{L}{A}Z\sigma_{Thompson,e^-} \approx \text{ konstant, da } Z \propto A \\ \Rightarrow \dfrac{\mu}{\rho} & = & 0.2\ \text{cm}^2/\text{g} \quad \text{unabhängig von } Z \text{ und } E! \end{array}$$

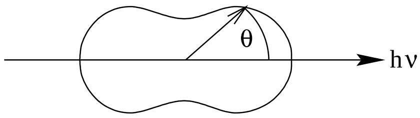
Winkelverteilung der gestreuten Quanten für linear polarisierte Strahlung:

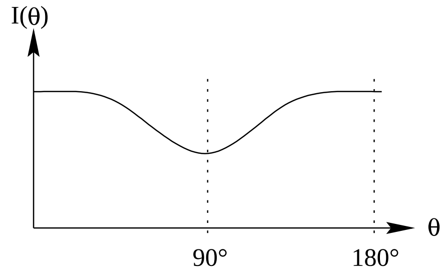




in der Polarisationsebene!

Winkelverteilung der gestreuten Quanten für unpolarisierte Strahlung:

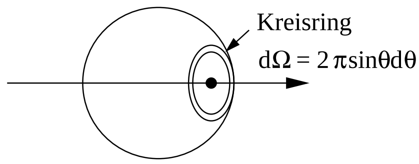




In letzterem Fall ist eine Mittelung über die verschiedenen Polarisationsrichtungen nötig und man erhält

$$\frac{d\sigma_{\text{Thompson}}}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 \left(1 + \cos^2\theta\right)$$

Der hier auftretende differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ beschreibt den Wirkungsquerschnitt für die Streuung in das Raumwinkelelement $\mathrm{d}\Omega = 2\pi \sin\theta \; d\theta$ anstatt total in $\Omega = \int d\Omega = 4\pi$. (Annahme: azimutale Symmetrie um die Strahlrichtung herum).



Rayleigh-Streuung

Falls $h\nu$ vergleichbar wird mit $|E_B|$, kann die Bindung nicht länger vernachlässigt werden. Elektronen mit der Resonanzfrequenz ω_0 erfahren dann erzwungene Schwingungen mit der Amplitude

$$x = A \sin\omega t \quad \text{mit} \quad A \propto \frac{E_{x.0}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2) + \delta^2\omega^2}}$$

Entsprechend der obigen Betrachtung der Streustrahlung $\propto \overline{\ddot{p}^2} = e^2 \overline{\ddot{x}^2}$ ergibt sich dann

$$\sigma_{\text{Rayl}} \propto \left(\frac{\omega^4}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \delta^2\omega^2} \right) \cdot \sigma_{\text{Thompson}}$$

Grenzfälle:

a) $h\nu \gg E_B$, d.h. $\omega \gg \omega_0$ (bisher) $\Rightarrow \sigma \propto \dfrac{\omega^4}{\omega^4} = const$ $\quad \Rightarrow$ Thompsonstreuung

b) $h\nu \ll E_B$, d.h. $\omega \ll \omega_0$ (neu) $\quad \Rightarrow \sigma \propto \dfrac{\omega^4}{\omega_0}$ $\quad \Rightarrow$ Rayleighstreuung

Die starke Abhängigkeit des Streuquerschnitts von der Frequenz im Fall der Rayleighstreuung ist die Ursache für das Himmelsblau (reine Streustrahlung). Ähnliches gilt für das Abendrot: mittlere freie Weglänge in N_2, O_2 ca. 600 km bei $\lambda = 700$ nm, 60 km bei $\lambda = 400 nm$.

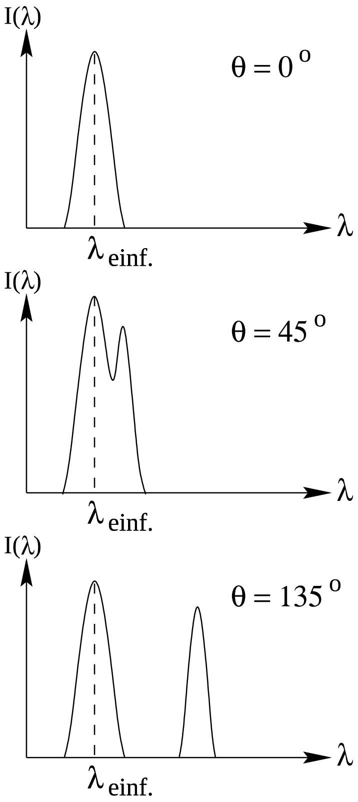
Zusatzbemerkung: Streng genommen muss man die kohärenten Beiträge der einzelnen Elektronen des Atoms berücksichtigen. Dies führt auf

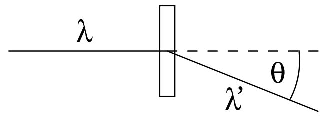
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} \cdot \underbrace{|F(\theta)|^2}_{\text{Formfaktor des Atoms}}$$

Bei der Rayleigh-Streuung spielt also die Wellennatur eine wichtige Rolle, die Kohärenz ist ganz entscheidend. Die oben diskutierte Resonanzfähigkeit ist Teil von $|F(\theta)|^2$. (Zum Begriff des Formfaktors s. 4.2.2 und 4.2.3).

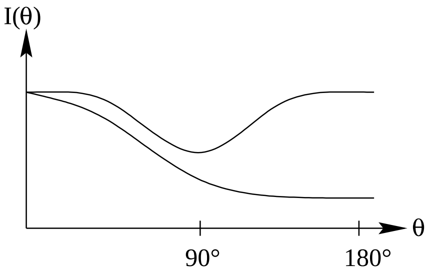
Compton-Effekt und Compton-Streuung

Experimente mit Quanten im Röntgenbereich (Mo K_α, ~20 keV) durch Compton (1922).



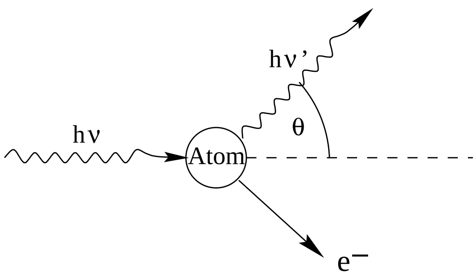


Erste Beobachtung:
Aufteilung des Peaks der Streustrahlung bei großen Streuwinkeln in zwei getrennte Peaks.
Der konstante, nicht winkelabhängige Peak entspricht der schon behandelten Thompson-Streuung; der zweite, dessen Lage sich mit zunehmendem Winkel zu immer größeren Wellenlängen verschiebt, resultiert aus der Compton-Streuung.



Zweite Beobachtung:
Abweichungen von den erwarteten Ergebnissen der Thompson Streuung bei höheren Energien:
obere Linie: h$\nu \ll m_e c^2$
untere Linie: h$\nu \approx m_e c^2$

Deutung der „verschobenen" Strahlung:



Wechselwirkung eines Quants mit einem „freien" Elektron, d.h. ein elastischer Stoß unter Berücksichtigung von Energie- und Impulserhaltung. Im Gegensatz zum Photoeffekt verschwindet das Photon nicht, sondern es verliert nur Energie.

Mathematische Betrachtung mit folgenden Voraussetzungen:

1. Elektron wird als ungebunden betrachtet, d.h. h$\nu \gg E_B$ (wie bei Thompson-Streuung).
2. $h\nu$ u.U. vergleichbar mit $m_e c^2 \quad \Rightarrow \quad$ relativistisch korrekte Rechnung erforderlich.

a) Energie der Streustrahlung

$$\begin{array}{lrcl}
\text{Impulserhaltung:} & \vec{p}_\nu & = & \vec{p}_{\nu'} + \vec{p}_e \\
\text{Energieerhaltung:} & m_e c^2 + h\nu & = & E_e + h\nu' \\
\text{rel. Energiegleichung für } e^-: & 0 & = & c^2 p_e^2 + m_0^2 c^4 - E_e^2 \\
 & \Rightarrow \quad 0 & = & c^2 \left(\vec{p}_\nu - \vec{p}_{\nu'}\right)^2 + m_e^2 c^4 - \left(m_e c^2 + h\left(\nu - \nu'\right)\right)^2 \\
\text{mit} & \left(\vec{p}_\nu - \vec{p}_{\nu'}\right)^2 & = & p_e^2 = p_\nu^2 + p_{\nu'}^2 - 2 p_\nu p_{\nu'} \cos\theta \quad \text{(Cosinussatz)} \\
 & h^2 \left(\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos\theta - \left(\nu - \nu'\right)^2\right) & = & 2 m_e c^2 h \left(\nu - \nu'\right) \\
 & h\nu\nu' \left(1 - \cos\theta\right) & = & m_e c^2 \left(\nu - \nu'\right) \\
\text{mit } \nu = \dfrac{c}{\lambda} & \dfrac{1}{\lambda\lambda'} \left(1 - \cos\theta\right) & = & \dfrac{m_e c}{h} \left(\dfrac{1}{\lambda} - \dfrac{1}{\lambda'}\right) = \dfrac{m_e c}{h} \cdot \dfrac{\lambda - \lambda'}{\lambda\lambda'}
\end{array}$$

mit $\lambda' - \lambda = \Delta\lambda$

$$\boxed{\Delta\lambda = \lambda_c \left(1 - \cos\theta\right)}$$

$$\boxed{\lambda_c = \frac{h}{m_e c} \qquad \text{„Compton-Wellenlänge"}}$$

♠ Hinweis Bilder: Originaldaten Compton, Eisberg Resnick Fig. 2-6 (Spektren bei verschiedenen θ); Rohlf Fig. 4-15 (λ vs. $1 - \cos\theta$)

Diskussion

1. $\Delta\lambda \propto \lambda_c$, unabhängig von λ, jedoch θ-abhängig.

   $\Delta\lambda$ immer >0, $\lambda' > \lambda$ bzw. $\nu' < \nu$. Die Energiedifferenz geht in das Elektron über.

   $\Delta\lambda$ enthält h; **der Comptoneffekt ist ein reiner Quanteneffekt.**

   Das ganze Photon wird an einem Elektron gestreut. Historisch brachte diese Erkenntnis den endgültigen Durchbruch der Quantenhypothese $E = h\nu$.

2. $\lambda_c = 2.43 \cdot 10^{-12}$ m entspricht (als Merkregel)

   a) der Wellenlänge eines Photons mit $h\nu = m_e c^2$,

   b) der „de-Broglie-Wellenlänge eines Elektrons mit der Geschwindigkeit c".

3. Sichtbares Licht: $\lambda \approx 400 \ldots 700$nm $\Rightarrow \Delta\lambda = 10^{-6}\lambda$. Dies ist schwer zu beobachten. Bei Röntgenstrahlung sind die Effekte jedoch (relativ gesehen) viel größer und daher leicht beobachtbar.

4. Bothe und Geiger: Koinzidenz-Messung des gestreuten Elektrons und des gestreuten Quants zum Beweis der gleichzeitigen Emission (Bothe, Heidelberg, Nobelpreis für Entwicklung der Koinzidenzmethode)

Formulierung im Energiemaß

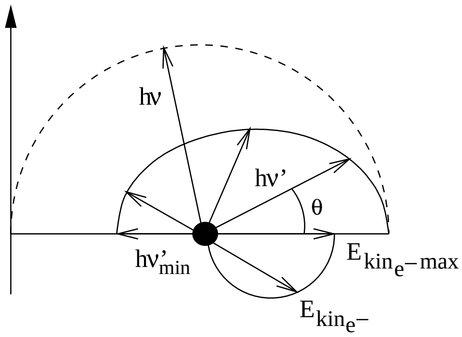
Quantenenergie:

$$\boxed{h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2}(1-\cos\theta)}}$$

Elektronenenergie ($h\nu - h\nu'$):

$$\boxed{E_{kin_{e^-}} = h\nu \frac{\frac{h\nu}{m_e c^2}(1-\cos\theta)}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2}(1-\cos\theta)}}$$

Darstellung der energetischen Verhältnisse im Polardiagramm:



Die Energie der gestreuten Photonen $h\nu'$ wird durch eine Ellipse beschrieben, deren Exzentrizität mit $h\nu/m_e c^2$ steigt.

Sonderfälle:

1. $\theta = 0° \;\Rightarrow\; h\nu' = h\nu$, $E_e \approx 0$ (unter 90°)
2. $\theta = 180°$ (Rückwärtsstreuung): „zentraler Stoß"

$$\begin{aligned} h\nu_{\min} &= \frac{h\nu}{1 + 2\frac{h\nu}{m_e c^2}} \\ \rightarrow \frac{m_e c^2}{2} &= \text{const. für } E_\nu \gg m_e c^2 \\ \rightarrow h\nu & \quad \text{für } \; E_\nu \ll m_e c^2 \quad \text{(Thompson-Grenzfall)} \end{aligned}$$

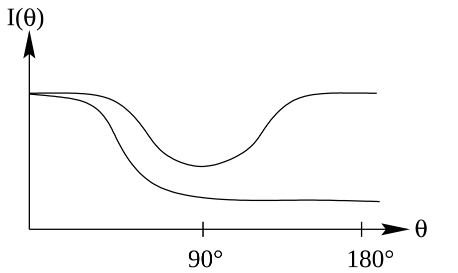
b) Winkelverteilung der Streuung

Eine genauere Behandlung unter Verwendung der relativistischen Wellenmechanik führt auf die „Klein-Nishina-Gleichung" (s. Lehrbücher). Für unpolarisierte Strahlung gilt:

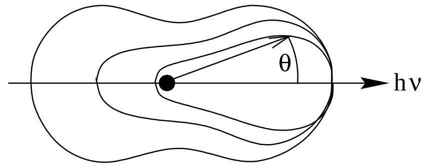
$$\boxed{\frac{d\sigma_e}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 \left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 \left(\frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} - \sin^2\theta\right)}$$

Diskussion:

1. Für $h\nu \ll m_e c^2$ $\quad \nu' \to \nu \quad \Rightarrow$ „Thompson-Grenzfall" $\dfrac{d\sigma_e}{d\Omega} = \dfrac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2\theta)$
2. Winkelverteilung zunehmend nach vorn mit zunehmender Energie $h\nu$.



obere Linie: $h\nu \to 0$ (Thompson)
untere Linie: $h\nu = m_e c^2$

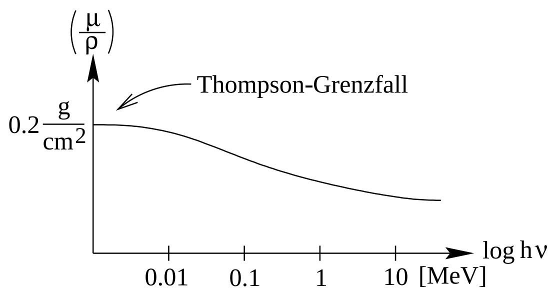


Veränderung der Winkelverteilung bei zunehmender Energie $h\nu$. Die inneren Linien entsprechenden höheren Energien.

c) Integraler Wirkungsquerschnitt

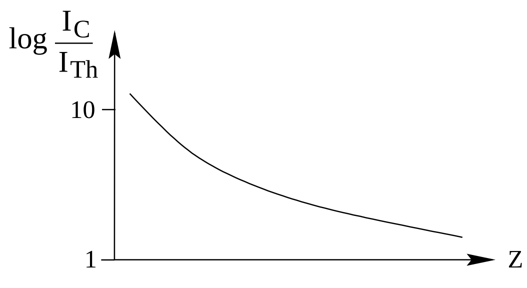
$$\sigma_c = \int_0^\pi \frac{d\sigma_e}{d\Omega} 2\pi \sin\theta \, d\theta$$

Dieses Integral ist kompliziert, da $\nu' = \nu'(\theta)$. Ausgedrückt in μ/ρ:



μ/ρ ist konstant in Z und schwach abhängig von E.

d) Verhältnis Compton/Thompson



Die starke Bindung insbesondere der inneren Elektronen sorgt dafür, daß die Thompson-Streuung insbesondere bei hohen Z eine mit der Compton-Streuung vergleichbare Wahrscheinlichkeit behält. (Photonimpuls wird wegen der Bindung auf Atom als Ganzes statt auf einzelnes Elektron übertragen).

Anwendung:

1. Wichtigster Prozess für Photon-Absorption im Bereich um 1 MeV
2. Oft eher störende Begleiterscheinung in der Röntgen- und Gammaspektroskopie (kontinuierlicher Untergrund)

2.2.3 Paarerzeugung

Teilchen $\leftrightarrow$ Antiteilchen

Für alle Konstituenten, die die Welt aufbauen, d.h. die fundamentalen Fermionen (Quarks und Leptonen) und für die aus Quarks zusammengesetzten Hadronen gilt eine vollkommene Symmetrie, d.h. für jedes Teilchen existiert ein entsprechendes Antiteilchen mit gleicher Masse, gleicher Lebensdauer, gleichem Spin ... und entgegengesetzter, aber vom Betrag her gleicher Ladung.

Beispiele:

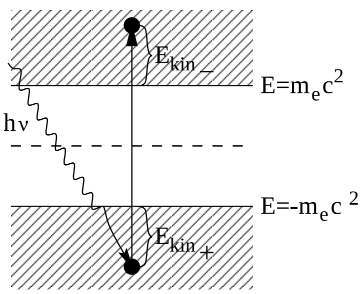
Elektron e^- $\leftrightarrow$ Positron e^+	Neutrino ν_e $\leftrightarrow$ Antineutrino $\bar{\nu}_e$
u-Quark $\leftrightarrow$ ū-Quark	Proton p $\leftrightarrow$ Antiproton p̄

Dirac'sche Vorstellung von Elektronen/Positronen

Energiesatz für relativistische Teilchen:

$$\begin{aligned} E^2 &= p^2c^2 + m_e^2c^4 \\ \Rightarrow E &= \pm\sqrt{p^2c^2 + m_e^2c^4} \end{aligned}$$

Mathematisch ist eine Lösung mit $E < 0$ möglich, physikalisch aber auf den ersten Blick nicht sinnvoll. In der Quantenphysik ist dies durchaus sinnvoll, einschließlich der dazugehörigen Übergänge!

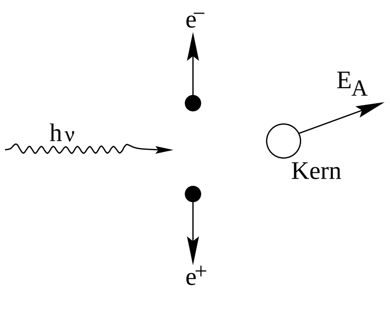


Dirac: Alle Zustände mit $E < 0$ sind normalerweise besetzt. Durch Energiezufuhr (Quant) wird ein Elektron emittiert und ein „Loch" verbleibt. Das „Loch" hat:

- die Energie $-(-E) = +E$
- den Impuls $-(-\vec{p}) = +\vec{p}$
- die Ladung $-(-e) = +e$

d.h., das Loch benimmt sich wie ein physikalisches Teilchen mit der Ladung $+e$, das „Positron" (Nachweis 1932 in der kosmischen Strahlung durch Anderson). Somit ist *Paarerzeugung* möglich, d.h. die kinetische Energie eines Quants $h\nu$ wird umgewandelt in die Ruheenergie $\sum m_ec^2$ und die kinetische Energie $\sum E_{\text{kin}}$ eines Teilchen-Antiteilchen-Paares e^+e^-, dabei werden alle Erhaltungssätze beachtet: Energieerhaltung, Impulserhaltung und Ladungserhaltung.

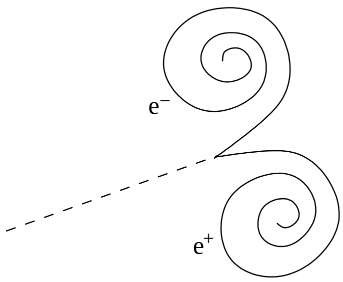
Der Prozess ist im Vakuum unmöglich; er benötigt die Anwesenheit eines elektrisch geladenen Partners, i.A. eines Atomkerns, der auch die gleichzeitige Energie- und Impulserhaltung ermöglicht ($\vec{p}_\nu$ ist zu groß, um allein von $\vec{p}_{e^+}$ und $\vec{p}_{e^-}$ aufgenommen werden zu können).



$$\begin{aligned} \text{Energiesatz: } h\nu &= 2m_ec^2 + E_{K,+} + E_{K,-} + E_A \\ \text{Impulssatz: } \vec{p}_\nu &= \vec{p}_{e,+} + \vec{p}_{e,-} + \vec{p}_A \end{aligned}$$

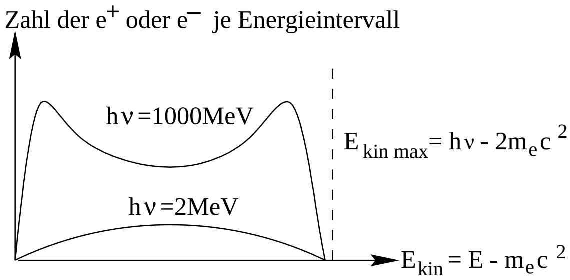
Die Impulsvektoren sind i.A. nicht koplanar. E_A ist aus den selben Gründen wie in 2.21 diskutiert vernachlässigbar klein, so dass sich die Schwellenenergie $2m_ec^2$ für den Prozess kaum vergrößert.

Visualisierung der Erzeugung eines Elektron-Positron-Paares, z.B. in einer Blasenkammeraufnahme:



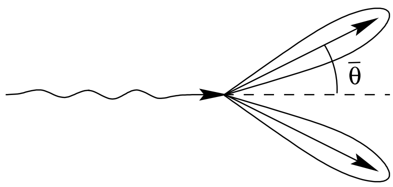
Ein $\vec{B}$-Feld senkrecht zur Zeichenebene trennt das Paar. Die Krümmung der Bahnen ist entgegengesetzt, da die Richtung der aus dem $\vec{B}$-Feld resultierenden Lorentz-Kraft vom Vorzeichen der Ladung abhängt. Durch Abbremsung wird der Radius mit der Zeit geringer. Das auslösende Quant ist nicht sichtbar, hier gestrichelt angedeutet.

Verteilung der kinetischen Energien:



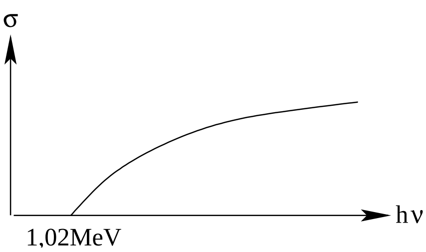
Die Verteilung ist immer symmetrisch wegen des zweiten Partners. Niedrige Quantenenergien: gleichförmige Aufteilung im Mittel. Hohe Energien: ungleichmäßige Aufteilung ist häufiger

Winkelverteilung der Elektronen/Positronen:



Im extrem relativistischen Bereich wird $\bar{\theta} \approx m_ec^2/h\nu$ für $h\nu \gg m_ec^2$; dies wird verursacht durch die Impulsübertragung (ähnlich zum Photoeffekt)

Totaler Wirkungsquerschnitt



$$\begin{aligned}\sigma_{\text{Paar}} &= 3\left(\frac{\hbar c}{m_ec^2}\right)^2 \alpha^2 Z^2 \ln\left(\frac{E_\gamma}{2m_ec^2}\right)\\ \mu/\rho &= N_L/A\cdot\sigma \propto Z\ln E\end{aligned}$$

Der Wirkungsquerschnitt steigt mit E und Z.

Anwendungen

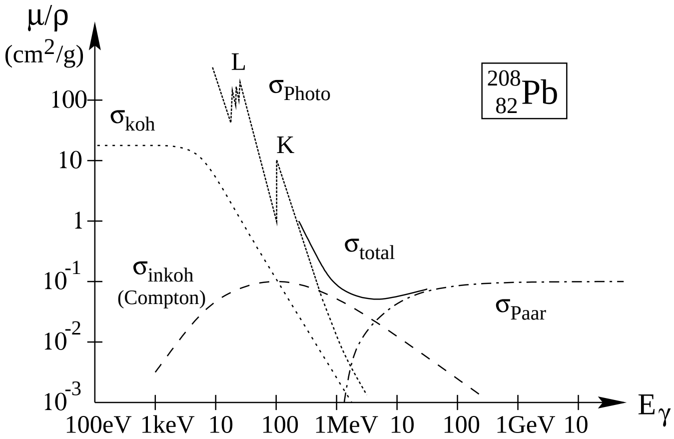
- für $E_\nu > 10$ MeV ist dies der dominierende Prozess bei WW von EM-Strahlung mit Materie. Er lässt sich somit zur qualitativen und quantitativen Messung hochenergetischer Quanten einsetzen.
- Über Paarerzeugung durch Bremsstrahlung eines Elektronen-Beschleunigers lassen sich *Positronenströme* erzeugen. Dies ist von überragender Bedeutung für Speicherringe für e^+e^--Kollisionen (PEP, PETRA, LEP).

2.2.4 Zusammenfassung

Gesamte WW von EM-Strahlung mit Materie:

$$\sigma_{tot} = \sigma_{\text{koh}} + \sigma_{\text{Photo}} + \sigma_{\text{Compton}} + \sigma_{\text{Paar}}$$

Gleiches gilt für μ/ρ.



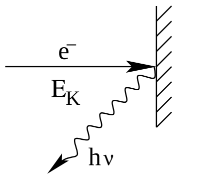
Beispiel Blei
Z-Abhängigkeit der verschiedenen Wirkungsquerschnitte:

- Photoeffekt $\propto Z^4$
- Comptonstreuung konstant
- Paarerzeugung $\propto Z$
- kohärente (Rayleigh-)Streuung

Anwendungen: Nachweis von Quanten mit der jeweils optimalen Wahl des Prozesses für den jeweiligen Energiebereich

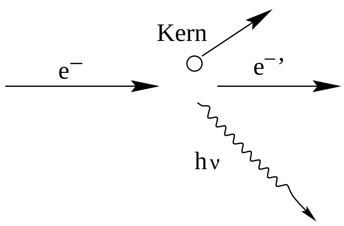
2.2.5 Bremsstrahlung

Grundprozess



Auf Materie auftreffende Elektronen erzeugen Bremsstrahlung. Dies ist klassisch verständlich (beschleunigte Ladungen strahlen).
Beschleunigung kann heißen:

- Abbremsung im Feld eines Kerns oder eines Atoms.
- Kreisbahn, z.B. in Bescheunigern: *Synchrotonstrahlung* (hier nicht betrachtet).



Die Emission ist quantenhaft, d.h. die Energie wird in Form einzelner Quanten mit einem kontinuierlichen Energiespektrum emittiert. Auch hier erfolgt wieder eine Impulsaufnahme durch den Kern. Die Energieaufnahme ist dabei erneut klein.

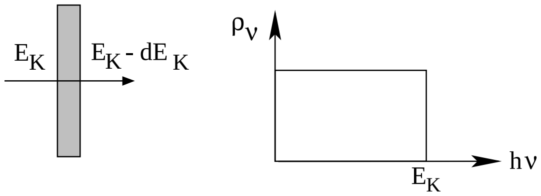
Das Kontinuum von Quanten besitzt eine scharfe Abschneidegrenze

$$\boxed{h\nu_{\max} = E_{K_e}}$$

Die gesamte Energie E_K wird dabei auf ein einziges Quant übertragen!

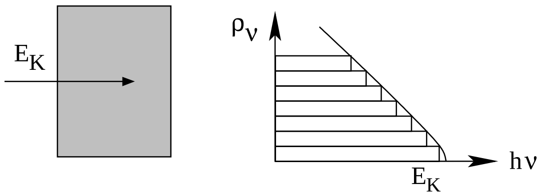
Verteilungsfunktion für die Strahlungsdichte ρ_ν (s. z.B. Bergmann-Schäfer)

Dünne Schicht



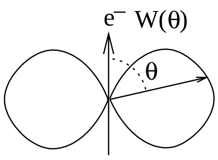
Die Verteilungsfunktion ist nahezu „weiß" bis zur Abschneidegrenze E_K.

Dicke Schicht

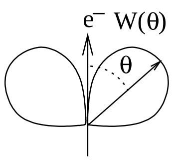


Die Elektronen werden zu $> 95\%$ durch Stöße mit den Atomen in der Schicht abgebremst (siehe 2.41); die „Effizienz" für Bremsstrahlungsemission ist $< 5\%$. Bei einer Zerlegung der dicken Schicht in eine Serie von dünnen Schichten hat daher jede folgende Schicht eine kleinere verbleibende Elektronenenergie (und daher ein kleineres $h\nu_{\max}$) als die vorangehende. Durch Summation entsteht eine dreieckige Verteilungsfunktion für ρ_ν.

Winkelverteilung



E_e klein $\Rightarrow$ Dipolstrahlung $\perp$ zur Richtung des e$^-$



E_e groß $\Rightarrow$ Emission nach vorn wegen schnell bewegter Quelle

Anwendungen

1. Abbremsung von Elektronen mit $E \gg 10$ MeV (Hauptprozess für Energieverlust); Erzeugung von Positronen (aus e$^+$e$^-$-Paaren für Beschleuniger, s.o.)

2. Röntgenröhre in medizinischer Diagnostik (bis $\sim$100keV)

2.3 Interferenz und Beugung einzelner Photonen

Zusammenfassung des Bisherigen

1. Licht hat Welleneigenschaften: es gibt Brechung, Interferenz und Beugung. Das Huygens'sche Prinzip bestimmt das Verhalten.

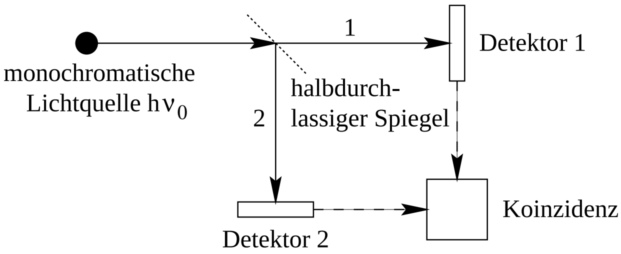
2. Licht hat Teilcheneigenschaften: $E = h\nu$, $p = h\nu/c$. Energie- und Impulserhaltung bestimmen das Verhalten.

3. Es wurde diskutiert, wie manche Erscheinungen in beiden Bildern verstanden werden können, andere dagegen nur in jeweils einem der beiden Bilder. Nun ist eine entscheidende Vertiefung notwendig: die **Welleneigenschaften *einzelner* Photonen**.

2.3.1 Kann man Photonen aufspalten?

Hypothese I: das Photon ist ein Wellenzug, der durch die Gesetze der klassischen Elektrodynamik vollständig beschrieben wird.

Experiment dazu:



Die Lichtquelle, die die Photonen (mikroskopisch gesehen) aus einzelnen atomaren Übergängen statistisch emittiert, sei so schwach, daß immmer nur *ein* Photon $h\nu_0$ in der Apparatur ist.

Es sind zwei Messmethoden denkbar:

- Bei Aufspaltung des Wellenzugs gäbe es Teilenergien $h\nu_1$ und $h\nu_2 < h\nu_0$. Detektoren mit Schwellwerten gerade ein wenig $< h\nu_0$ müssten auf $h\nu_0$ ansprechen, nicht aber auf $h\nu_1$ und $h\nu_2$.
- Koinzidenz-Messung, d.h. beide Detektoren müssten bei Schwellwerten $\ll h\nu_0$ im Fall der Aufspaltung des Wellenzugs gleichzeitig ansprechen.

Resultat des Experiments:

1. Kein Schwelleffekt, d.h. die Frequenz und damit die Quantenenergie ist unverändert ($h\nu_0$).
2. Die Zählrate der Detektoren halbiert sich.
3. Es gibt *keine* Koinzidenzen.

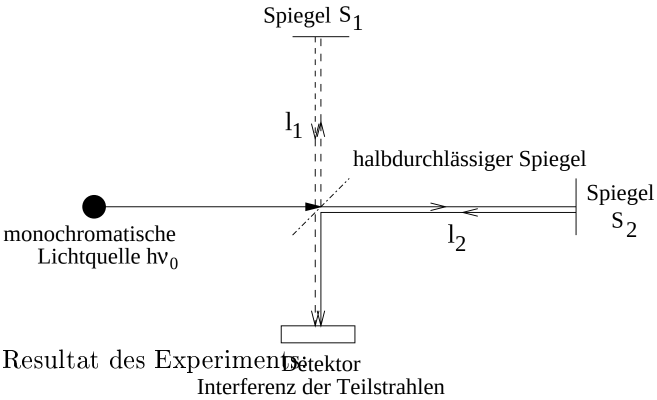
Folgerungen:

1. Photonen können nicht aufgespalten werden.
2. „Naive Lichtquantenhypothese", „Billardkugelvorstellung": Photonen gehen entweder den Weg 1 oder den Weg 2.
3. Zählraten geben die *Wahrscheinlichkeit* dafür an, dass ein Einzelphoton den Weg 1 oder 2 geht.

2.3.2 Interferenzexperimente

Hypothese II: Einzelne Photonen durchlaufen statistisch entweder den Weg 1 oder den Weg 2

Experiment dazu: Das Michelson-Interferometer



Die Lichtquelle sei auch hier so schwach, daß immer nur *ein* Photon gleichzeitig in der Apparatur ist. Der Nachweis der Photonen erfolgt mit einem ortsempfindlichen Detektor, der auf einzelne Photonen empfindlich ist.

Resultat des Experiments:

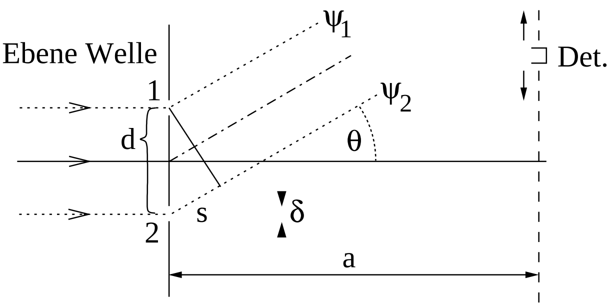
1. Es gibt Interferenzen, d.h. die Häufigkeitsverteilung der Photonen entlang des Detektors zeigt ein Interferogramm.
2. Die „naive Lichtquantenhypothese" ist ebenfalls falsch. In einem „höheren Sinne" wird das einzelne Photon *doch* aufgespalten. *Das Photon interferiert mit sich selbst.*
3. In der Summe findet sich die in das Interferometer eintretende Intensität, d.h. die Zahl der Photonen, auf dem Detektor wieder, es gehen also keine Photonen verloren.

Wir haben also ein sehr merkwürdiges *vorläufiges Resumée*:

- Emission eines Photons aus einem Atom erfolgt punktartig wie ein Teilchen.
- Absorption, d.h. Nachweis eines Photons (z.B. über Photoeffekt) verläuft ebenso punktartig.
- Dazwischen scheint das Photon makroskopisch über das Interferometer ausgedehnt zu sein und zeigt dabei seine Wellennatur.

2.3.3 Einschub: Quantitative Beschreibung von Beugungsbildern

1. Doppelspalt



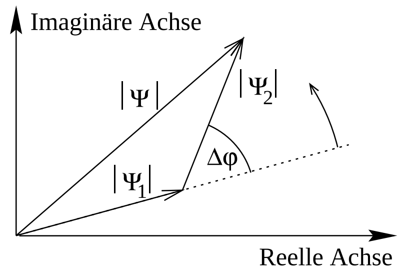
Annahme: Spaltbreiten δ seien klein gegenüber Spaltabstand d. Gangunterschied zwischen Teilstrahlen 1 und 2

$$s = \frac{\Delta\varphi}{2\pi}\lambda = d\sin\theta$$

Für die beiden Teilstrahlen ψ_1 und ψ_2 gilt

$$\begin{array}{lclcccccc} \psi_1 & \propto & e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} & = & \mathrm{f}(r,\theta) & \cdot & 1 & \cdot & e^{-i\omega t} \\ \psi_2 & \propto & e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t-\Delta\varphi)} & = & \mathrm{f}(r,\theta) & \cdot & e^{-i\Delta\varphi} & \cdot & e^{-i\omega t} \end{array}$$

Darstellung der Amplituden und Phasen als komplexe Vektoren

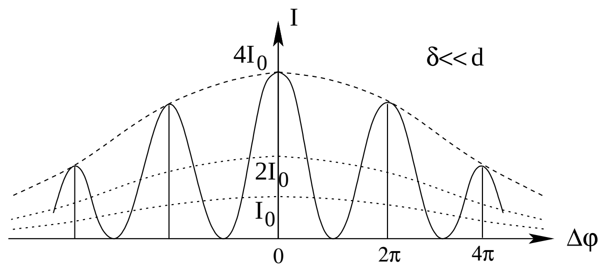


Das gesamte Vektorgerüst rotiert mit ωt um den Ursprung; dabei bleibt $\Delta\varphi$ fest, wenn Kohärenz zwischen den Teilwellen ψ_1 und ψ_2 besteht.

Gesamtamplitude: $\psi = \psi_1 + \psi_2$
Gesamtintensität: $I = |\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\,|\psi_1|\,|\psi_2| \cos\Delta\varphi$ $\qquad |\psi_1| = |\psi_2| = |\psi_0|$
(= Summe der Intensitäten + Interferenzterm)

$$\boxed{I = 2I_0 \left\{ 1 + \cos\left(\frac{2\pi d}{\lambda}\sin\theta\right)\right\}} \qquad I_0 = |\psi_0|^2$$

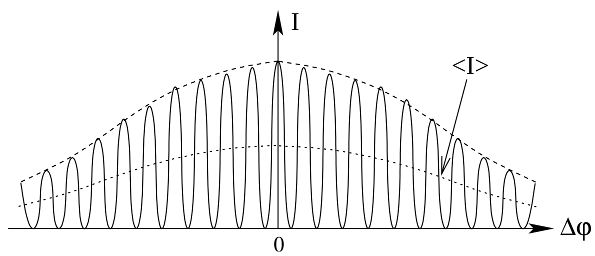
Diskussion:



Die Einhüllende des sich nach obiger Gleichung ergebenden Beugungsbildes des Doppelspalts ist $4I_0(\Delta\varphi)$, wobei $I_0(\Delta\varphi)$ dem breiten Beugungsbild von *einem* der beiden Einzelspalte entspricht (vergl. folgende Seite).

Maxima, d.h. komplett *konstruktive Interferenz* ergeben sich bei $\Delta\varphi = 0,\ 2\pi,\ 4\pi,\ \ldots$, d.h. bei $\sin\theta \approx \theta = n\lambda/d$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ Die Maximalintensität ist wegen der quadratischen Abhängigkeit von der Amplitude $4I_0$, *nicht* $2I_0$. Minima, d.h. komplett destruktive Interferenz, finden sich bei $\Delta\varphi = \pi,\ 3\pi,\ \ldots$; die Minimalintensität ist 0.

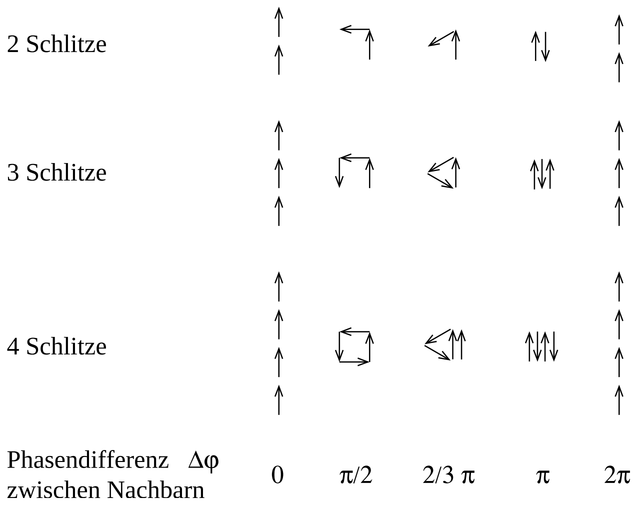
Grenzfall $\lambda \ll d$:



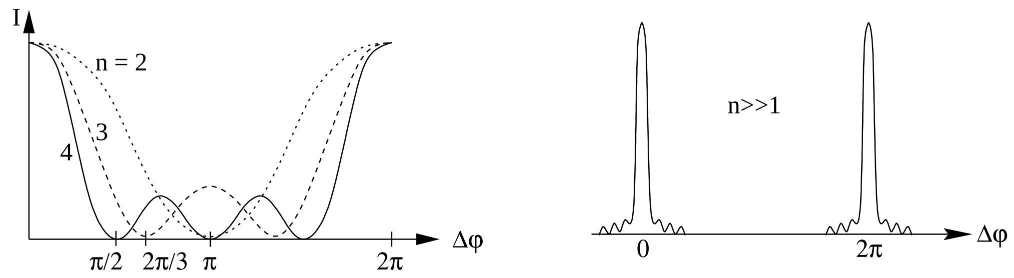
Liegen die Maxima sehr dicht beieinander, so daß sie nicht mehr aufgelöst werden können, misst man als gemittelte Intensität $\langle I \rangle$ über die Beugungsstruktur gerade $2I_0(\Delta\varphi)$, d.h. die addierten Beugungsbilder der beiden Einzelspalte.

2. Vielfachspalte

Erweiterung auf n Schlitze („Zeigerdiagramme")

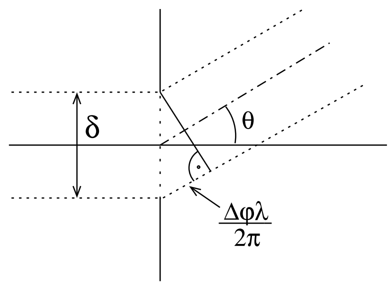


Es ergeben sich damit folgende Interferenzmuster:



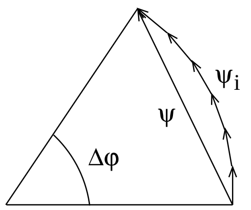
Bei der Interferenz von $n > 2$ Teilstrahlen treten Zwischenmaxima mit geringerer Intensität auf, im Fall von $n = 4$ z.B. bei $\sim\frac{2}{3}\pi$ und $\sim\frac{4}{3}\pi$. Das rechte Bild zeigt das Beugungsbild eines Gitters, d.h. den Übergang zu $n \gg 1$ (benutzt zur Präzisionsspektroskopie im optischen Bereich).

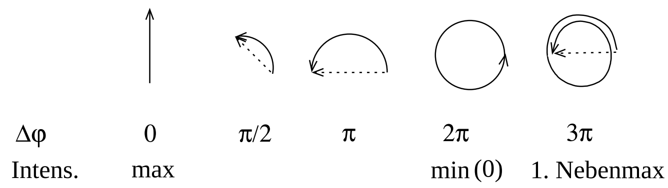
3. Beugung am Einzelspalt



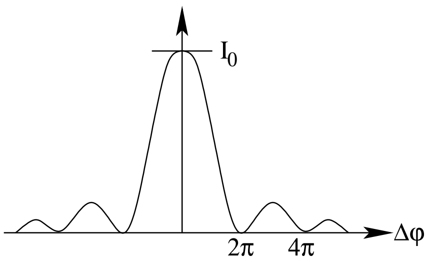
Behandlung der Phasen der Teilstrahlen auch hier durch Zeigerdiagramme; die Gesamtphasendifferenz $\Delta\varphi$ zählt von einem Ende der Zeigerkette zum anderen.

Zusammensetzung aus Teilstrahlen





Intensitätsverteilung



$$I\,(\Delta\varphi) = \left|\sum \psi_i\right|^2 \rightarrow \left|\int_{\text{Spalt}} \ldots\right|^2$$

$$\Rightarrow I(\Delta\varphi) = I_0 \cdot \left(\frac{\text{Sehne}}{\text{Bogen}}\right)^2$$

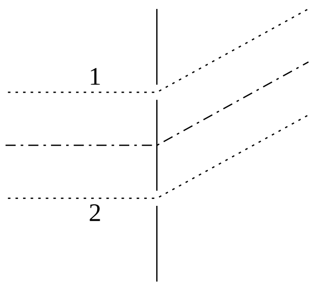
$$\Rightarrow \quad \boxed{I = I_0 \left(\frac{2\sin\Delta\varphi/2}{\Delta\varphi}\right)^2} \quad \text{mit} \quad \Delta\varphi = \frac{2\pi\delta}{\lambda}\sin\theta$$

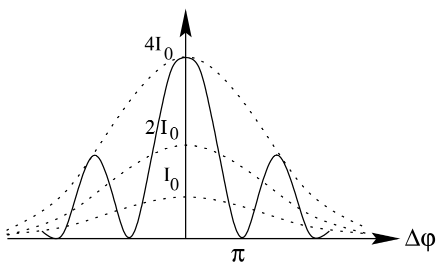
Die Methode der komplexen Zeiger ist offensichtlich effektiv und elegant; Beugungsbilder können mit einem Aufwand von nur wenigen Zeilen quantitativ berechnet werden. Eine alternative Methode, nämlich Beugungsbilder als Fouriertransformierte der beugenden Spaltgeometrie zu betrachten, wird im Abschnitt 2.51 diskutiert.

2.3.4 Welle-Teilchen-Dualismus und statistische Interpretation

I. Doppelspalt-Experimente mit einzelnen Photonen

1) Ohne Manipulationen





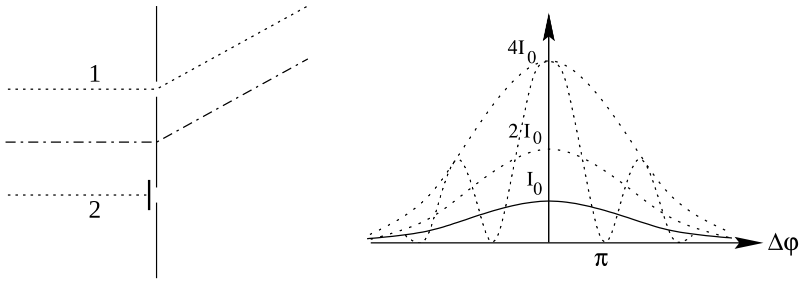
Beugungsbild des Doppelspalts

Resultat: Interferenzmuster auch für Einzelphotonen, wie in 2.33 beschrieben. Die Intensitätsverteilung gibt hier die relative Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Photon an der jeweiligen Stelle $\Delta\varphi$ nachzuweisen.

$$\boxed{\textit{Jedes durchgehende Quant geht sowohl durch Schlitz 1 wie Schlitz 2}}$$

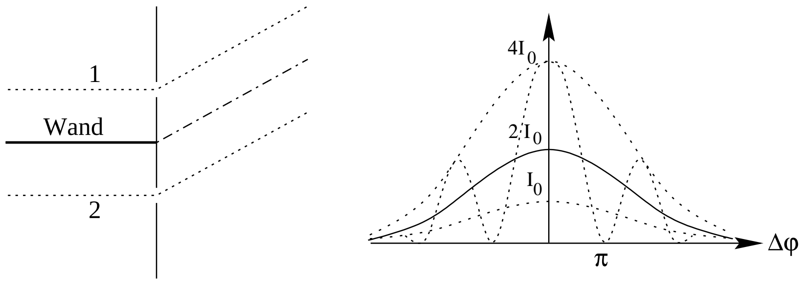
2) Mit diversen Manipulationen

a) Abdeckung eines Spalts



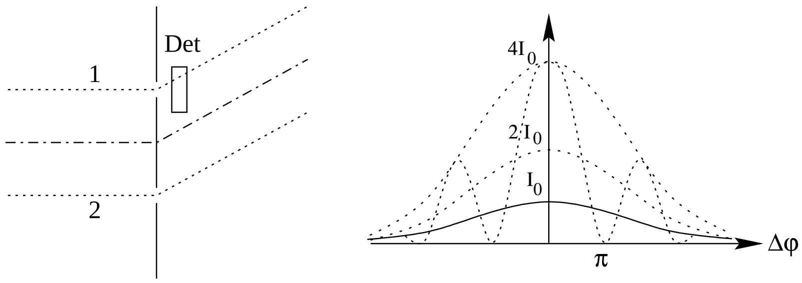
Beugungsbild eines Einzelspalts (hier trivial)

b) Zwischenwand



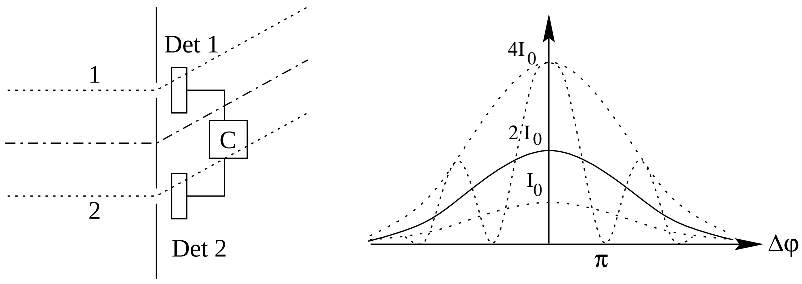
Inkohäherente Überlagerung des Beugungsbildes der beiden Einzelspalte

c) Ortsnachweis durch Detektor



Nur Aufzeichnung der Ereignisse, in denen der Detektor angesprochen hat: Beugungsbild eines Einzelspalts

d) Ortsnachweis durch zwei Detektoren



1. Es spricht entweder Det. 1 oder Det. 2 an. Die Kenntnis wird aber nicht genutzt! Es ergibt sich wie bei b) die Überlagerung der Beugungsbilder der Einzelspalte.

2. Keine Koinzidenzen!

Gemeinsames Resultat von a) – d):

> *Jeder Versuch, in einem einzelnen Ereignis Gewissheit darüber zu erlangen, ob Weg 1 oder Weg 2 benutzt wurde, zerstört die Interferenz.*

Diskussion:

Beachte: Experiment 1) versucht die Wellennatur zu messen, es stört nicht die beiden Schlitze. Experimente unter 2) versuchen die Teilchennatur zu messen, also das Teilchen zu lokalisieren; dabei geht die Interferenz verloren.

$\Rightarrow$ Kein Widerspruch in den Erscheinungen, sondern nur in den Modellvorstellungen!

Das Wellenmodell beschreibt den Ausbreitungsvorgang und die Intensitätsverteilung korrekt, falls die mittlere Zählrate mit der Wellenintensität gleichgesetzt wird. Es widerspricht aber dem Zählerverhalten. Das Teilchenmodell beschreibt den Nachweis von Quanten in Elementarprozessen und das Ausbleiben von Koinzidenzen korrekt, widerspricht aber dem Interferenzverhalten.

Ein Photon kann gespalten werden im Sinne einer Welle mit anschließender Interferenzmöglichkeit. Die Frage nach dem genommenen Weg ist dann irrelevant. Ein Photon kann nicht aufspalten in dem Sinn, dass ein Bruchteil eines Photons in einem Detektor beobachtet werden könnte.

Niels Bohr: Wellen- und Teilchenbild sind komplementär:

1. Beobachtet man die Wellennatur, kann nicht zur gleichen Zeit die Teilchennatur beobachtet werden und umgekehrt.

2. Wellen- und Teilchenaspekte existieren als potentielle Möglichkeiten: Experimente sind nötig, um diese Möglichkeiten in etwas Beobachtbares zu verwandeln. Die bloße Beobachtung des einen Aspekts unterdrückt dann den anderen!

II. Statistische Interpretation (s. Feynman Bd. III)

Definitionen:

1. Ein Experiment, in dem die Anfangs- und Endbedingungen vollständig beschrieben sind, heißt „ideal".

2. Ein „Ereignis" ist ein spezieller Satz von Anfangs- und Endbedingungen (z.B. Photon verlässt Quelle, geht durch Apparatur, wird nachgewiesen).

Allgemeingültige Aussagen:

1. Die Wahrscheinlichkeit P für ein Ereignis in einem idealen Experiment ist gegeben durch (Amplitude)^2 einer komplexen Amplitude ψ, der sog. Wahrscheinlichkeitsamplitude (Max Born 1926).

$$\begin{aligned} &\psi && \text{Wahrscheinlichkeitsamplitude (immer komplex)} \\ &P && \text{Wahrscheinlichkeitsdichte } \left(\frac{\text{Wahscheinlichkeit}}{\text{Volumen}}\right) \\ &P &=& \; |\psi|^2 \end{aligned}$$

2. Kann ein Ereignis mit den Amplituden ψ_1, ψ_2 bzw. $(\psi_1 ... \psi_n)$ auf mehrere verschiedene Weisen stattfinden, so gilt:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \text{ bzw. } \sum \psi_i$$

$$P = |\psi_1 + \psi_2|^2 \text{ bzw. } \left|\sum \psi_i\right|^2$$

$\Rightarrow$ die Möglichkeit von Interferenzen ist von Grund auf mit eingebaut.

3. Wird in einem idealen Experiment festgestellt, *welche* der Alternativen wirklich stattfindet, so gilt:

$$P = P_1 + P_2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \text{ bzw. } \sum |\psi_i|^2$$

$\Rightarrow$ Interferenz geht verloren!

Beachte: P muß i.A. normiert werden, üblich ist z.B. $\int \psi\psi^* \, d\tau = 1$ (s. Kapitel 4)

Unterschied Quantenphysik – klassische Physik

Die Quantenphysik macht keine exakten deterministischen Aussagen, ihre Aussagen für das Einzelereignis sind statistischer Natur. Ob ein Experiment den Ausgang 1 oder 2 liefert, ist quantenphysikalisch eine sinnlose Frage. Exakte Aussagen über den Verlauf von Einzelereignissen sind prinzipiell unmöglich! (All dies wird über den gesamten Rest der Vorlesung an vielen Einzelbeispielen diskutiert werden).

2.4 Materiewellen und Teilchen

„Materiewellen": Beschreibung von Teilchen mit $m_0 \neq 0$ durch Wahrscheinlichkeitsamplituden ψ, in vollständiger Analogie zur Beschreibung von Photonen in Kap. 2.3.

Historische Entwicklung:

Photonen: EM-Wellen, dann Teilchennatur, dann Wellen-Teilchen-Dualismus im Sinne von ψ

Elektronen: Teilchennatur, dann Wellen-Teilchen-Dualismus im Sinne von ψ

2.4.1 Teilchennatur

Geschichte des Elektrons

1858 Entdeckung des Elektrons als „Kathodenstrahlen" in Gasentladungen

1897 Messung von e/m in Kombination von elektrischen und magnetischen Feldern (Thompson)
Kein Beweis für Teilchennatur, „Bahnen" sind auch für Wellen möglich (siehe geometrische Optik). Die Teilchennatur wurde „naiv" unterstellt (vermutlich: elektrisch geladene Wellen nicht vorstellbar).

1924 de Broglie's Wellenhypothese. Behauptung: alle Ablenkungsexperimente oder Geschwindigkeitsmessungen an Elektronen sind auch im Wellenbild verständlich!

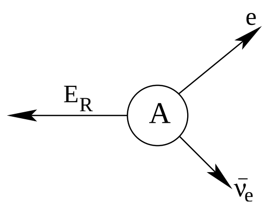
1927 Davisson und Germer: Nachweis der Wellennatur durch Elektronenbeugung in Kristallen

Aspekte, die nur im Teilchenbild verständlich sind

1) Stoßprozesse

1. **Einzelprozesse zwischen Elektronen und Quanten**
   Photoeffekt, Comptoneffekt, Paarbildung, etc., s. Kap. 2.2

2. **Elementare Zerfallsprozesse**

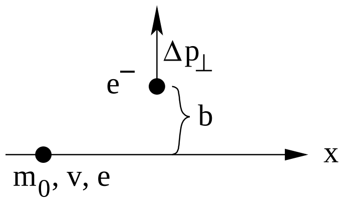


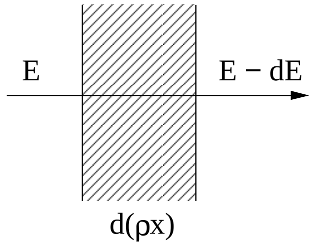
Beispiel: Kern-β-Zerfall:
Zerfall eines Atomkerns der Masse A und Protonenzahl Z in einen Kern $A, Z+1$ unter Emission eines Elektrons e^- und eines (Anti-) Elektronneutrinos
Energie- und Impulserhaltung gemeinsam für alle 3 Partner

3. **Durchgang geladener Teilchen durch Materie**

Grundidee von Bohr und Bethe/Bloch:

In einem *distanten* Einzelstoß eines geladenen Teilchens der Masse m_0, Geschwindigkeit v, Energie E und Ladung e mit einem Elektron in der durchlaufenen Schicht findet ein Impulsübertrag $\Delta p_\perp$ und damit verknüpft ein Energieverlust ΔE statt. Der gesamte Energieverlust entsteht durch Mittelung über den Stoßparameter b und Summierung über (typisch) $10^4 - 10^6$ Einzelstöße. Die Einzelstöße erfolgen statistisch unabhängig voneinander.





Die Grundidee macht die $1/v^2$-Abhängigkeit (s. Gleichung unten) plausibel:

$$\text{Impulsübertrag: } \Delta p_\perp = \int_{-\infty}^{+\infty} F_\perp(t)\, dt = \frac{e}{v}\int_{-\infty}^{+\infty} E_e(x)\, dx \overset{\substack{\text{Gauss'sches Gesetz} \\ \downarrow}}{\propto} \frac{e}{v}\cdot\frac{e}{2\pi b}$$

$$\text{Energieverlust: } \Delta E \propto (\Delta p_\perp)^2 \propto \frac{e^4}{b^2 v^2}$$

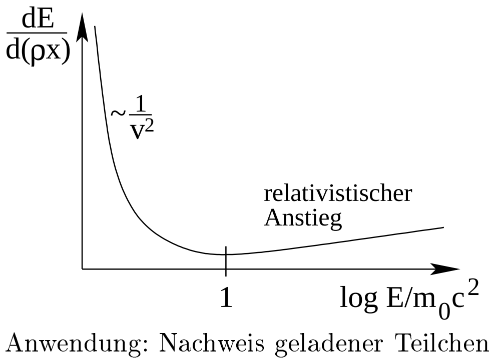
Endresultat nach Mittelung und Summierung (s. Literatur):

$$\boxed{\frac{dE}{d(\rho x)} = 0.31\frac{\text{MeV}}{\text{g/m}^2}\cdot\left(\frac{Z}{A}\right)_{absorb}\cdot\frac{c^2}{v^2}\cdot f(v) = F(v)}$$

„Spezifischer Energieverlust"

„Bethe-Bloch-Formel"

Gültig für alle geladenen Teilchen: p, α, e^- etc.



Die Funktion $f(v)$ ist const. für nichtrelativistische Energien, und logarithmisch mit γ ansteigend für relativistische Energien ($v \to c$). Der Anstieg wird durch die relativistische Zunahme des elektrischen Feldes $\perp$ zur Bewegungsrichtung verursacht (s. Kap. 1.64), die $\Delta p_\perp$ entsprechend vergrößert.

Anwendung: Nachweis geladener Teilchen in Detektoren. Als Sekundäreffekt wird die Ionisation der durchlaufenden Materie genutzt. Die „Sichtbarmachung" von Spuren geladener Teilchen ist eine der besten Demonstrationen der Teilchennatur.

2) Schwankungserscheinungen, „Rauschen":

Beispiel Schrot-Rauschen (Schottky) in Röhre:

$$\overline{\Delta I^2} = 2eI\Delta\nu$$

> I: Sättigungsstrom zur Anode
> $\overline{\Delta I^2}$: mittleres Schwankungsquadrat von I
> $\Delta\nu$: beobachtetes Frequenzintervall des Wechselstromanteils

$\Rightarrow$ die einzelnen Teilchen prasseln statistisch verteilt auf die Anode wie Schrotkörner.
Historisch interessante Anwendung: Messung von e aus $\overline{\Delta I^2}$ auf 1% genau: Hull, Williams 1927.

2.4.2 de Broglie-Wellen

1. Vorbemerkungen

Wiederholung: Ebene, monochromatische Welle in x-Richtung:

$$\psi(x,t) = Ae^{i\varphi}, \quad \varphi = kx - \omega t = \text{Phase}$$

Die vorkommenden Größen

$$\begin{array}{ll} \text{Kreisfrequenz:} & \omega = 2\pi\nu \\ \text{Wellenzahl} & k = |\vec{k}| = \dfrac{2\pi}{\lambda} \end{array}$$

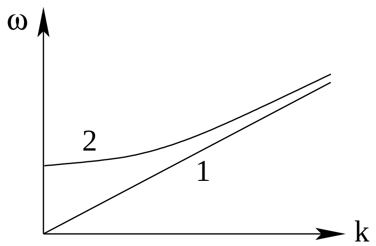
sind grundsätzlich unabhängig voneinander definiert.
Ebene Flächen mit konstanter Phase propagieren mit:

$$\boxed{v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k}} \quad \text{„\textit{Phasengschwindigkeit}"}$$

Zusätzlich wird später benötigt werden:

$$\boxed{v_g = \frac{d\omega}{dk}} \quad \text{„\textit{Gruppengeschwindigkeit}"}$$

Der Zusammenhang $\boxed{\omega = \omega(k)}$ heißt *Dispersionsrelation.*



- Wenn v_{ph} =const., unabhängig von ω, ist die Welle *dispersionsfrei*; die Dispersionsrelation ist linear (Beispiel 1).
- Wenn $v_{\text{ph}} = v_{\text{ph}}(\omega)$, zeigt die Welle *Dispersion*; die Dispersionsrelation ist nichtlinear (Beispiel 2). Dies ist der Normalfall in der Natur.

Dispersionsfreie Wellen sind z.B. EM-Wellen in Vakuum. Wellen mit Dispersion sind z.B. Wasserwellen, EM-Wellen in Materie, schwingende Pianosaiten und de Broglie-Wellen (mehr dazu s. 2.52).

Wiederholung: Zusammenhang zwischen Wellen- und Teilchenaspekten im Fall von Photonen:

- $\hbar\omega = E$
- $\hbar|\vec{k}| = \dfrac{h}{\lambda} = |\vec{p}|$

Diese Beziehungen sind relativistisch korrekt, d.h.

1. E und p bzw. ω und k transformieren sind in gleicher Weise.
2. $\vec{r}, t$ sowie $\vec{p}, E$ und $\vec{k}, \omega$ bilden sog. Vierervektoren im Minkowski-Raum.

2. Die de-Broglie-Hypothese (1924)

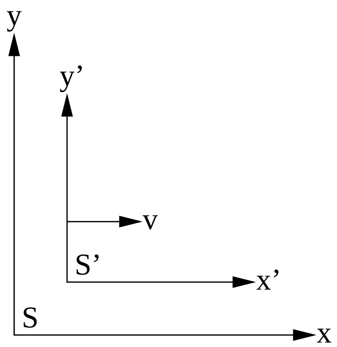
Auch Teilchen mit $m_0 \neq 0$, wie z.B. Elektronen, können als Quanten eines Wellenfeldes $\psi(x,t)$ aufgefasst werden.

Vorschlag in völliger Analogie zu Photonen, allgemein gültig im *feldfreien* Raum:

$$\boxed{\begin{aligned} \hbar\omega &= E = mc^2 \\ \hbar|\vec{k}| &= \frac{h}{\lambda} = |\vec{p}| = mv \end{aligned}}$$

ω und k sind (Kreis-)Frequenz und Wellenzahl der „Materiewelle". Die Gleichungen sind auch für $m_0 \neq 0$ relativistisch korrekt!

Argumentation:



Materiewelle in S bzw. S':

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= Ae^{i\,(kx - \omega t)} && \text{im System des Beobachters} \\ \psi'(x',t') &= A'e^{i\,(k'x' - \omega' t')} && \text{im Eigensystem des Teilchens} \end{aligned}$$

Im Eigensystem ist $\vec{k}' = 0$, $\vec{p}' = 0$, $E' = m_0c^2$.

Annahme: In S' sei wirklich $\hbar\omega' = E'$, d.h. $\omega' = m_0c^2/\hbar$. Bei Transformation einer Welle muss die Phase $\varphi = kx - \omega t$ Lorentz-invariant sein, z.B. ist ein Nulldurchgang in einem System auch ein Nulldurchgang im anderen System. Somit

$$kx - \omega t = -\omega' t' = -\left(\frac{m_0c^2}{\hbar}\right)t'$$

mit Lorentz-Transformation:

$$t' = \gamma\left(t - \frac{v}{c^2}x\right)$$

$$kx - \omega t = \gamma\frac{m_0c^2}{\hbar}\left(\frac{v}{c^2}x - t\right)$$

Dies muss für jedes x und jedes t gelten; durch Koeffizientenvergleich erhält man

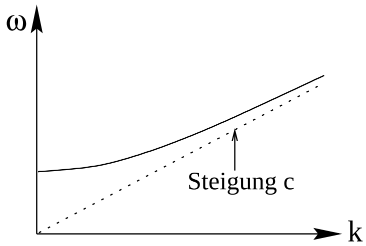
$$\begin{aligned} \text{Koeff. von t:} \quad \omega &= \frac{1}{\hbar}\gamma m_0 c^2 = \frac{E}{\hbar} \\ \text{Koeff. von x:} \quad k &= \frac{1}{\hbar}\gamma m_0 v = \frac{1}{\hbar} m v = \frac{p}{\hbar} \end{aligned}$$

Somit: Gilt im Eigensystem $E' = m_0 c^2 = h\omega'$, so gilt dies in jedem System. Die Beziehungen $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ sind Lorentz-invariant und gelten in jedem Bezugssystem.

Diskussion der Dispersionsrelationen $\omega\,(\mathbf{k})$

Zwei Möglichkeiten:

- Relativistische Energie-Impuls-Beziehung:



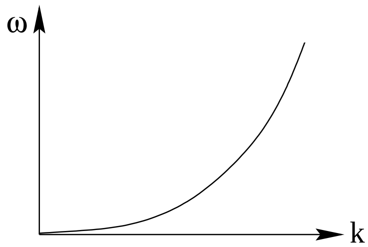
$$\begin{aligned} E^2 &= p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \\ \Rightarrow \hbar^2\omega^2 &= (\hbar c)^2 k^2 + m_0^2 c^4 \end{aligned}$$

Diese Dispersionsrelation ist *nicht* linear!

Phasengeschwindigkeit: $v_{\text{ph}} = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{E}{p} = \dfrac{mc^2}{mv} = \dfrac{c^2}{v} > c$ (unsinniges Ergebnis, jedenfalls keine Informationsübermittlung mit v_{ph} verknüpft)

Gruppengeschwindigkeit: $v_g = \dfrac{d\omega}{dk} = c^2\dfrac{k}{\omega} = \dfrac{c^2}{v_{\text{ph}}} = v$ (sinnvoll)

- Nicht-relativistische Energie-Impuls-Beziehung:



$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m_0} \\ \Rightarrow \hbar\omega &= \frac{h^2 k^2}{2m_0} \end{aligned}$$

Auch diese Dispersionsrelation ist *nicht* linear, aber verschieden von der relativistisch korrekten.

Phasengeschwindigkeit: $v_{\text{ph}} = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{\hbar k}{2m_0} = \dfrac{p}{2m_0} = \dfrac{v}{2} < c$ (verschieden von vorher)

Gruppengeschwindigkeit: $v_g = \dfrac{d\omega}{dk} = 2\dfrac{\hbar k}{2m_0} = 2v_{\text{ph}} = v$ (gleich zu vorher)

Folgerungen

1. Materiewellen zeigen schon im Vakuum Dispersion.

2. Die Phasengeschwindigkeit v_{ph} ist physikalisch sinnlos. Sie ist *keine Observable* (s.u.). Die unterschiedlichen Resultate stellen daher auch kein Problem dar (dieser Sachverhalt wird oft nicht klar dargestellt).
3. Die Gruppengeschwindigkeit v_g ist immer gleich der Teilchengeschwindigkeit. Sie ist eine *Observable*.

Unterschiede zum Quantenbild: Die Analogie zu Quanten ist nicht vollständig.

Bedeutung von E bei Quanten: Energie zur Erzeugung oder Vernichtung eines Quants; E und ω sind eindeutig definiert und direkt messbar. Bedeutung von E für $m_0 \neq 0$: $E = mc^2 + E_{pot}$; der Ausdruck ist nur bis auf eine additive Konstante definiert!

Erweiterte de Broglie-Hypothese zur Präzisierung des Problems: Materiewellen im elektrischen Potential U und magnetischen Vektorpotential $\vec{A}$:

$$\boxed{\begin{array}{rcl} \hbar\omega & = & mc^2 + eU = E_{\text{tot}} \\ \hbar\vec{k} & = & \vec{p} + e\vec{A} \end{array}} \qquad \begin{array}{rcl} \vec{E} & = & -\vec{\nabla}U \\ \vec{B} & = & \vec{\nabla} \times \vec{A} \end{array} \tag{2.0}$$

Der Zusatz eU (bzw. $e\vec{A}$) ist notwendig, sonst wäre ω ortsabhängig und die Welle nicht stationär. In dieser Form bilden ω und $\vec{k}$ wieder einen Vierervektor im Minkowskiraum. Es stellt sich erneut das Problem: U ist nur bis auf eine additive Konstante bestimmt, auch zum magnetischen Vektorpotential $\vec{A}$ kann ein weiteres quellenfreies Potential $\vec{A}_0$ (d.h. $\vec{\nabla} \times \vec{A}_0 = 0$) addiert werden, ohne dass sich $\vec{B}$ ändert.

$\Rightarrow$ | ω und $\vec{k}$ sind nicht *eichinvariant*, d.h. sie ändern sich mit Änderung des Bezugspunktes. Strenggenommen sind auch ω und $\vec{k}$ *keine Observablen.*

Lösung des Problems: Wahl des Bezugspunktes z.B. in E beeinflusst ω und damit die Phase von ψ wegen des Faktors $e^{i\omega t}$. *Phasendifferenzen* hingegen bleiben erhalten, und nur diese sind für beobachtbare Effekte, z.B. Interferenzmuster, entscheidend (observabel ist nur $|\psi|^2$, nicht ψ selbst). Dies wird am Beispiel des Doppelspalts weiter unten ausführlich diskutiert werden. „Konvention" daher für den feldfreien Fall: Benutzung von k, λ etc. als „Rechengrößen" mit U bzw. $\vec{A} = 0$, d.h. Ignorierung des Problems der mangelnden Eichinvarianz.

Größenordnung der Wellenlängen von Materiewellen

$$p = \hbar k \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\gamma m_0 v}} \qquad \text{„de Broglie-Wellenlänge"}$$

$$\text{nichtrel. Elektronen:} \quad \lambda_{e^-} = \sqrt{\frac{1.50}{E_{kin}\,(\text{eV})}}\ [\text{nm}]$$

$$\text{nichtrel. Neutronen:} \quad \lambda_n = \sqrt{\frac{8.2 \cdot 10^{-4}}{E_{kin}\,(\text{eV})}}\ [\text{nm}]$$

Numerische Beispiele:
$$\left.\begin{array}{lccl} \text{Photon} & E_\nu & = & 6 \text{ keV} \\ \text{Elektron} & E_{\text{kin}} & = & 40 \text{ eV} \\ \text{Neutron} & E_{\text{kin}} & = & 0.025 \text{ eV} \end{array}\right\} \quad \lambda = 0.2 \text{ nm}$$

Die unterschiedlichen Ruhemassen erfordern für die gleiche Wellenlänge sehr verschiedene Energien.

Experimenteller Nachweis der Wellennatur

1927 Davisson/Germer, Thompson: Bragg-Interferenz an Kristallen mit Elektronen

später: Nachweis von Interferenzen auch für Atome, Neutronen, etc. (s.u.)

♠ Hinweis Bild: NN, Röntgen und Elektronenbeugung an polykristallinem Al

♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 5-6, Davisson's Daten zur de Broglie-Wellenlänge

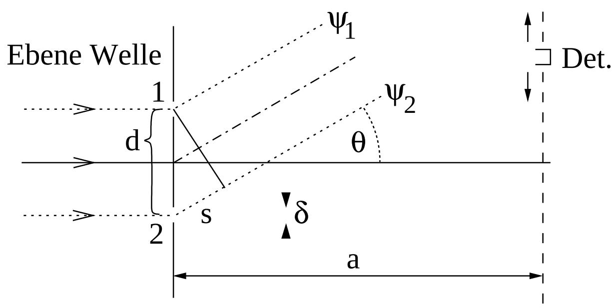
Anwendungen der Wellennatur

Nutzung von Photonen, Elektronen, Neutronen und anderen Teilchen zur Analyse der räumlichen Struktur von Materie. Man wählt die Teilchenart entsprechend ihrer Wellenlänge und der unterschiedlichen Wechselwirkungen (s. Kap. 4.1 und 4.2).

2.4.3 Beugung einzelner Elektronen am Doppelspalt

In vielen Büchern wird dies als Gedankenexperiment aufgeführt, es wurde jedoch tatsächlich durchgeführt (Jönsson, Z. Phys. **161** (1961) 454)

Aufbau des Experiments



Der Detektor misst die Wahrscheinlichkeit P für den Nachweis eines Elektrons als Funktion des Ortes

Zahlenwerte für die Geometrie des Doppelspalts und das erwartete Beugungsmuster:

Elektronenenergie: $E_{kin} = 50$ keV, $\Rightarrow \lambda = 5.4 \cdot 10^{-10}$ cm $= 0.005$ nm
Spaltabstand: $d \approx 2\ \mu$m, Spaltbreite $\delta \approx 0.5\ \mu$m
Abstand der Maxima: $\sin\theta \approx \theta = \lambda/d \approx 2.7 \cdot 10^{-6}$
Räumlicher Abstand: (in 35 cm Entfernung) $b = a \sin\theta \approx 1\ \mu$m(!)

$\Rightarrow$ Das Interferenzmuster musste zum Nachweis ca. 100fach elektronenoptisch vergrößert werden.

Experimentelle Resultate

Die de Broglie-Beziehung $\lambda = h/mv$ bestätigt sich auch hier. Man findet ein Interferenzmuster völlig analog zu dem einzelner Photonen.

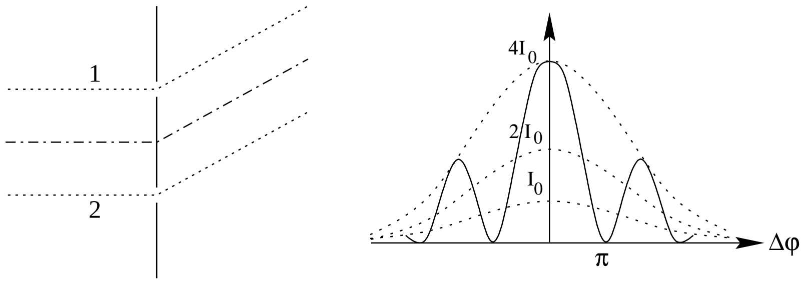
♠ Hinweis Bilder: Rohlf Fig. 5-11 (**Doppelspalt-Resultat Elektronen**) im Vergleich zu Fig. 5-10 (**Doppelspalt-Resultat Photonen**)

Modernes Beispiel: Beugung von Neutronen am Doppelspalt (A. Zeilinger, Am. J. Phys. 59 (1991) 316)

♠ Hinweis Bild: NN Fig. 4.11 und 4.12 (**Doppelspalt-Resultat Neutronen**)

Die Diskussion im Einzelnen folgt der der Photonen in Kap. 2.34:

1) Ohne Manipulationen



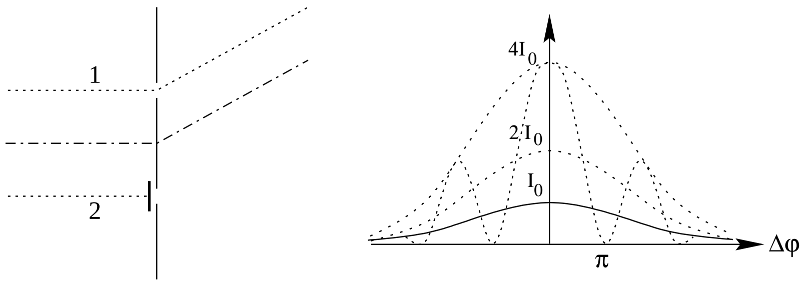
Beugungsbild des Doppelspalts

Resultat: Interferenzmuster auch für Einzelelektronen, wie in 2.33 beschrieben. Die Intensitätsverteilung gibt hier die relative Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Elektron an der jeweiligen Stelle $\Delta\varphi$ nachzuweisen.

Jedes durchgehende Elektron geht sowohl durch Schlitz 1 wie Schlitz 2

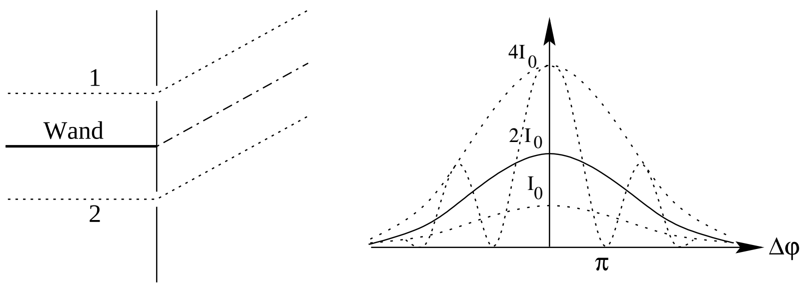
2) Mit diversen Manipulationen

a) Abdeckung eines Spalts



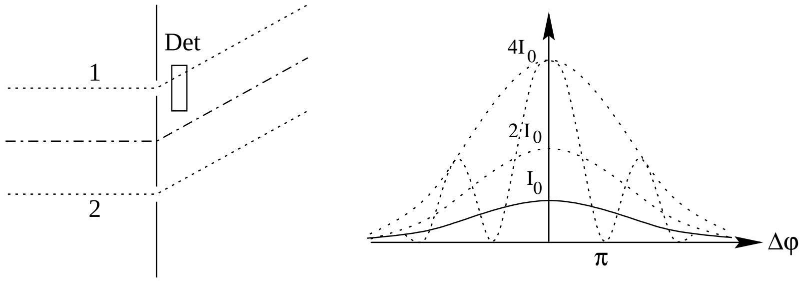
Beugungsbild eines Einzelspalts (hier trivial)

b) Zwischenwand



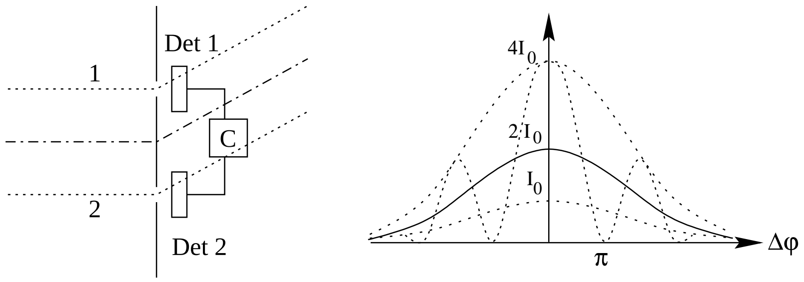
Inkohäherente Überlagerung des Beugungsbildes der beiden Einzelspalte

c) Ortsnachweis durch Detektor



Nur Aufzeichnung der Ereignisse, in denen der Detektor angesprochen hat: Beugungsbild eines Einzelspalts

c) Ortsnachweis durch zwei Detektoren



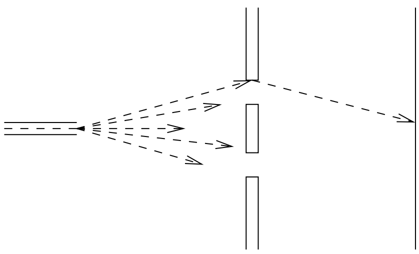
1. Es spricht entweder Det. 1 oder Det. 2 an. Die Kenntnis wird aber nicht genutzt! Es ergibt sich wie bei b) die Überlagerung der Beugungsbilder der Einzelspalte.

2. Keine Koinzidenzen!

Gemeinsames Resultat von a) – d):

Jeder Versuch, in einem einzelnen Ereignis Gewissheit darüber zu erlangen, ob Weg 1 oder Weg 2 benutzt wurde, zerstört die Interferenz.

Gleiches Experiment mit Schrotkugeln

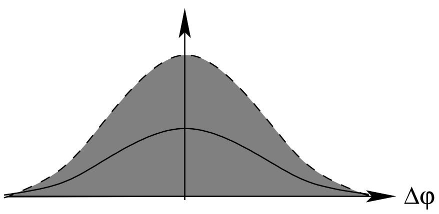


Durchtritt durch den Schlitz, Reflexion an der Schlitzwand

Zahlenbeispiel:

$$\left.\begin{array}{l} m = 1\text{g} \\ v = 200\text{m/s} \end{array}\right\} \quad \lambda = 3 \cdot 10^{-33}\text{m}$$

Erwartung nach „Alltagsvorstellung": gleichmäßige Verteilung , $P = P_1 + P_2$. Dies wird auch experimentell beobachtet, aber aus einem durchaus nicht trivialen Grund:

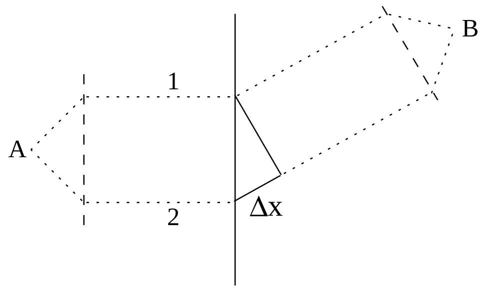


Die Schrotkugeln verhalten sich nur deshalb wie „klassische" Teilchen, weil ihre de-Broglie Wellenlänge gegenüber realisierbaren Schlitzen lächerlich klein ist. Die Interferenz ist im Prinzip da, man misst jedoch nur den Mittelwert über die Interferenzstruktur (s. Grenzfall $\lambda \ll d$ in Kap. 2.33)
Die „klassische" Betrachtungsweise, d.h. Teilchen-Vorstellung ist immer dann anwendbar, wenn die de-Broglie Wellenlänge λ klein ist gegenüber den Abmessungen der Hindernisse.

Ergänzung: Doppelspalt im Magnetfeld

I. Vorbemerkung für den Fall $\vec{B} = 0$

Warum ergibt sich aus dem Experiment über $\lambda = h/mv$ trotz fehlender Eichinvarianz von λ die korrekte Beugungsfigur, d.h. warum kann $\vec{A} = 0$ angenommen werden?



Phasendifferenz zwischen 1 und 2 für den gesamten Weg von A nach B:

$$\Delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = \int_{A \atop (1)}^{B} \vec{k}_1\, d\vec{r} - \int_{A \atop (2)}^{B} \vec{k}_2\, d\vec{r}$$

Mit $\hbar\vec{k} = \vec{p} + e\vec{A}$
$$\Delta\varphi = \frac{1}{\hbar}\left(\int_{A \atop (1)}^{B} \vec{p}_1\, d\vec{r} - \int_{A \atop (2)}^{B} \vec{p}_2\, d\vec{r}\right) + \frac{e}{\hbar}\left(\int_{A \atop (1)}^{B} \vec{A}\, d\vec{r} - \int_{A \atop (2)}^{B} \vec{A}\, d\vec{r}\right)$$

Wegen $|\vec{p}_1| = |\vec{p}_2|$
$$\Delta\varphi = \frac{1}{\hbar}(p\Delta x) + \frac{e}{\hbar}\oint \vec{A}\, d\vec{r}$$

Dabei ist
$$\oint \vec{A}\, d\vec{r} = \int \nabla \times \vec{A}\, d\vec{f} = \int \vec{B}\, d\vec{f} = \Phi_m$$
(gesamter, vom geschlossenen Weg A $\rightarrow$ B eingeschlossener magnetischer Fluss)

Für $\vec{A} \neq 0$, jedoch $\nabla \times \vec{A} = \vec{B} = 0$ ist $\oint \vec{A}\, dr = 0$, d.h.

1. $\Delta\varphi$ ist nur durch $\hbar k = \vec{p}$ allein bestimmt; $\vec{A} \neq 0$ wirkt sich garnicht aus.
2. Die Wellenlänge selbst ist wegen $\hbar\vec{k} = \vec{p} + e\vec{A}$ zwar von $\vec{A}$ abhängig; die relevante Wellenlänge im Sinne der Rechenvorschrift ist dennoch nur $\lambda = h/mv$, solange $\vec{B} = 0$.

II. Fall $\vec{B} \neq 0$: Aharonov-Bohm-Effekt

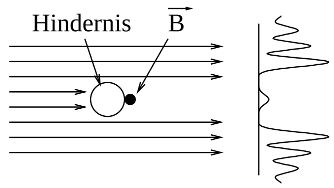
Für $\vec{B} \neq 0$ ergibt sich eine zusätzliche Phasenverschiebung

$$\Delta\varphi_B = \frac{e}{\hbar}\int \vec{B}\, d\vec{f} = \frac{e}{\hbar}\Phi_m$$

d.h. das Interferenzmuster verschiebt sich proportional $\vec{B}$ relativ zum Fall $\vec{B} = 0$.

(Literatur: Döring, „Atomphysik und Quantenmechanik")

Experiment Boersch et al., Z. Phys. 165 (1961) 79



Beugung von Elektronen an einem Hindernis:
Faden mit 2 μm $\varnothing$; $\vec{B}$-Feld in Permalloy-Schicht (0.5 μm $\varnothing$; Schicht $\sim$0.2 μm; 100 mT) *im Schatten des Hindernisses.*
Phasenverschiebung $\Delta\varphi_B \approx 2.3$ durch Einschalten von Φ_m.

Elektronenwelle sieht das Feld wegen der extremen Lokalisierung nicht direkt! Dennoch Verschiebung des Interferenzmusters! $\Delta\varphi_B$ ist unabhängig von der Geometrie, nur abhängig von Φ_m.

Statistische Interpretation von Materiewellen

„Teilchen" mit $m_0 \neq 0$ unterliegen der gleichen statistischen Betrachtungsweise wie bei Quanten diskutiert (s. 2.34).

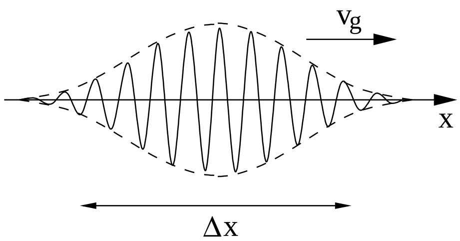
falsch zu sagen: Teilchen, mit denen ein Wellenvorgang verknüpft ist (Welle im klassischen Sinn, irgend etwas „schwingt")

richtig zu sagen: Ein „Teilchen" hat sowohl Teilchen- als auch Wellennatur und zeigt das betreffende Gesicht je nach Fragestellung. Sein Verhalten muss durch eine komplexe Amplitude ψ beschrieben werden, die Wahrscheinlichkleitsamplitude; observabel ist die Wahrscheinlichkeitsdichte $P = |\psi|^2$. Die Interferenzfähigkeit ist in der Superposition verschiedener Alternativen ψ_i zum gleichen Ereignis enthalten.

2.5 Wellengruppen und Wellenpakete

Betrachte die Propagation eines freien Teilchens, z.B. Elektron.

Problem: Beschreibung durch streng monochromatische Welle $\psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$, dies bedeutet $P = |\psi\psi^*| = A^2$ ist unabhängig von x und $t \Rightarrow$ das Teilchen ist überhaupt nicht lokalisiert! (Vorwegnahme der Unschärferelation, beliebig scharfer Impuls $\Leftrightarrow$ völlige Unkenntnis des Ortes). Das ist ein Widerspruch zum Experiment: ein Elektron ist lokalisierbar. Beispiele: Verfolgung seiner Bahn durch Ionisation etc.



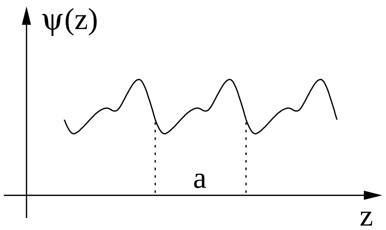
Ein auf Δx lokalisiertes Teilchen bedeutet ein *Wellenpaket* mit Ausdehnung Δx, welches mit der Gruppengeschwindigkeit $\vec{v_g}$ propagiert. Dies ist nur erreichbar durch Überlagerung eines Kontinuums von Wellenzahlen k bzw. p.
$\Rightarrow$ „Ausschmierung": $\Delta x \leftrightarrow \Delta p(\Delta k)$

2.5.1 Mathematische Ergänzung: Fourierreihen und Fourierintegrale

Fouriertheorem:

> Alle *periodischen Funktionen* können als Reihe trigonometrischer Funktionen ausgedrückt werden (bzw. der komplexen Analoga) $\Rightarrow$ *diskretes* Spektrum von Beiträgen. Ebenso können alle *nichtperiodischen* Funktionen als Integrale über trigonometrische Funktionen dargestellt werden $\Rightarrow$ *kontinuierliches* Spektrum von Beiträgen.

I. Periodische Funktionen und Fourierreihen



Gegeben sei eine periodische Funktionen $\psi(z)$. Die Periode sei a, d.h. $\psi(z+a) = \psi(z)$ für alle z („Periodizitätsbedingung").

Die Funktion $\psi(z)$ lässt sich dann darstellen als Reihe:

$$\boxed{\psi(z) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(A_n \cos\left(\frac{n2\pi z}{a}\right) + B_n \sin\left(\frac{n2\pi z}{a}\right)\right)}$$

Mit *„Fourieranalyse"* bezeichnet man das Auffinden der Koeffizienten A_n, B_n, experimentell oder theoretisch. *„Fouriersynthese"* bezeichnet die Konstruktion von $\psi(z)$ aus einzelnen Beiträgen mit den Koeffizienten A_n, B_n.

Verwende zur Abkürzung der folgenden Rechnung:

$$\frac{2\pi z}{a} = \alpha, \quad \cos(n\alpha) = \frac{e^{in\alpha} + e^{-in\alpha}}{2}, \quad \sin(n\alpha) = \frac{e^{in\alpha} - e^{-in\alpha}}{2}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \psi(z) &= A_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\left(\frac{A_n}{2} + \frac{B_n}{2}\right)e^{in\alpha} + \left(\frac{A_n}{2} - \frac{B_n}{2}\right)e^{-in\alpha}\right) \\
\Rightarrow \quad \psi(z) &= \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} C_n e^{in\alpha}, \text{ mit } C_n = \left(\frac{A_n}{2} + \frac{B_n}{2i}\right) \text{ und } C_{-n} = \left(\frac{A_n}{2} - \frac{B_n}{2i}\right)
\end{aligned}$$

Multiplikation beider Seiten mit $e^{im\alpha}$ und anschließender Integration ergibt (das Integral kann in die Summe hineingezogen werden):

$$\Rightarrow \quad \int_{-a/2}^{+a/2} \psi(z)\, e^{-\frac{im2\pi z}{a}}\, dz = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} C_n \int_{-a/2}^{+a/2} e^{i(n-m)\frac{2\pi z}{a}}\, dz$$

Auf der rechten Seite stehen Beiträge der Gestalt:

$$\int_{-a/2}^{+a/2} e^{i(n-m)\frac{2\pi z}{a}}\, dz = \frac{a}{\pi}\frac{\sin(2\pi(n-m))}{n-m} = \begin{cases} a & : \; n = m \\ 0 & : \; n \neq m \end{cases}$$

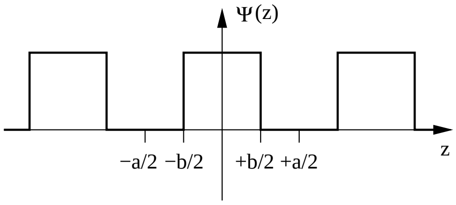
mit $m = n$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\begin{aligned}
\psi(z) &= \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} C_n e^{in\frac{2\pi z}{a}} && \text{(Reihe)} \\
C_n &= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \psi(z)\, e^{-in\frac{2\pi z}{a}}\, dz && \text{(Koeffizienten)}
\end{aligned}}$$

Dabei kann z bedeuten:

- Ortskoordinate (z.B. x)
- Zeitkoordinate (z.B. t)

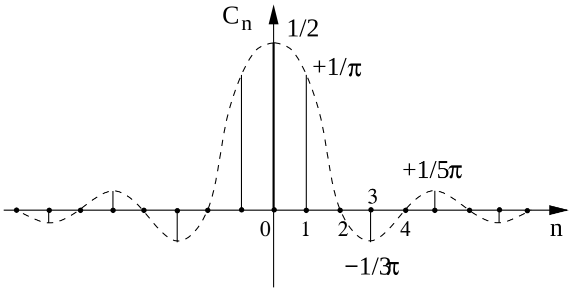
Beispiel: **Rechteckschwingung** (in Raum oder Zeit)



$$\begin{aligned} \psi(z) &= 1 && \text{für} \quad -b/2 < z < +b/2 \\ \psi(z) &= 0 && \text{für} \quad b/2 > |z| < a/2 \\ \psi(z+a) &= \psi(z) && \text{für} \quad \text{alle } z \end{aligned}$$

Fourierkoeffizienten:

$$\begin{aligned} C_n &= \frac{1}{n\pi}\sin\left(\frac{n\pi b}{a}\right), \quad C_n = C_{-n}, \quad n \neq 0 \\ A_n &= C_n + C_{-n} = \frac{2}{n\pi}\sin\left(\frac{n\pi b}{a}\right) \\ B_n &= i\,(C_n - C_{-n}) = 0 \\ A_0 &= C_0 = \frac{b}{a} \quad (\Rightarrow \text{Mittelwert der Funktion}) \end{aligned}$$



Demonstration für numerisches Beispiel $b/a = 1/2$

Spektrum der Fourierkoeffizienten:

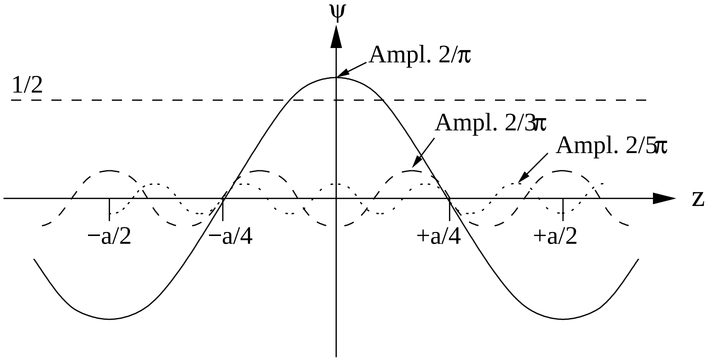
$$C_n = \frac{1}{n\pi}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

Fourierreihe:

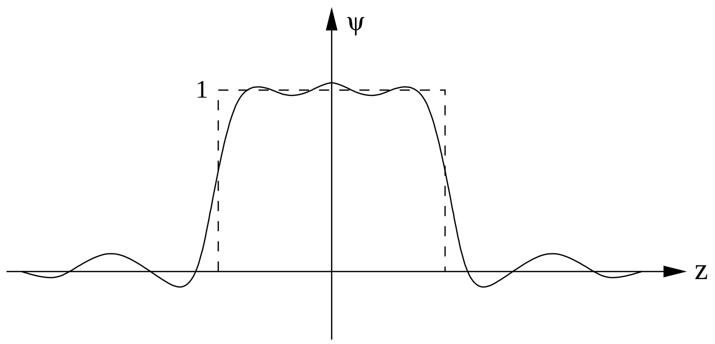
$\psi(z)$ ist eine gerade Funktion, es gibt daher nur cos-Beiträge

$$\psi(z) = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi}\cos\left(2\frac{\pi}{a}z\right) - \frac{2}{3\pi}\cos\left(6\frac{\pi}{a}z\right) + \frac{2}{5\pi}\cos\left(10\frac{\pi}{a}z\right) - \ldots$$

Die Beiträge im Einzelnen:



Die synthetisierte „Rechteck"-Schwingung bis $n = 5$:



♠ Experimentelle Vorführung (Videobild der Fourieranalyse und synchroner Ton)

a) Fourieranalyse und Fouriersynthese einer zeitlichen Sägezahn-Schwingung bis $n = 20$

b) Psychoakustische Diskussion der Grundtonerkennung bei fehlenden niedrigen Harmonischen: „Gehirn rekonstruiert unvollständige harmonische Reihe".

(⇒ Hinweis Vorlesung „Musik und Physik" von H.G. Dosch und H.J. Specht)

II. Aperiodische Funktionen und Fourierintegrale

Grenzübergang im obigen Beispiel: b festhalten, $a \to \infty$; ⇒ sehr viele Glieder, aus Summe wird Integral (s. Literatur). Resultat:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi\,(z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi\,(k)\, e^{ikz}\, dk \\ \phi\,(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi\,(z)\, e^{-ikz}\, dz \end{aligned}}$$

„Fourier'sches Integraltheorem"

Diese Gleichungen enthalten nun eine vollständige Symmetrie zwischen $\psi(z)$ und $\phi(k)$. Die Funktion $\phi(k)$ nennt man die *Fouriertransformierte* von $\psi(z)$. $\phi(k)$ ist eine kontinuierliche Amplitudenfunktion, die an die Stelle der diskreten C_n tritt. Entsprechend ist die Funktion $\psi(z)$ aus e^{ikz} mit kontinuierlichen Werten von k zusammengesetzt; sie ist also – in Umkehrung – die *Fouriertransformierte* von $\phi(k)$.

Hauptanwendungen:

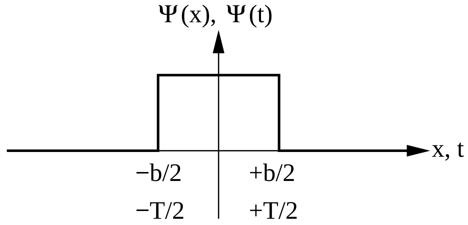
1. Beziehung Ort $x \leftrightarrow$ Wellenzahl k (z.B. in Optik):

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx}\, dk \\ \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k) e^{-ikx}\, dx \end{aligned}$$

2. Beziehung Zeit $t \leftrightarrow$ Frequenz ω (z.B. in Elektrotechnik):

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\omega) e^{i\omega t}\, d\omega \\ \phi(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(t) e^{-i\omega t}\, dt \end{aligned}$$

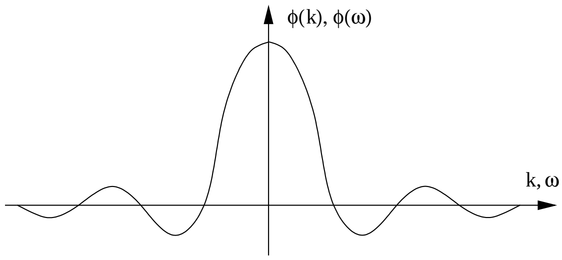
Instruktives Beispiel: **Örtlicher oder zeitlicher Rechteck-Impuls**



$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & : \quad |x| < b/2 \\ 0 & : \quad |x| > b/2 \end{cases}$$

$$\psi(t) = \begin{cases} 1 & : \quad |t| < T/2 \\ 0 & : \quad |t| > T/2 \end{cases}$$

Fouriertransformierte:



$$\phi(k) = \frac{b}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(kb/2)}{(kb)/2}$$

$$\phi(\omega) = \frac{T}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(\omega T/2)}{(\omega T)/2}$$

Im Unterschied zum obigen Beispiel der periodischen Rechteckschwingung enthält die spektrale Verteilung nun ein Kontinuum von Beiträgen in k bzw. ω.

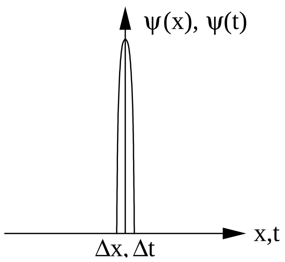
Anwendungen

räumlich: Beugungsbild eines Einzelspalts als (Fouriertransformierte)^2 der Spaltfunktion
(in diesem Sinne “Linse bzw. deren Einfassung als Fouriertransformer”)

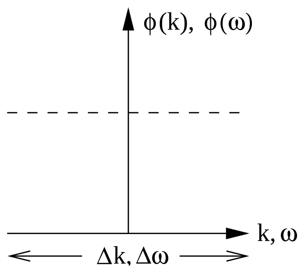
zeitlich: Impulse und notwendige Bandbreite in HF-Technik (s.u.)

Grenzfälle

1. $\Delta x = b \to 0$ oder $\Delta t = T \to 0$:

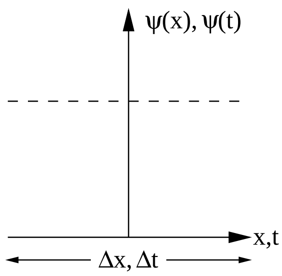


$\Leftrightarrow$

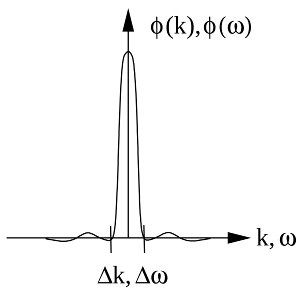


Das Spektrum $\phi(k)$ bzw. $\phi(\omega)$ ist konstant, alle Frequenzen sind mit gleicher Wahrscheinlichkeit, bis ins Unendliche, beteiligt. Die „Bandbreite” ist sehr groß.

2. Umgekehrter Fall: $\Delta x \to \infty$ oder $\Delta t \to \infty$:

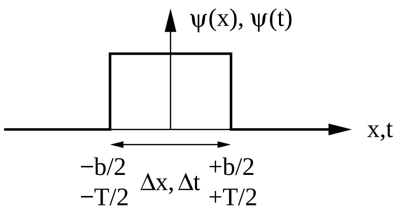


$\Leftrightarrow$

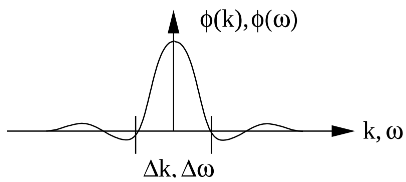


Das Spektrum nimmt als Grenzfall die Form einer Deltafunktion an. Es ist nur die Frequenz $\omega = 0$ beteiligt, d.h. es ist kein periodischer Vorgang zur Beschreibung mehr nötig, die „Bandbreite" ist sehr klein.

Zusammenhang zwischen Orts- bzw. Zeitbreiten $\Delta x, \Delta t$ und Bandbreiten $\Delta k, \Delta\omega$:



$\Leftrightarrow$



Wähle, etwas willkürlich, die 1. Nullstelle in $\phi(k)/\phi(\omega)$ als Maß für die spektralen Breiten Δk bzw. $\Delta\omega$: mit $\phi(k)$ bzw. $\phi(\omega) = 0$ für $kb/2$ bzw. $\omega T/2 = \pm\pi$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\begin{array}{c} \Delta k \cdot \Delta x \geq 2\pi \\ \Delta\omega \cdot \Delta t \geq 2\pi \end{array}}$$

„Klassische Unschärferelationen"

Die notwendigen Bandbreiten in k bzw. ω zur Beschreibung von Impulsen in Ort bzw. Zeit sind umgekehrt proportional zur Breite der Impulse.

Die Abschätzung gilt allgemein. Durch die Wahl falscher Phasen eines Frequenzgemisches können die Breiten auch größer werden (daher das $\geq 2\pi$), aber nie kleiner.

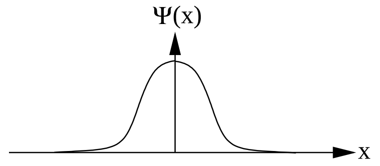
Beispiel aus HF-Technik: **Bandbreite des Fernsehens**

Benutze mit $\omega = 2\pi\nu$: $\quad \Delta\nu \cdot \Delta t \approx 1$

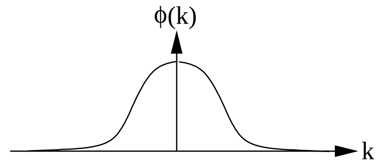
Schirmbild 500 Linien, 500 Punkte pro Linie: $\Rightarrow$ $2.5 \cdot 10^5$ Punkte pro Bild. Bei 25 Bildern pro Sekunde: $\Rightarrow$ $6.25 \cdot 10^6$ Punkte pro Sekunde, die übertragen werden müssen, d.h. $\Delta t = 0.16$ μs pro Punkt. Die notwendige Bildqualität erfordert daher eine HF-Bandbreite von mindestens $\Delta\nu = 1/\Delta t \approx 6.25$MHz. Dies ist im professionellen Bereich gewährleistet. Im Consumerbereich werden Kompromisse eingegangen (z.B. Bandbreite des verbreiteten Videorecorder-Systems VHS $\sim$3 MHz).

Weitere (klassische) Beispiele zu Fourierintegralen

1. Gaußimpuls



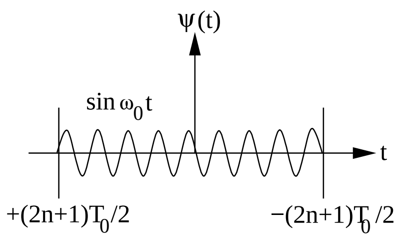
$\Leftrightarrow$

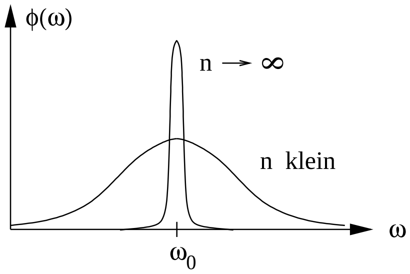


$\psi(x) \propto e^{-x^2/(2b^2)}$ $\qquad$ $\phi(k) \propto e^{-k^2b^2/2}$

Eine Gaußverteilung geht also durch Fouriertransformation wieder in eine Gaußverteilung über! (s. auch Kap. 2.8, Unschärferelation)

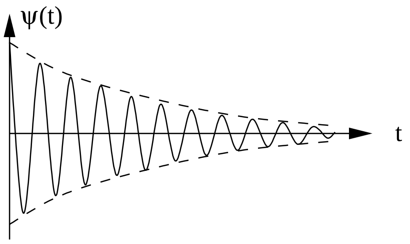
2. Abgeschnittener Wellenzug





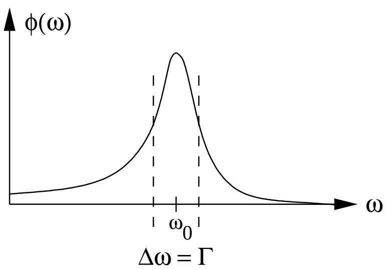
Die Fouriertransformierte ist um die Eigenfrequenz ω_0 herum zentriert und wird umso schmaler, je größer die Anzahl n der beitragenden Perioden ist.

3. Gedämpfte Schwingung



$$\psi(t) \propto e^{-\frac{\Gamma t}{2}} \cos(\omega_0 t)$$

$\Gamma = 1/\tau$; τ bezeichnet die „Dämpfungskonstante" oder „mittlere Lebensdauer"

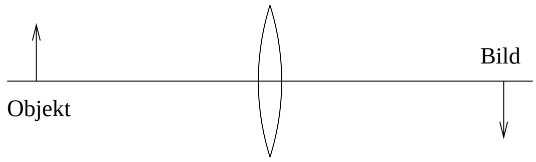


$$\phi(\omega \propto \frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \qquad \text{„Lorentzform"}$$

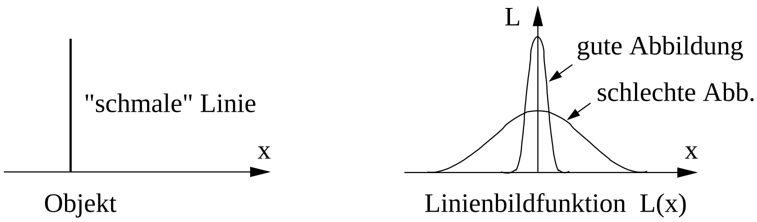
$\phi(\omega)$ hat die gleiche Form wie die Amplitude $A(\omega)$ bei der erzwungenen Schwingung („Resonanzkurve").
Auch hier gilt wieder $\Delta\omega = \Gamma = 1/\tau$, d.h.
Frequenzintervall $\cdot$ Lebensdauer $=$ const. ≈ 1

4. Kontrast-Transferfunktion (s. z.B. Haferkorn, "Optik")

Quantitatives Maß für die Bildqualität optischer Abbildungen



In Strahlrichtung gesehen: das abzubildende Objekt sei eine Linie.



Def: (normierte) Optische Übertragungsfunktion (Transferfunktion TF)

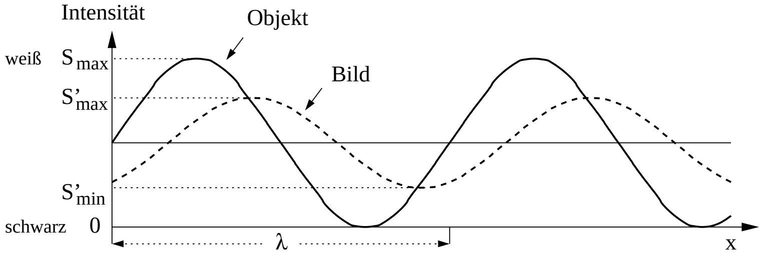
$$\boxed{OTF(k) \propto \int_{-\infty}^{\infty} L(x) e^{-ikx} \mathrm{d}x}$$

Fouriertransformierte der Linienbildfunktion

Realteil	(MTF oder KTF):	Modulations-, Kontrast-Transferfunktion
Imaginärteil	(PTF):	Phasen-Transferfunktion

Veranschaulichung:

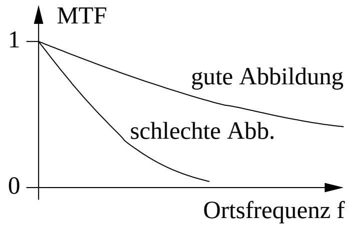
Benutze periodische Objektstruktur (sinusförmige Modulation "Sinusgitter")



Objektkontrast $\quad K = \dfrac{S_{max} - S_{min}}{S_{max} - S_{min}} \quad K = 1$

Bildkontrast $\quad K' = \dfrac{S'_{max} - S'_{min}}{S_{max} - S_{min}} \quad 0 \leq K \leq 1$

$$\boxed{MTF = KTF = \frac{K'}{K}}$$



Ortsfrequenz f: Kehrwert der Periodenlänge $1/\lambda$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi f$$

auch oft angegeben in [LP/mm] oder [Perioden/mm].

Anwendungen: **Qualitätsbestimmung**

a) optische Elemente wie Objektive
b) optische Systeme: $KTF = \Pi_{i=1}^{n} KTF_i$ (z.B. Objektiv-Film-Projektion)
c) optisches "Filtern"

♠ Hinweis Bild: Haferkorn, "Optik", Fig. 4.196a (MTF eines photographischen Objektivs für verschiedene Blendenzahlen)

2.5.2 Wellengruppen und Wellenpakete

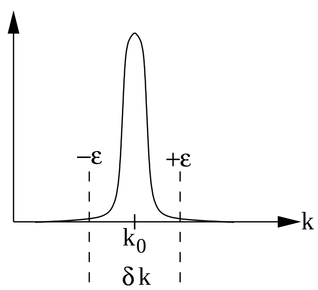
Bisher wurden nur Vorgänge im Raum oder in der Zeit betrachtet, nicht beides gleichzeitig. Erweiterung des Konzepts auf Wellen: Ersatz von z durch $x - v_{\mathrm{ph}}t$ im Ausdruck für $\psi(z)$.

$$\Rightarrow \qquad \psi(x,t) = A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ik(x-v_{\mathrm{ph}}t)}\, dk$$

bzw. mit $\omega = v_{\mathrm{ph}}k$:
$$\psi(x,t) = A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

Der Anteil $e^{i(kx-\omega t)}$ beschreibt wie üblich eine ebene Welle der Phasengeschwindigkeit v_{ph}. Die Funktion $\psi(x,t)$ bedeutet eine Überlagerung von vielen Teilwellen mit verschiedenen k, definiert durch die Verteilung $\phi(k)$. Daher ist $\psi(x,t)$ keine Funktion von $(kx - \omega t)$ allein mehr, da $v_{\mathrm{ph}} = v_{\mathrm{ph}}(\omega)$ oder $v_{\mathrm{ph}}(k)$, also Dispersion vorliegt (s.u.).

I. Wellenpakete:



Ein Wellenpaket wird erzeugt durch eine Überlagerung von Teilwellen mit nur wenig verschiedenem k, also eine „fast monochromatische" Welle mit $\delta k \ll k_0$.

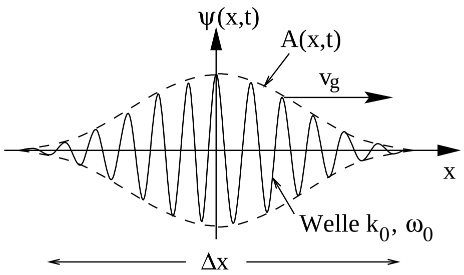
$$\psi(x,t) = A_0 \int_{k_0-\epsilon}^{k_0+\epsilon} \phi(k) e^{i\,(kx-\omega t)}\, dk$$

mit

$$k = k_0 + \delta k, \qquad \delta k \ll k_0$$
$$\omega = \omega_0 + \delta\omega, \qquad \delta\omega \ll \omega_0$$

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= e^{i\,(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot \underbrace{A_0 \cdot \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \phi(k) e^{i\,(\delta k x - \delta\omega t)}\, d\,(\delta k)}_{A(x,t)} \\
\psi(x,t) &= A(x,t) e^{i\,(k_0 x - \omega_0 t)}
\end{aligned}$$

$A(x,t)$ ist die sich langsam verändernde Amplitude der Welle: Weil δk und $\delta\omega$ klein sind, sind große Änderungen von x und t nötig, um $A(x,t)$ zu ändern. Die Überlagerung vieler Wellen mit Wellenzahlen um k_0 herum erzeugt also ein Wellenpaket, in dem $A(x,t)$ die ursprüngliche Welle k_0 als Einhüllende moduliert.



Eine konstante Phase der Einhüllenden entspricht

$$\delta k x - \delta\omega t = const, \quad \text{z.B.} = 0$$

$\Rightarrow$ Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets, d.h. die Geschwindigkeit der Einhüllenden ist somit

$$\frac{x}{t} = v_g = \frac{\delta\omega}{\delta k} = \frac{d\omega}{dk}$$

Unter welchen Bedingungen ist $v_g = v_{\text{ph}}$?

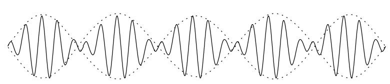
$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\,(v_{\text{ph}} k)}{dk} = v_{\text{ph}} + k\frac{dv_{\text{ph}}}{dk} = v_{\text{ph}} - \lambda\frac{dv_{\text{ph}}}{d\lambda}$$

$v_{\text{ph}} = v_g$ gilt also nur für $dv_{\text{ph}}/dk = 0$, d.h. für dispersionsfreie Wellen.

I. Beispiele aus der klassischen Physik

1) $\boxed{v_g = v_{\text{ph}}}$

(a) Elektromagnetische Wellen im Vakuum:



$$\omega = ck$$

Eine mögliche Modulation und damit die Information propagiert ebenfalls mit c.

(b) Schallwellen im hörbaren Bereich:

$$\omega = v_s k$$

(c) Transversalwellen auf einer idealen schwingenden Saite (s. 2.63):

$$\omega = \sqrt{\frac{T_0}{\rho_0}}$$

T_0 ist dabei die Spannung der Saite, ρ_0 die Massenbelegungsdichte (Masse/Länge).

2) $\boxed{v_g \neq v_{\mathrm{ph}}}$

(a) EM-Wellen in Materie, z.B. in der Ionosphäre:

$$\omega^2 = \omega_p^2 + c^2 k^2$$

$\nu_p = \omega_p / 2\pi \approx 20$ MHz ist die Plasmafrequenz in der Ionosphäre (die ein Plasma darstellt, s. Berkeley III).

(b) Transversalwellen einer realen schwingenden Saite (s. 2.63).

(c) Oberflächenwellen auf Wasser (s. z.B. Berkeley III):

Rückstellkräfte:	a) Gravitation	dominant für $\lambda >$ einige cm
	b) Oberflächenspannung	dominant für $\lambda <$ einige mm

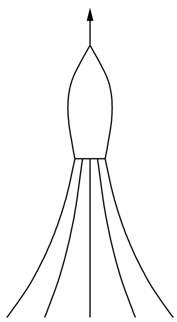
In tiefem Wasser ($\lambda \ll h$) gilt

$$\omega^2 = gk + T/\rho k^3$$

ρ ist dabei die Dichte, T die Oberflächenspannung.

	λ		ν [Hz]	v_{ph} [cm/s]	v_g/v_{ph}
	1.0	mm	675	68	1.50
$\Rightarrow$	1.7	cm	14	25	1.00
	16	cm	3	50	0.50
	32	m	0.22	710	0.50

Anwendungsbeispiel: Heckwellen eines Schiffes



Wellen mit großer Wellenlänge laufen schneller. Wellenpakete fließen als Funktion der Zeit auseinander.

II. de Broglie-Wellenpakete

Direkte Übernahme des obigen Resultats (s. Vorseite) für ein einzelnes Wellenpaket mit $\Delta k \ll k_0$.

Eigenschaften:

1. Teilchen entspricht Wellenpaket; die Geschwindigkeit der Einhüllenden $A(x,t)$, d.h. die Gruppengeschwindigkeit v_g ist gleich der Geschwindigkeit v im Teilchenbild (s. 2.42).

2. Paketbreiten Δx im Ortsraum und Δk im Impulsraum sind invers miteinander verknüpft (s. Diskussion des Rechteckpulses in 2.51):

$$\Delta x \Delta k \geq 2\pi$$

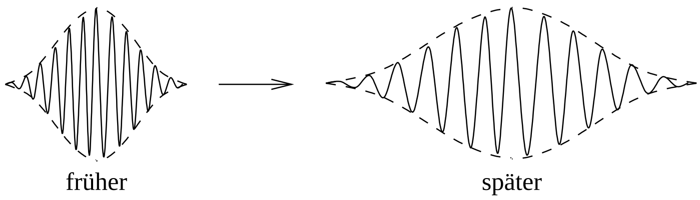
Hier deutet sich direkt die Unschärferelation an (s. 2.8).

3. Mit Bereich Δk, d.h. mit einem Band um k_0 herum ist ein entsprechendes Frequenzband $\Delta\omega$ verknüpft:

$$\Delta k = \left(\frac{dk}{d\omega}\right)_0 \Delta\omega = \frac{\Delta\omega}{v_g}$$

4. Auch im Vakuum herrscht Dispersion, d.h. $v_g \neq v_{\mathrm{ph}}$. Das Wellenpaket fließt aufgrund der Dispersion mit der Zeit auseinander (analog zu den Heckwellen eines Schiffs). Dem Band Δk entspricht ein Band $\Delta v_g = \Delta v$.

$$\begin{aligned} \Delta v_g &= \frac{dv_g}{dk}\Delta k = \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_0 \Delta k = \frac{v_g}{k}\Delta k \\ \Delta x &= (\Delta x)_0 + \Delta v_g t \end{aligned}$$



Der Grund ist einleuchtend: Die Phasenbeziehungen der einzelnen Komponenten stimmen nach einiger Zeit aufgrund der Dispersion nicht mehr überein, das Wellenpaket verbreitert sich.

2.6 Stehende Wellen

Zur Erinnerung: klassische Wellengleichung im eindimensionalen Fall

$$\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v_{\mathrm{ph}}^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2}$$

Bisher: Diskussion von Wanderwellen als Lösung der Wellengleichung
Jetzt: Diskusssion von stehenden Wellen als Lösung der Wellengleichung

Definition „Stehende Wellen": „Normalschwingungen" eines Systems mit sehr vielen Freiheitsgraden (Pendel: 1 Freiheitsgrad, 2 gekoppelte Pendel 2 Freiheitsgrade, Saite: $N \approx 10^{20}$Atome)

Eine wesentliche Eigenschaft stehender Wellen ist, dass Zeit- und Ortsabhängigkeit faktorisieren: die Zeitabhängigkeit ist unabhängig von der Ortsabhängigkeit.

$$\psi(x,t) = f(x) \cdot g(t)$$

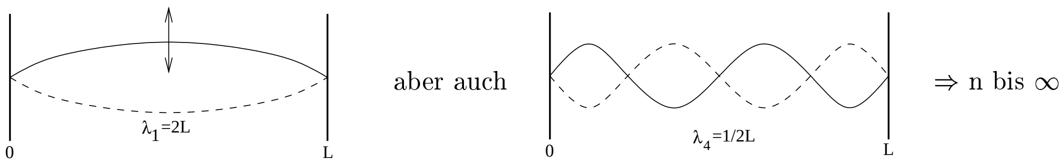
Die „Wellenknoten" und „Wellenbäuche" sind also im Gegensatz zu Wanderwellen ortsfest. Stehende Wellen lassen sich auch durch Überlagerung von hin- und rücklaufenden Wanderwellen beschreiben. Im Fall ebener harmonischer Wellen gilt z.B.

$$\psi = \psi_0 \sin(kx - \omega t) + \psi_0 \sin(kx + \omega t)$$

Eine allgemeine Lösung der DGL für den Produktansatz und harmonische Wellen ist:

$$\psi(x,t) = (A\sin(kx) + B\cos(kx)) \cdot e^{i(\omega t + \varphi)}$$

2.6.1 Stehende Wellen einer beidseitig eingespannten Saite



Einschränkung der möglichen Lösungen durch *Randbedingungen*

$$\left.\begin{array}{ll}\psi(x,t)=0 & \text{für } x=0\\ \psi(x,t)=0 & \text{für } x=L\end{array}\right\}\quad \text{für alle } t \quad \text{(die Saite ist an beiden Enden eingespannt)}$$

$$\begin{array}{lllll} x=0 & \Rightarrow & B=0 & & \\ x=L & \Rightarrow & \sin(kL)=0 & \Rightarrow & k_nL=\pi,\ 2\pi,\ \ldots,\ n\pi \end{array}$$

$$\boxed{\lambda_n=\frac{2L}{n}}\qquad n=1,2,3,\ldots\ (n=0 \text{ sinnlos})$$

Man nennt die n verschiedenen möglichen Schwingungen die „Normalmoden" der schwingenden Saite. Die Lösung mit $n=1$ nennt man die „Grundwelle", alle anderen „Oberwellen". Die allgemeinste Lösung ist die Superposition aller Normalmoden:

$$\psi(x,t)=\sum_n A_n\sin k_nx\cos(\omega_nt+\varphi_n)$$

Dies lässt sich als Fourierreihe ansehen; beliebige Wellenformen sind also automatisch enthalten. Die *Oberwellen* im k-Raum sind prinzipiell *harmonisch*, d.h. $k_n=n\cdot k_1$.

Wie groß sind die den einzelnen k_n zugeordneten ω_n? Akustisch sind die ω_n relevant (durch lokale Anregung von Schallwellen im Takte der ω_n), nicht die k_n!

1. **Ideale Saite:** Die Rückstellkraft ist nur von der Spannung (Kraft/Fläche) T_0 abhängig. Daraus folgt die

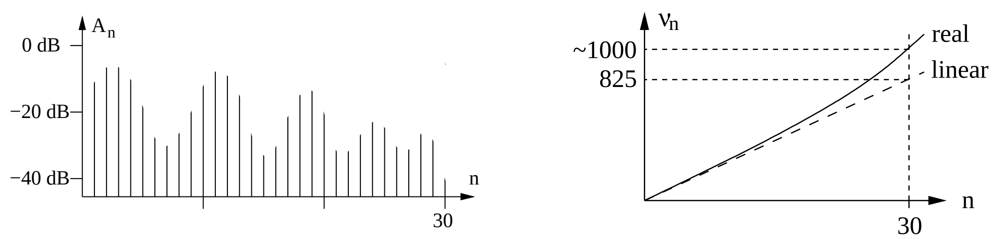
   Dispersionsrelation $$\omega^2=\frac{T_0}{\rho_0}k^2\qquad ,$$

   also ω linear in k. Die Phasengeschwindigkeit ist $v_0=\sqrt{T_0/\rho_0}$; die wahrgenommene Tonhöhe steigt mit $\sqrt{T_0}$. Die *Schwingungsfrequenzen* sind *harmonisch*, $\omega_n=n\cdot\omega_1$.

2. **Reale Saite**: zusätzliche Rückstellkraft durch die Steifigkeit der Saite; diese ist umso wichtiger, je höher die Schwingungsmode ist.

   Dispersionsrelation $$\omega^2=\frac{T_0}{\rho_0}k^2+\alpha k^4,$$

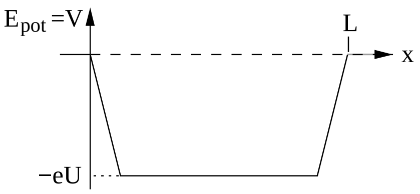
   also ω *nicht* linear in k! Die *Schwingungsfrequenzen* sind bei höherem n zunehmend *nicht harmonisch*, $\omega_n\neq n\omega_1$. Beispiel Klavier: niedrigster Ton ist das ${}_2$A mit einer Grundschwingung bei 27.5 Hz. Die 30. Oberschwingung sollte 825 Hz haben, hat aber ≈1000 Hz!

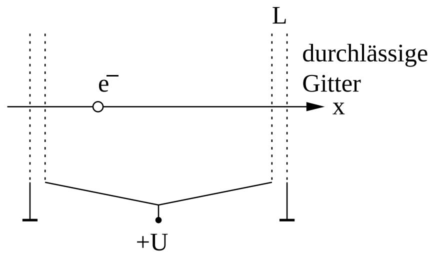


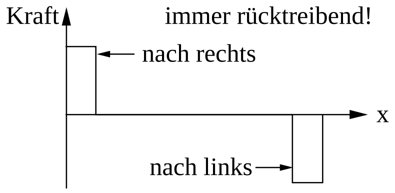
Fourierkoeffizienten A_n eines Klaviertons von $\nu_1=27.5$ Hz

2.6.2 Stehende de Broglie-Wellen

Beispiel: Elektron in einem „Potentialtopf" $E_{\text{pot}} = V = -eU$

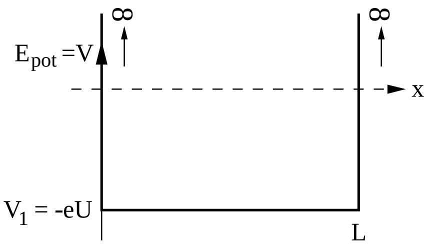






$$\text{Kraft} \quad \vec{F} = -\nabla V = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

Das Teilchen ist gefangen, an den Wänden wird es reflektiert, dazwischen ist es kräftefrei.



Idealisierung: Wände des Potentialtopfs unendlich hoch und senkrecht, d.h. Rückstellkraft an den Wänden unendlich. Das Teilchen ist in $(0, L)$ gefangen; $P = \psi\psi^* = |\psi|^2 = 0$ außerhalb.

Nichtrelativistische Energie-Impulsbeziehung:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V, \quad V = const. \quad \text{innerhalb des Topfes (unabh. von x)}$$

Klassisch könnte das Teilchen alle möglichen kinetischen Energien haben (Kontinuum).

Quantenmechanik: Die Wellennatur ist jetzt allentscheidend:

$$\boxed{\textit{nur Normalmoden der de Broglie-Wellen möglich, d.h. stehende Wellen}}$$

Die möglichen Lösungen sind wie oben eingeschränkt auf

$$\psi(x,t) = A \sin kx e^{i\omega t}$$

wobei ψ jetzt als *Wahrscheinlichkeitsamplitude* anzusehen ist.

Die Wellenfunktion ψ ist kontinuierlich in x; *Randbedingung* wie vorher

$$\psi(x,t) = 0 \quad \text{für } x = L \quad \Rightarrow \quad \sin kL = 0, \quad \boxed{k_n L = n\pi} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

n vorher: Nummer der Harmonischen oder Mode

$$\boxed{n \text{ hier: „Quantenzahl"}}$$

n = Nummer der Normalmode der entsprechenden de Broglie-Welle

Lösungen:

„Normierung" = Bestimmung von A:

1 Elektron
$$1 = \int_0^L \psi\psi^* dx = |A|^2 \int_0^L \sin^2 k_n x\, dx = \frac{1}{2}|A|^2 L$$

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Gesamtlösung
$$\boxed{\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x e^{i(\omega_n t - \alpha)}}$$

Erinnere: nur $\psi\psi^*$ ist eine Observable; $\psi\psi^*$ ist zeitunabhängig, und die willkürliche Phase α fällt heraus.

Wie groß sind im Fall der de Broglie-Welle die den einzelnen k_n zugeordneten Frequenzen ω_n?

Dispersionsrelation:

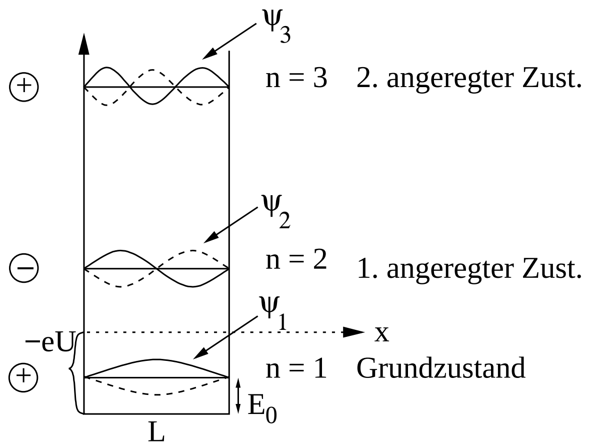
$$\hbar\omega_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} + V$$

⇒ „Obertöne" sind wegen quadratischer Dispersionsrelation *„sehr anharmonisch"*.

Mit $E_n = \hbar\omega_n$ (de Broglie)
$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 - eU} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

($n = 0$ sinnlos, $\psi\psi^* \equiv 0$). Erinnere de Broglie-Wellen: Energie von ω, nicht von Amplitude ψ abhängig.

Folgerungen und Diskussion



Die Ordinate wird hier gleichzeitig für die Darstellung der E_n und der ψ_n benutzt.

1. Die möglichen Energiewerte sind *diskret*, nicht kontinuierlich.

   $\boxed{\text{„Quantelung" der Energiezustände}}$

   numeriert und bestimmt durch n

2. $P = \psi\psi^* = \frac{2}{L}\sin^2 k_n x$

   zeitunabhängige, „stationäre Zustände"

3. Der Grundzustand $n = 1$ entspricht der *Nullpunktsschwingung*, $E_0 = E_1 - V$:

   Das Elektron ist nie in Ruhe! Es kann nicht am Boden des Topfes sein.

Grund für Punkt 3: die sich hier erneut andeutende *Unschärferelation* (mehr dazu in 2.8)

$\Delta x = L \neq 0$ (durch das Potential vorgegeben) $\Rightarrow \Delta k,\ \Delta p \neq 0$ (nach Fouriertransformation)

d.h. bei Wanderwellen und stehenden Wellen erhält man ein ganz ähnliches Resultat.

Nullpunktsenergie:

$$E_0 = E_1 - V \quad \Rightarrow \quad \boxed{E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2}$$

numerisch: $E_0 = 3.4 \cdot 10^{-49}$ [eV] $\frac{1}{\mathrm{mL}^2}$(m[kg],L[m]) $\Rightarrow$ m und L sind entscheidend

Beispiele:

1. **Elektronen in Atomen:** (s. auch Kap. 2.8)

$$m_e = 9 \cdot 10^{-21}\mathrm{kg}, \quad L = 2 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{m} \quad \Rightarrow E_0 \approx \mathcal{O}(10)\ \mathrm{eV}$$

2. **Nukleonen in Atomkernen:**

$$m_p \approx m_n \approx 1,7 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{kg}, \quad L = 0.5 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{m} \quad \Rightarrow E_0 \approx \mathcal{O}(10)\ \mathrm{MeV}$$

3. **Makroskopische Teilchen:**

$$m \approx 0.1\ \mathrm{kg}, \quad L = 1\ \mathrm{m} \quad \Rightarrow v_0 \approx 3 \cdot 10^{-35}\ \mathrm{m/s}$$

Ergänzung: Begriff der **Parität der Wellenfunktion** $\psi(x)$:

Ist $\psi(x) = \psi(-x)$, spricht man von gerader Parität ($\pi = +1$); falls $\psi(x) = -\psi(-x)$, spricht man von ungerader Parität ($\pi = -1$). Die Parität ist abhängig von der Wahl des Koordinatensystems. Bezüglich des Symmetriepunkts $x = L/2$ haben die ψ_n mit $n = 1, 3, 5, \ldots$ gerade Parität, die mit $n = 2, 4, 6, \ldots$ ungerade Parität. $P = \psi\psi^*$ ist immer gerade. Definierte Parität ist eine Konsequenz von $V(x) = V(-x)$.

Abschluss und Überleitung zu 2.7: Was passiert, wenn das Potential V ortsabhängig ist, also $V = V(x)$?

$\Rightarrow$

1. Stehende Wellen, „stationäre Zustaände", existieren noch immmer, sind aber i.A. keine harmonischen Wellen mehr.

   (klassische Analogie: inhomogene Saite $T_0 = T_0(x), \rho_0 = \rho_0(x)$).

2. keine Dispersionsrelation dafür angebbar

3. Ausweg: Wellengleichung für de Broglie-Wellen und deren Lösungen

2.7 Wellengleichungen für de-Broglie-Wellen

„Ableitung" heuristisch: Ausgangspunkt ebene Wellen; dafür Ableitung einer Wellengleichung, die alle ebenen Wellen (damit auch Überlagerung, Wellenpakete etc.) beschreibt; dann Verallgemeinerung.

Ebene Welle in 3 Dimensionen:

$$\begin{array}{lrcl}
 & \psi(\vec{r},t) & = & Ae^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)}, \quad \vec{p}=\hbar\vec{k}, \quad E=\hbar\omega \\
\text{Mit} & \vec{k}\vec{r} & = & k_x x + k_y y + k_z z \\
 & \frac{\partial\psi}{\partial x} & = & (ik_x)\, Ae^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)} = ik_x\psi \\
 & \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} & = & (ik_x)^2\,\psi = -k_x^2\psi \\
\text{Somit} & \Delta\psi & = & \vec{\nabla}^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \\
 & & = & -(k_x^2+k_y^2+k_z^2)\psi \\
\Rightarrow & \Delta\psi & = & -k^2\psi, \\
\Rightarrow & \frac{\partial\psi}{\partial t} & = & -i\omega\psi, \\
\Rightarrow & \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} & = & -\omega^2\psi
\end{array}$$

Jetzt Dispersionsrelation für de-Brogliewellen benutzen; je nach Relation (relativistisch oder nicht-relativistisch) erhält man dann verschiedene Wellengleichungen.

2.7.1 Klein-Gordon-Gleichung (relativistisch)

$$\begin{array}{lrcl}
\text{Energie-Impuls-Beziehung:} & E^2 & = & p^2c^2+m_0^2c^4 \mid \cdot\,\psi \\
\text{Dispersionsrelation:} & \hbar^2\omega^2\psi & = & \hbar^2k^2c^2\psi + m_0^2c^4\psi \\
\text{obige Diff.-Quotienten eingesetzt:} & -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} & = & -\hbar^2c^2\Delta\psi + m_0^2c^4\psi \mid \cdot\,\frac{1}{\hbar^2c^2}
\end{array}$$

Daraus ergibt sich die sog. *Klein-Gordon-Gleichung*:

$$\boxed{\Delta\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - (\frac{m_0c}{\hbar})^2\psi = 0}$$

$\hbar/m_0c$ ist die Comptonwellenlänge λ_C des Teilchens der Ruhemasse m_0.

Diskussion:

1. *Lineare* Differentialgleichung, d.h. für die Lösungen gilt das Superpositionsprinzip $\psi = \sum\psi_i$ (wesentliche Forderung früher)

2. $\vec{p}, \vec{k}$ etc. *nicht explizit enthalten*, d.h. auch Überlagerung von Wellen mit unterschiedlichem $\vec{p}, \vec{k}$, z.B. Wellenpakete als Lösungen möglich.

3. Differentialgleichung von 2. Ordnung; dies ist eine Folge der quadratischen Dispersionsrelation, die Gleichung ist invariant gegenüber Lorentztransformation und somit *relativistisch korrekt.*

4. Die Gleichung ist nur gültig für isolierte Teilchen im leeren Raum mit ganzzahligem Drehimpuls (Bosonen). Für $m_0 = 0$ beschreibt sie z.B. Photonen. Beachte jedoch: Maxwell-Gleichungen (für den leeren Raum $\vec{j} = \vec{\rho} = 0$) beschreiben mehr, z.B. auch die Polarisationsrichtungen.

5. Eine ebenfalls relativistisch korrekte und viel nützlichere Gleichung ist die *Dirac-Gleichung*, deren Diskussion hier zu weit führen würde. Sie ist gültig für Teilchen mit halbzahligem Drehimpuls (Fermionen, insbesondere Elektronen e^+, e^-) und beschreibt auch Spinphänomene korrekt (mehr dazu in Kap. 4).

2.7.2 Schrödingergleichung (nicht-relativistisch)

I. Zeitabhängige Schrödingergleichung

Jetzt nicht nur Betrachtung isolierter Teilchen im leeren Raum, sondern Berücksichtigung eines gegebenenfalls von $\vec{r}$ und t abhängigen Potentials $V(\vec{r},t)$

Energie-Impuls-Beziehung: $$E = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r},t) \quad | \cdot \psi$$

Dispersionsrelation: $$\hbar\omega\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\psi + V(\vec{r},t)\,\psi$$

obige Diff.-Quotienten eingesetzt: $$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi + V(\vec{r},t)\,\psi$$

Man nennt $$\boxed{H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{r},t)}$$ den *Hamiltonoperator*

in Analogie zur klassischen Hamiltonfunktion.

Die resultierende Gleichung ist die *zeitabhängige Schrödingergleichung*:

$$\boxed{H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi + V(\vec{r},t)\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}}$$

Diskussion:

1. Erneut *lineare* Differentialgleichung; der Hamiltonoperator ist ein *linearer Operator*; es gilt also das Superpositionspronzip $\psi = \sum \psi_i$.

2. $\vec{p}$ und $\vec{k}$ nicht explizit enthalten; auch Wellenpakete können Lösungen sein.

3. **Wichtige Verallgemeinerung:**

   (a) Die Gleichung wurde „abgeleitet" unter der Annahme $V = const.$ Dies scheint plausibel, wenn $\lambda \ll$ Dimension, über die V sich ändert. Schrödinger's Postulat hingegen: Gleichung allgemeingültig, auch wenn $V(\vec{r},t)$ sich über λ stark ändert. Dies ist hier nicht ohne weiteres einzusehen. Korrekte Ableitung und Begründung aus allgemeinerer Theorie, der viel jüngeren Quantenelektrodynamik (QED). Pragmatischer historischer Standpunkt: Gleichung rechtfertigt sich aus den enormen Erfolgen bei der Beschreibung von Atomen, Molekülen, Atomkernen etc.

   (b) Was bedeutet $V(\vec{r},t)$? Manchmal ist es ein „äußeres" Potential, meistens eher ein effektives Potential, entstanden durch Wechselwirkung aller übrigen de-Broglie-Teilchen mit dem betrachteten (s. Kap. 4).

4. Wie aus der Ableitung folgt, ist die Gleichung nicht Lorentz-invariant!

   Dies reicht aus im Bereich der Atomphysik (für kleine Z), und in der gesamten Chemie oder Biologie. Die korrekten Gleichungen der QED ergeben Resultate, die sich nach Potenzen von

$\alpha = 1/137$, der *„Kopplungskonstanten" der elektromagnetischen Wechselwirkung* entwickeln lassen. Da $\alpha \ll 1$, reicht oft der 1. Term, der gerade den Lösungen der Schrödingergleichung entspricht. Anders ausgedrückt: höhere Glieder geben relativistische Korrekturen, diese sind jedoch in den äußeren Schalen der Atome und in Molekülen klein, da $v_{el} \ll c$. Sehr präzise Messungen oder innere Elektronen in schweren Atomen erfordern jedoch die Korrekturen (bzw. die Diracgleichung); s. dazu etliche Beispiele in Kap. 4.

5. Die Differentialgleichung ist komplex ($\hbar/i$), die Lösungen ψ sind komplex. Allein $P = \psi\psi^*$ ist jedoch observabel und tatsächlich auch reell, wie von einer messbaren Größe zu fordern ist.

II. Zeitunabhängige Schrödingergleichung (nicht-relativistisch)

Die Lösungen sind nun stehende Wellen, d.h. die schon in 2.62 angesprochenen „stationären Zustände". Mit dem Separationsansatz:

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r}) \cdot \varphi(t)$$

und

$$\varphi(t) = e^{i\omega t} \text{ mit } E = \hbar\omega$$

erhält man die *zeitunabhängige Schrödingergleichung:*

$$\boxed{H\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})}$$

(Alternativ: bei der ursprünglichen Ableitung unter I. die Größe E nicht durch $\hbar\omega$ bzw. die zeitliche Ableitung $\partial\psi/\partial t$ ersetzen).

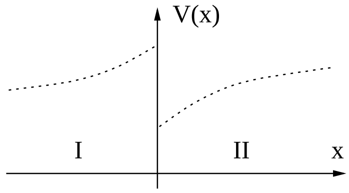
Diskussion:

1. Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung, präziser: eine *Eigenwertgleichung*. Lösungen existieren nur für bestimmte Werte von E (spielen mathematisch die Rolle von Parametern). Die Werte von E heißen *Eigenwerte des Operators H*, sie bilden das *„Eigenwertspektrum"*. Dieses Spektrum ist im allgemeinen diskret bei gebundenen Zuständen (Potentialtopf etc.) und kontinuierlich bei ungebundenen Zuständen (Wellenpakete). Die Eigenwerte und dazugehörigen Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ bilden die *stationären Zustände* des Systems (stationär bedeutet $P = \psi\psi^*$ ist zeitunabhängig).

   Gequantelte stationäre Zustände bilden mathematisch genauso ein Eigenwertproblem wie die Normalmoden einer klasssischen schwingenden Saite. Die *Quantelung*, d.h. die Diskretisierung ist eine *Folge der Randbedingungen*, nicht der Differentialgleichung selbst.

2. Randbedingungen:

   Hier gibt es, abhängig vom Problem, verschiedene Möglichkeiten (s. Kap. 2.73 und 4). Ein spezieller Fall ist das Auftreten von Unstetigkeiten im Potential V.



Existiert für $V = V(x)$ irgendwo ein Sprung, so sind die Lösungen der DGL getrennt in den Bereichen I und II anzusetzen. An der Grenzstelle müssen die Lösungen „angepasst" werden. Dazu gibt es i.A. 2 Bedingungen:

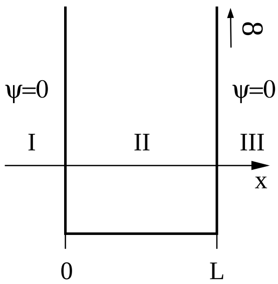
(a) $\psi(x)$ muss stetig sein

(b) $\dfrac{\partial\psi}{\partial x}$... muss stetig sein (nicht immer erfüllbar, s.u.)

Hauptargument: $P = \psi\psi^*$ muss endlich und stetig sein, um als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretierbar zu sein.

2.7.3 Einfache Lösungen der Schrödingergleichung

1. Beispiel: **Gebundene Zustände im Potentialtopf**



Schrödingergleichung:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - V)\,\psi = 0$$

Lösungen in I und III: $\psi = 0$
Lösung in II:

Mit $\qquad k^2 = \dfrac{2m_0}{\hbar^2}(E - V) \quad \Rightarrow \quad \dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0$

Ansatz in II allgemein:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Erste Randbedingung: $\psi = 0$ bei $x = 0 \quad \Rightarrow A = -B \quad \Rightarrow \psi \propto \sin(kx)$
Zweite Randbedingung: $\psi = 0$ bei $x = L \quad \Rightarrow k_n L = n\pi, n = 1, 2, 3, \ldots$

Die Eigenfunktionen sind also (einschließlich Normierung $\int_0^L |\psi|^2\,dx = 1$):

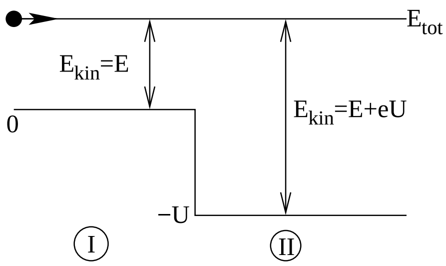
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

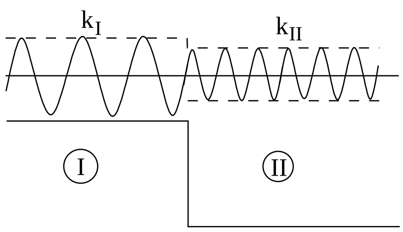
mit den diskreten Eigenwerten:

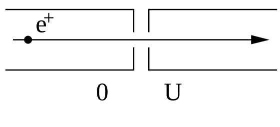
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 + V$$

Wie nicht anders zu erwarten, ergeben sich die gleichen Resultate wie in Kap. 2.62 ($V = -eU$).

2. Beispiel: **Ungebundene Zustände – Reflexion und Transmission an einem Potentialsprung**







Realisierung in Beschleunigerröhren;
e^+ im Spalt um eU beschleunigt.

Klassisch wird das Teilchen plötzlich beschleunigt, Impuls $p_{xII} > p_{xI}$. Quantenmechanisch: $k_{II} > k_I$; zusätzlich gibt es eine teilweise Reflexion an der Grenzschicht als Folge der Randbedingungen. (Optisches Analogon: teilweise Reflexion eines Lichtstrahls an einer Sprungstelle des Brechungsindex n).

Formale Herleitung:

$$\text{Schrödingergleichung:} \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0 \qquad k^2 \text{ wie oben}$$

$$\text{Lösungsansatz in I:} \quad \psi_I = \underset{\text{einlaufend}}{\underset{\longrightarrow}{Ae^{ik_Ix}}} + \underset{\text{reflektiert}}{\underset{\longleftarrow}{Be^{-ik_Ix}}} \qquad k_I^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

$$\text{Lösungsansatz in II:} \quad \psi_{II} = \underset{\text{transmittiert}}{\underset{\longrightarrow}{Ce^{ik_{II}x}}} \qquad k_{II}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+eU)$$

$$\text{Randbedingungen:} \quad \psi_I = \psi_{II} \text{ bei } x=0 \quad \Rightarrow \quad A+B=C$$

$$\frac{\partial\psi_I}{\partial x} = \frac{\partial\psi_{II}}{\partial x} \text{ bei } x=0 \quad \Rightarrow \quad (A-B)\,k_I = Ck_{II}$$

Hier führen die Randbedingungen also nicht zu Bedingungen für k, sondern fixieren die Verhältnisse B/A und C/A. Wegen $P = \psi\psi^* = |\psi|^2$ gilt

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right)^2 < 1 \qquad \text{„Reflexionswahrscheinlichkeit"}$$

Die Analogie zur Optik ist hier klar erkennbar: Reflexion von Licht an einer (unvergüteten) Glasfläche $R = (n-1)^2/(n+1)^2$ (4% bei $n = 1.5$)

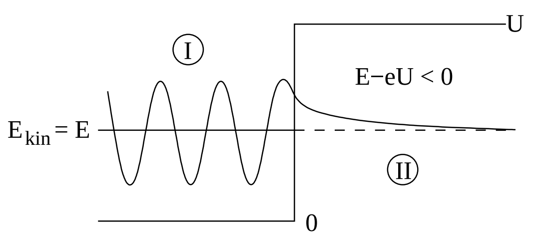
Reflexion und Transmission werden üblicherweise nicht als Verhältnisse von $P = \psi\psi^* = |\psi|^2$ definiert, sondern als Verhältnisse von "Wahrscheinlichkeitsströmen" $I \propto \psi\psi^* \cdot v$. Bei der Reflexion sind die Teilchengeschwindigkeiten für hin- und rücklaufende Welle gleich, und daher bleibt das Resultat für $R = |B/A|^2$ unverändert. Für den transmittierten Teil gilt hingegen

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|^2 \cdot \frac{v_{II}}{v_I} = \left|\frac{C}{A}\right|^2 \frac{k_{II}}{k_I} = \left(\frac{2k_I}{(k_I + k_{II})}\right)^2 \frac{k_{II}}{k_I} \qquad \text{„Transmissionswahrscheinlichkeit"}$$

sodass die Summe von Reflexion und Transmission $R+T = 1$ wird (in Unterstützung des Konzepts von Wahrscheinlichkeitsströmen).

3. Beispiel: **Ungebundene Zustände – Eindringen in den klassisch verbotenen Bereich**

Potentialstufe



Klassisch kann das Teilchen nicht in II sein, dies würde negativer kinetischer Energie entsprechen. Quantenmechanisch ist ein partielles Eindringen in II hinein jedoch möglich!

Lösungsansatz in I wie vorher:

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix}$$

Lösungsansatz in II:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x}$$

Jedoch ist:

$$k_{II}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - eU) < 0, \quad \text{d.h. } k \text{ ist imaginär}$$

Mit $k_{II} = iq$ und

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(eU - E) > 0$$

ergibt sich in II:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-qx},$$

d.h. im klassisch verbotenen Bereich nicht schlagartig 0, sondern eine exponentiell abklingende Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$!

aus

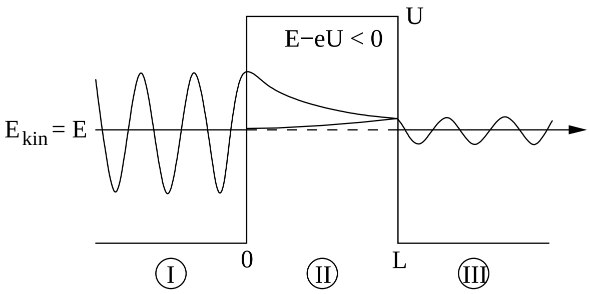
$$\psi \text{ stetig} \quad \Rightarrow \quad A + B = C$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} \text{ stetig} \quad \Rightarrow \quad ik_I(A - B) = -Cq$$

können R und T wie im 2. Beispiel bestimmt werden.

Zusatzbemerkung: Für $U \to \infty$ gehen C und damit $T \to 0$. Im Potentialtopf mit ∞-hohen Wänden hat man also wirklich Knoten, d.h. $|\psi|^2 = 0$ an den beiden Wänden; ein exponentielles Eindringen findet hier nicht statt. Dies ermöglicht die einfachen sin-Funktionen als Lösung im Topf-Inneren.

4. Beipiel: **Tunneleffekt an einer Potentialbarriere**



Hier sind nun drei unterschiedliche Lösungen der Schrödingergleichung notwendig, es gibt 2 mal 2 Randbedingungen für $x = 0$ und $x = L$.
In III ergibt sich wieder eine auslaufende Welle mit verkleinerter Amplitude, die stetig an die exponentiell abklingende Amplitude in II anschließt. Die Existenz einer endlichen Amplitude in III heißt *„Tunneleffekt"*.

Lösungsweg mit den 3 Ansätzen:

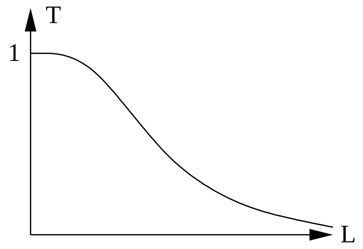
$$\begin{aligned}
\psi_I &= Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix} \\
\psi_{II} &= Ce^{-qx} + De^{qx} \\
\psi_{III} &= Ee^{ik_{III}x} = Ee^{ik_Ix}
\end{aligned}$$

Die Werte für k_I und q sind identisch mit denen im 3. Beispiel. Endergebnis für die Transmissionswahrscheinlichkeit:

$$T = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_I}{q} + \frac{q}{k_I}\right)^2 \sinh^2(qL)} = \frac{1}{1 + \frac{(eU)^2}{4E(eU - E)}\sinh^2(qL)}$$

In der Näherung $T \ll 1$

$$\boxed{T \approx e^{-2qL}}$$

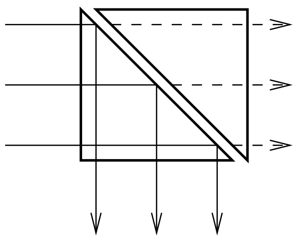


Die Transmissionswahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit q und L ab, d.h. mit der „zu durchtunnelnden Fläche" $q \cdot L$, wobei

$$q = \left[\frac{2m}{\hbar^2}(eU - E)\right]^{1/2}$$

Auch hier ist die Unschärferelation erkennbar: Das Teilchen ist im Bereich der Potentialbarriere auf $\Delta x = L$ lokalisiert, so kann Δp mit einem kleinen Teil seiner Unschärfeverteilung genügend groß werden, um dem Teilchen „über die Schwelle" zu helfen.

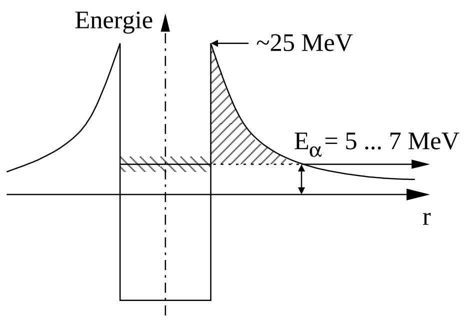
Klassisches Analogon zum Tunneleffekt:



Bei Totalreflexion von Licht in einem Prisma dringt die Lichtwelle exponentiell abklingend in den Außenraum ein und erzeugt dort ein stationäres Wellenfeld. Ein zweites Prisma jenseits eines engen Spalts kann die dort noch vorhandene Intensität auffangen und als normale Lichtwelle weiterleiten. Auch mathematisch ist dieser Vorgang völlig analog.

Anwendungsbeispiele des Tunneleffekts

1. Tunneldioden in der Festkörperphysik
2. Alphazerfall von Atomkernen:



Prozess $^{Z}A \rightarrow ^{Z-2}(A-4) + \alpha$ (^{2}He)
Energetisch möglich, wenn

$$E_\alpha = Q_\alpha = m(Z, A) - m(Z-2, A-4) - m_\alpha > 0$$

In allen schweren Kernen oberhalb von Pb ist dies der Fall; Q_α ist typisch $5 \ldots 7$ MeV. Die instantane Emission wird durch die Existenz einer Potentialbarriere $\propto Z$, des „Coulombwalls" (außerhalb der Reichweite der Kernkräfte) verhindert. Der Tunneleffekt erlaubt den Zerfall, aber mit Transmissionsfaktoren im Bereich $10^{-40} \ldots 10^{-15}$ abhängig von E_α und Z.

♠ Hinweis Bilder: Segrè "Nuclei and Particles" Fig. 7-9: Halbwertszeiten $t_{1/2}$ von α-Emittern als Funktion von E_α für Kerne von Po ($Z = 84$) bis Fm ($Z = 100$): $t_{\frac{1}{2}} \approx 10^{-22}/T$ [s] (T ist der Transmissionskoeffizient von oben); einfache Version ohne Spezifikation von Z: Rohlf Fig. 7-17

3. Spontanspaltung von Atomkernen.

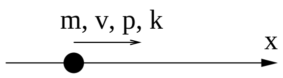
   Phänomenologie ähnlich der von α-Zerfällen (s. Physik V)

2.8 Heisenbergsche Unschärferelation

Als Folge des Welle-Teilchen-Dualismus gibt es eine *prinzipielle Grenze* der Genauigkeit, mit der zwei kanonisch konjugierte Größen (Ort $\leftrightarrow$ Impuls; Winkel $\leftrightarrow$ Drehimpuls; Energie $\leftrightarrow$ Zeit) *gleichzeitig* genau bestimmt sind.

2.8.1 Orts- und Impulsunschärfe

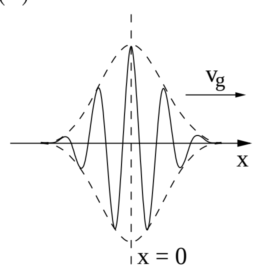
Ausgangspunkt z.B.



Teilchen in x-Richtung
(oder gebundener Zustand)

Schrödingergleichung des stationären Problems	$H\psi(x)$	$=$	$E\psi(x)$
einfachste Lösung	$\psi(x)$	$\propto$	e^{ikx}
besser: *Wellenpaket* (ebenfalls Lösung)	$\psi(x)$	$\propto$	$e^{-x^2/(2b^2)}\cos k_0 x$

$\psi(x) \propto e^{-x^2/(2b^2)}\cos k_0 x$



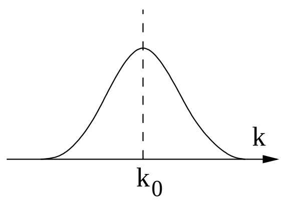
Gaussförmige
Amplitudenverteilung
$v_g = v_{\text{Teilchen}}$

$$\phi(k) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$

Fouriertransformation

$\longleftrightarrow$

$\phi(k) \propto e^{-(k-k_0)^2 b^2/2}$



Gaussförmige,
kontinuierliche
Impulsverteilung

Wiederholung (s. 2.51):

Die Fouriertransformierte einer Gaussverteilung ist wieder eine Gaussverteilung, aber mit inverser Breite (b jetzt im Zähler): b = Breite im Ortsraum klein $\Rightarrow$ Breite im k-Raum groß und umgekehrt.

Definition: *„Unschärfen"*:
(Wurzel aus mittlerem Schwankungsquadrat)

$$\boxed{\begin{aligned} \delta x &= \left(\overline{(x-0)^2}\right)^{1/2} = \sigma_x \\ \delta k &= \left(\overline{(k-k_0)^2}\right)^{1/2} = \sigma_k \end{aligned}}$$

durch Vergleich mit Gauss'scher Normalverteilung $e^{-x^2/(2\sigma_x^2)}$

Wahrscheinlichkeit für Messung des Werts x: $\propto \psi(x)\psi^*(x) \propto e^{-x^2/b^2}$

$$\Rightarrow \quad \delta x = \sigma_x = \frac{b}{\sqrt{2}}$$

Wahrscheinlichkeit für Messung des Werts k: $\propto \phi(k)\phi^*(k) \propto e^{-(k-k_0)^2 b^2}$

$$\Rightarrow \quad \delta k = \sigma_k = \frac{1}{\sqrt{2}b}$$

Somit
$$\delta x \cdot \delta k_x = \frac{1}{2}$$

Mit $\hbar \delta k_x = \delta p_x$ erhält man

$$\boxed{\delta x\, \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Heisenbergsche Unschärferelation (1927)

(schon früher immer wieder angesprochen, aber weniger streng; der Faktor 1/2 gilt für Gaussverteilungen)

Diskussion:

1) $\geq$ gilt wegen Auseinanderlaufens des Pakets (s. 2.52)

   streng: $$\delta x\, \delta p_x = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\frac{t^2}{\tau^2}} \qquad \tau = \frac{\hbar m}{2\delta p_x^2}$$

2) Damit Teilchen Welleneigenschaften hat $\Rightarrow$ Ausdehnung im x-Raum nötig.

   Damit Welle Teilcheneigenschaften hat (d.h. lokalisiert ist) $\Rightarrow$ Ausdehnung im k-Raum nötig (Paket)

   $\Rightarrow$ Inverse Proportionalität!

3) Beziehung abgeleitet für Wellenpakete ($p = \hbar k$), jedoch allgemein gültig, nicht nur für alle von der Schrödingergleichung beschriebenen Systeme, sondern für die gesamte Physik

Prinzipielle Genauigkeitsgrenze für kanonisch konjugierte Variable in der Quantenphysik.

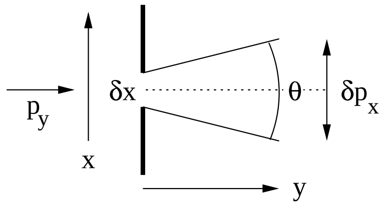
Prinzipielle Genauigkeitsgrenze für *gleichzeitige* Messung, *nicht Folge der Messung.*

Unschärfe ist *objektiver* Natur; das System ist objektiv nur statistisch beschreibbar. (Statistische Thermodynamik: subjektiver Natur, Verzicht auf genaue Kenntnis bezüglich eines einzelnen Teilchens)

Nicht kanonisch konjugierte Variable unterliegen nicht der Unschärferelation:
$\delta x \delta p_y = 0, \delta y \delta p_x = 0$ etc.

Beispiele zur Illustration (die meisten davon haben sich, wie auch das Wellenpaket, bereits in früheren Abschnitten angedeutet; sie werden hier noch einmal systematisch zusammengestellt).

1. Beispiel: **Beugung am Spalt**



$$\theta = \frac{\delta p_x}{p_y}$$

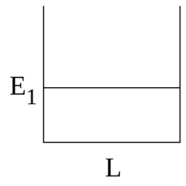
$$\delta p_x = \frac{\hbar}{\delta x} = \frac{\hbar}{d}$$

$$p_y = p = \hbar k = \hbar\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\boxed{\theta = \mathcal{O}\left(\frac{\lambda}{d}\right)}$$

2. Beispiel: **Nullpunktsschwingung gebundener Zustände**

a) **Kastenpotential**



$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 \ (+V)$$

$$n = 1: \qquad p_1 = \sqrt{2m_0E_1} = \hbar\,\frac{\pi}{L}$$

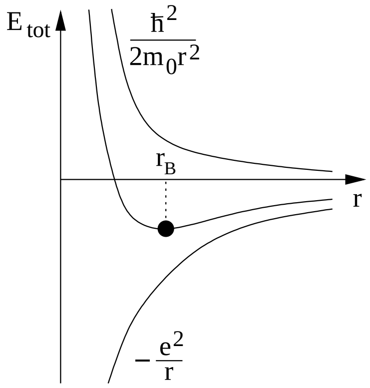
$$\boxed{p \cdot L = \frac{h}{2}}$$

b) **Wasserstoffatom**

Abschätzung des Bohrschen Radius r_B und der Bindungsenergie E_B für Grundzustand (Elektron mit Ladung e im Potential des Kerns, d.h. des Protons mit Ladung $+e$:

$$-E_\mathrm{B} = \langle E_\mathrm{tot}\rangle = \langle E_\mathrm{kin}\rangle + \langle E_\mathrm{pot}\rangle = \langle\frac{p^2}{2m_0}\rangle - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\langle\frac{e^2}{r}\rangle$$

Unschärferelation: $\delta r \cdot \delta p \approx \hbar$, hier radikal: $\delta r \to \langle r\rangle$, $\delta p \to \langle p\rangle$, d.h. *Gesamtausdehnung und Gesamtimpuls als Unschärfe* angenommen



$$\Rightarrow \quad E_\mathrm{tot} = \frac{\hbar^2}{2m_0r^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

Minimum der Energie für $\dfrac{dE_\mathrm{tot}}{dr} = 0$

$$-2\frac{\hbar^2}{2m_0r_\mathrm{min}^3} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r_\mathrm{min}^2} = 0$$

$$\Rightarrow \quad r_\mathrm{min} = r_B = \frac{\hbar^2}{m_0}\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar c}{m_0c^2}$$

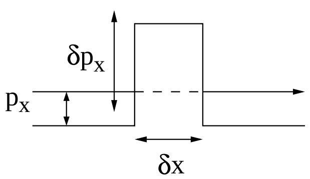
Bohrscher Radius $r_B = 0.53 \cdot 10^{-10}$ m

$$\Rightarrow \quad -E_\mathrm{tot}(r_\mathrm{min}) = -E_B = \frac{m_0}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 = \frac{1}{2}\alpha^2m_0c^2$$

Bindungsenergie $-E_B = 13.6$ eV

Die vollständige Übereinstimmung mit den genauen Werten (Kap. 4) ist natürlich Zufall und durch die willkürliche Wahl $\delta r \cdot \delta p \approx \hbar$ (statt $\hbar/2$ o.a.) bedingt. Das Resultat rechtfertigt jedoch qualitativ die radikale Grundannahme: Das H-Atom im Grundzustand spiegelt direkt die Unschärferelation wider.

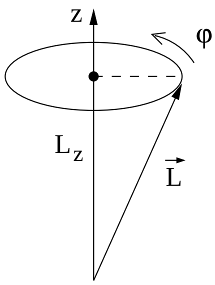
3. Beispiel: **Tunneleffekt** (1-dimensional)



Die Unschärfe des Impulses und damit der kinetischen Energie erlaubt die „klassische" Überquerung der Barriere. (Um Missverständnissen vorzubeugen: die Ordinate in dieser Zeichnung bedeutet Energie bzw. Impuls, nicht die y-Richtung).

2.8.2 Winkel- und Drehimpulsunschärfe

Hier handelt es sich um eine kurze Vorwegnahme der ausführlichen Behandlung von Drehimpuls und Drehimpulsquantelung in Kap. 4, um die Vollständigkeit von Kap. 2.8 sicherzustellen.



$$\boxed{\delta L \cdot \delta\varphi \geq \frac{\hbar}{2}}$$ Unschärfe-Relation

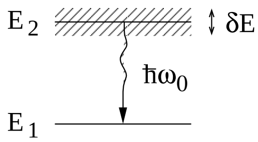
Orientierung von $\vec{L}$ im Raum unscharf; $|\vec{L}|$ und L_z sind jedoch gleichzeitig scharf (s.u. Kap. 4). Die Unschärferelation äußert sich als *Kegelmantel* für die möglichen Orientierungen von $\vec{L}$.

auch $\quad \dfrac{\delta L_x}{L} \cdot \delta L \geq \dfrac{\hbar}{2}$ etc.

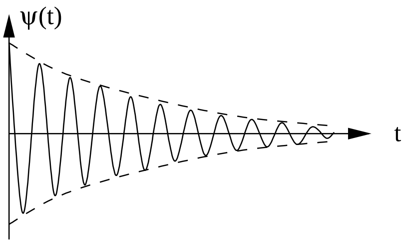
aber $\quad \delta L \cdot \delta L_z = 0$

2.8.3 Energie- und Zeitunschärfe

Zustände mit endlicher Lebensdauer τ sind niemals energietisch scharf, sondern haben eine charakteristische „Zustandsbreite" δE, die mit der Lebensdauer über eine noch weitere Form der Unschärferelation verknüpft ist.



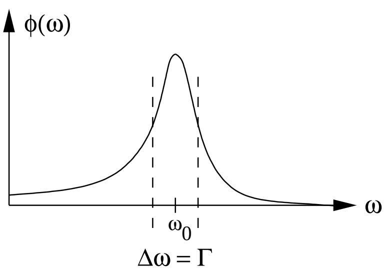
Analogie: **Klassische gedämpfte Schwingung** (Wiederholung von 2.51)



Zeitfunktion $\psi(t)$:

$$\psi(t) \propto e^{-\frac{\Gamma t}{2}} \cos(\omega_0 t)$$

$\Gamma = 1/\tau$; τ bezeichnet die „Dämpfungskonstante" oder „mittlere Lebensdauer"



Fouriertransformnierte $\phi(\omega)$ von $\psi(t)$:

$$\phi(\omega) \propto \frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$ „Lorentzform"

$\phi(\omega)$ hat eine ähnliche Form wie die Amplitude $A(\omega)$ bei der erzwungenen Schwingung („Resonanzkurve"). Breite $\Delta\omega = \Gamma = 1/\tau$ (*Halbwertsbreite!*)

Interpretation in der Quantenphysik

- Ein strahlendes Atom z.B. emittiert während des Übergangs vom Zustand E_2 in den Zustand E_1 ein *Frequenzspektrum* der Breite $\Delta\omega$.
- Die Differenz zwischen den Energieniveaus E_2 und E_1 verhält sich wie eine klassische *Resonanz.*

- Ist E_2 der instabile angeregte und E_1 der stabile Grundzustand, ist die mit $\Delta\omega$ verbundene Energieunschärfe $\Delta E = \hbar\Delta\omega$ allein mit E_2 verknüpft.

Quantitativ:
$$\omega_0 \text{ unscharf mit } \Delta\omega = \Gamma = 1/\tau$$
$$E_2 - E_1 = \hbar\omega \text{ unscharf mit } \Delta E = \hbar\Delta\omega = \hbar/\tau$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Delta E \cdot \tau \equiv \Delta E \cdot \delta t = \hbar} \quad \text{Unschärfe-Relation}$$

Die rechte Seite der Gleichung enthält hier $\hbar$ und nicht $\hbar/2$ wie in den beiden vorangegangenen Formulierungen der Unschärferelation; der Grund liegt in der Verknüpfung von gedämpfter Schwingung und Lorentzform (i.A. realistisch in der mikroskopischen Physik!) anstatt der Benutzung von Gaußverteilungen und ihren Standardabweichungen (ein Gauß-Fit der Lorentzform ergäbe $\Delta E = 2.36\sigma = 2.36\delta E$, d.h. $\delta E \cdot \delta t = \hbar/2.36$)

ΔE nennt man die *„natürliche Linienbreite"*; numerisch ist $\Delta E \cdot \tau = 6.6 \cdot 10^{-16}$ [eV·s]

Beispiele: (siehe auch Kap. 4 und Physik IV)

1) **Äußere Elektronen** in Atomhüllen: $\tau \sim 10^{-8}$ s $\Rightarrow \Delta E \sim 10^{-7}$ eV, d.h. die zugehörigen Zustände sind *sehr* scharf: $\Delta E/E \sim 10^{-8}$.

2) **Innere Elektronen** in Atomhüllen: z.B. in Pb: $\tau \sim 10^{-17}$ s $\Rightarrow \Delta E \sim 50$ eV, $\Delta E/E \sim 10^{-3}$.

3) **Zerfall von Atomkernen oder Elementarteilchen**

   ♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 5-15 (Breite ΔE und Lebensdauer τ für Beispiele vom Th α-Zerfall bis zum Z^0-Zerfall über 40 Zehnerpotenzen!)

Kapitel 3

Systeme identischer Teilchen

3.1 Bosonen und Fermionen

3.1.1 Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen

Vorbemerkung:

In der mikroskopischen Physik sind Teilchen i.A. *ununterscheidbar* (Ensembles von Photonen, Elektronen, gleichartigen Atomen etc.). Die quantenmechanischen Konsequenzen der Ununterscheidbarkeit sind verblüffend und kaum weniger bedeutsam als der Welle-Teilchen-Dualismus. Sie bilden den Gegenstand des Kapitels 3. (Literaturempfehlung zur Einstimmung: erneut Feynman III)

Einteilchen-Wellenfunktion:	beschrieben durch Amplitude	$\psi(1)$
Bei 2 identischen Teilchen:	Wellenfunktion	$\psi(1,2)$
	Wahrscheinlichkeitsdichte	$\|\psi(1,2)\|^2$

Da Teilchen identisch (d.h. ununterscheidbar), *Vertauschung* der beiden Teilchen gleichgültig für *Wahrscheinlichkeitsdichte:*

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2$$

Die Wellenfunktion selbst hat dann bezüglich Vertauschung der Teilchen 1 und 2 genau 2 Möglichkeiten (andere existieren nicht):

$\psi_+(1,2) = +\psi_+(2,1)$	symmetrisch bei Vertauschung gilt für **„Bosonen"** (Spin ganzzahlig)
$\psi_-(1,2) = -\psi_-(2,1)$	antisymmetrisch bei Vertauschung gilt für **„Fermionen"** (Spin halbzahlig)

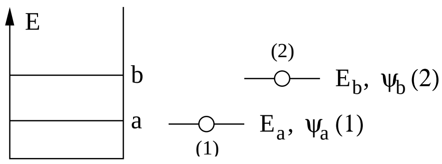
Bei n Teilchen gilt Entsprechendes bezüglich Vertauschung von 2 willkürlich herausgegriffenen Teilchen. Beachte: ψ ist i.A. ein Produkt von Orts- und Spinwellenfunktionen; dies wird erst in Kap. 4 benötigt werden.

Ein plausibler Grund für die Existenz der beiden Teilchenklassen Bosonen und Fermionen und der unterschiedlichen Wellenfunktionen lässt sich bis heute nicht angeben. Feynman: „Das heißt wahrscheinlich, dass das zugrunde liegende Prinzip nicht voll verstanden ist." Heutige spekulative theoretische Vorstellungen: Supersymmetrie (SUSY); zu jedem Fermion gibt es ein Partner-Boson um umgekehrt (quark $\leftrightarrow$ squark, gluon $\leftrightarrow$ gluino, photon $\leftrightarrow$ photino); experimentelle Klärung durch künftigen pp Collider LHC beim CERN?

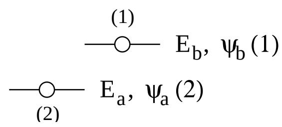
3.1.2 Fermionen und Pauli-Prinzip

Annahme zunächst: 2 Teilchen in *verschiedenen* Zuständen a, b.

Beispiel: Kasten-Potential



muss gleichbedeutend sein mit



Gesamte Wellenfunktion: $\psi(1,2) \neq \psi_a(1)\,\psi_b(2)$, denn dann wäre die Zuordnung ja klar, d.h. die Ununterscheidbarkeit verletzt.

Stattdessen: Individualität von 1 und 2 muss ausgewischt werden, d.h. Wellenfunktion muss „symmetrisiert" oder „anti-symmetrisiert" werden:

$$\begin{array}{rrcl} \text{symmetrisch} & \psi_+(1,2) & = & \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)\} \\ \textit{d.h.} & \psi_+(1,2) & = & +\psi_+(1,2) \\ \text{anti-symmetrisch} & \psi_-(1,2) & = & \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)\} \\ \textit{d.h.} & \psi_-(1,2) & = & -\psi_-(1,2) \end{array}$$

Der Faktor $1/\sqrt{2}$ stellt die Normalisierung der Wellenfunktionen $\psi_+(1,2)$ und $\psi_-(1,2)$ auf insgesamt 1 bezüglich $\psi_a \cdot \psi_b$ sicher.

Für $a = b$, d.h. beide Teilchen im *gleichen* Zustand

$$\boxed{\begin{array}{rcll} \psi_+(1,2) & \neq & 0 & \text{Bosonen, symm. Wellenfunktion} \\ \psi_-(1,2) & = & 0 & \text{Fermionen, antisymm. Wellenfunktion} \end{array}}$$

Das Ergebnis für Fermionen ist weitreichend:

2 Fermionen können nicht gleichzeitig im gleichen Energie-Zustand sein bzw. gleiche Quantenzahlen haben.	Pauli-Prinzip

Vorschlag im Zusammenhang mit dem Aufbau der Atome 1925 durch Pauli; Nobelpreis 1945

1. Beispiel: **2 freie Elektronen**

$$\begin{array}{ll} \psi_a(1) = e^{ik_a x_1} & |\psi_a|^2 = const. \\ \psi_b(2) = e^{ik_b x_2} & |\psi_b|^2 = const. \end{array}$$

$$\Rightarrow \quad |\psi_-(1,2)|^2 = 1 - cos[(k_a - k_b)(x_1 - x_2)] \quad \text{(symmetrisch in } \Delta x \text{ und } \Delta k\text{)}$$

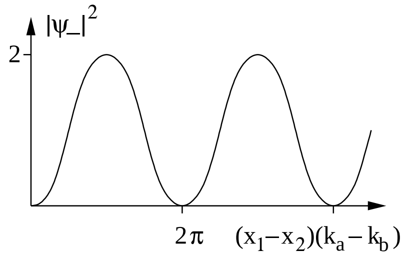
a) $x_1 = x_2$ $\qquad\Rightarrow\quad |\psi_-|^2 = 0$ überall

2 Elektronen können nie am gleichen Ort sein (gleiche Stelle im Ortsraum)

b) $k_a = k_b$ $\qquad\Rightarrow\quad |\psi_-|^2 = 0$ überall

2 Elektronen können nie den gleichen Impuls haben (gleiche Stelle im Impulsraum)

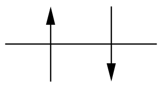
c) $k_a \neq k_b$



oszillatorische Wahrscheinlichkeitsdichte

Beachte: „Gleich“ in Ort oder Impuls kann nur im Rahmen der Unschärferelation definiert werden, d.h. mit der Genauigkeit $\hbar$. Konsequenzen für die Quantenstatistik: „Zellgrößen“ im Phasenraum sind von der Größenordnung des Planckschen Wirkungsquantums h (s. 3.2).

2. Beispiel: **Aufbau des Periodensystems**



Im 1s-Zustand von Atomen können gerade 2 Elektronen (mit entgegengesetzten Spinrichtungen) untergebracht werden, im 2s-Zustand ebenfalls 2, im 2p-Zustand 6 etc. (Vorschlag Pauli 1925)

$\Rightarrow$ Schalenstruktur der Atomhülle (s. Kap. 4)

3.1.3 Bosonen

Sind 2 Bosonen im gleichen Quantenzustand $a = b$, gilt (s. 3.12):

$$\psi_+(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)\}$$

$$\Rightarrow \quad \psi_+(1,2) = \sqrt{2}\,\psi_a(1)\psi_b(2)$$

$$|\psi_+(1,2)|^2 = 2|\psi_a(1)\psi_b(2)|^2$$

Vergleiche damit den Fall klassischer unterscheidbarer Teilchen, d.h. ohne Rücksicht auf Symmetrisierung der Wellenfunktion

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi_a(1)\psi_b(2)|^2$$

$\Rightarrow$

Die Wahrscheinlichkeit, 2 Bosonen im *gleichen* Quantenzustand zu finden, ist doppelt so groß wie ohne Berücksichtigung des Symmetriecharakters, d.h. doppelt so groß wie für klassische Teilchen.

Verallgemeinerung:

P_1 sei Wahrscheinlichkeit, dass ein ursprünglich leerer Zustand von einem Boson besetzt wird. Bei n Bosonen gilt dann nicht wie bei klassischen (unterscheidbaren) Teilchen

$$P_n = (P_1)^n$$

sondern

$$\Rightarrow \quad P_n^{\text{Boson}} = n!P_1^n$$

Es ergibt sich also eine Vergrößerung der Besetzungswahrscheinlichkeit um den Faktor $n!$.

Differentielle Betrachtung:

$$P_{n+1}^{\text{Boson}} = (n+1)P_1P_n^{\text{Boson}}$$

> Wenn schon n Bosonen in einem Zustand vorliegen, ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein weiteres dazukommt, um $(n+1)$ größer als im Fall klassischer (unterscheidbarer) Teilchen.

Im Fall makroskopischer Systeme mit n von der Größenordnung $\geq 10^{20}$ führt dies zu enormen Konsequenzen (s.u.).

Merkregeln zu 3.12 und 3.13

- „Fermionen besetzen nie gleiche Zustände"
- „Bosonen bevorzugen gleiche Zustände"

3.2 Klassische und Quantenstatistik

In der statistischen Mechanik gilt allgemein für die Zahl der Teilchen/Energieintervall dN/dE bei der Energie E

$$\boxed{\frac{dN(E)}{dE} = g(E) \cdot P(E)}$$

Dabei bedeuten

$g(E)\,dE$	die Zahl der Zustände im Energieintervall dE bei der Energie E
P(E)	die Besetzungswahrscheinlichkeit (bzw. mittlere Zahl der Teilchen) von Zuständen der Energie E im thermischen Gleichgewicht

dN/dE kann verteilt sein

a) diskontinuierlich (gequantelte Zustände bei gebundenen Teilchen)
b) kontinuierlich (bei freien Teilchen)

I. Zahl der Zustände g(E)

$g(E)$ muss im 6-dimensionalen Phasenraum (3 Orts-, 3 Impulskoordinaten) ermittelt werden.

Annahmen:

Ortsraum integral:	V
Impulsraum differentiell (Kugelschale):	$4\pi p^2 dp$
Größe einer Einzelzelle im Phasenraum:	h^3

Damit Zahl der Zustände im Impulsintervall dp beim Impuls p

$$g(p)dp = V\frac{4\pi p^2 dp}{h^3}$$

1) Nicht-relativistische Teilchen einschließlich Spin

$$p = \sqrt{2mE}$$

$$\Rightarrow \quad g(E)dE = g_s V \frac{4\pi}{h^3}(2m^3)^{1/2}\sqrt{E}dE$$

2) Voll-relativistische Teilchen (z.B. Photonen) einschließlich Spin

$$p = E/c$$

$$\Rightarrow \quad g(E)dE = g_s V \frac{4\pi}{h^3}\frac{E^2}{c^3}dE$$

Die Faktoren g_s bedeuten statistische Gewichte, die von der Größe des Spins abhängen (s. 3.3).

II. Besetzungswahrscheinlichkeiten $P(E)$

Die Berechnung der $P(E)$ abhängig von der Annahme unterscheidbarer Teilchen (klassisches Gas) oder ununterscheidbarer Teilchen (Bosonen, Fermionen) ist aufwendig und würde für sich allein 1–2 Doppelstunden erfordern. Daher werden hier nur die Resultate angegeben (Lösungsweg s. Literatur).

	Bose	Boltzmann	Fermi
Teilchen	ununterscheidbar	unterscheidbar	ununterscheidbar
Spin	ganzzahlig $(0, 1, 2, \ldots)$	-	halbzahlig $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots)$
Eigenfunktionen	symmetrisch	-	antisymmetrisch
qualitatives Verhalten	besetzen bevorzugt gleiche Zustände	-	Pauli-Prinzip: besetzen nie gleiche Zustände
P(E)	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)} - 1}$	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)}}$	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)} + 1}$
übliche Schreibweise	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)} - 1}$	$Ae^{-\frac{E}{kT}}$	$\frac{1}{e^{(E - E_F)/kT} + 1}$
Beispiele	Photonengas (Plancksches Gesetz) Phononengas flüssiges Helium Bose-Einstein-Kondensat	klassische Gase bei jeder Temperatur	Entartetes Elektronengas in Festkörper-, Atom-, Kern- und Astrophysik

Hinweise zu den Konstanten:

α (bzw. A bzw. E_F) sind Parameter, die vom System abhängen, vor allem von der Teilchenzahl, aber auch der Teilchennatur, gelegentlich der Temperatur etc. Ihre Festlegung im Einzelnen ist aus den Anwendungsbeispielen in 3.3 erkennbar (s.u).

Intuitiv: $P(E) > 1$ für Bosonen, $P(E) \leq 1$ für Fermionen (Pauli-Prinzip)

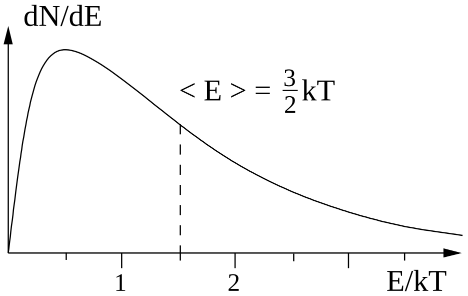
♠ Hinweis Bilder: Eisberg/Resnik Fig. 11-1, 11-2, 11-3 zur Verdeutlichung der verschiedenen $P(E)$

3.3 Anwendungsbeispiele

3.3.1 Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Totale Teilchenzahl N_0 fest; Normierung aus

$$\frac{dN}{dE} = N_0 \frac{g(E)\, e^{-E/kT}}{\int_0^\infty g(E) e^{-E/kT} dE}$$



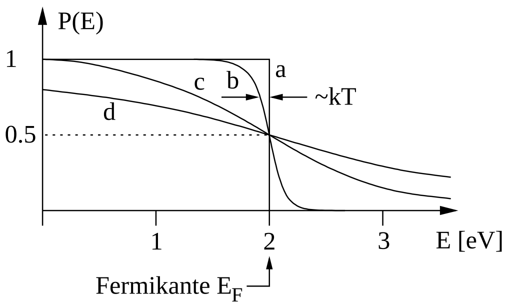
$$\boxed{\frac{dN(E)}{dE} = \frac{2N_0}{(\pi kT)^{3/2}} \sqrt{E}\, e^{-\frac{E}{kT}}}$$

Beachte: die Masse m kommt explizit nicht vor; das ermöglicht gerade das Konzept der mittleren kinetischen Energie als Temperaturdefinition (s. exzellente Diskussion dazu im Feynman). Das Planck'sche Wirkungsquantum h kommt (natürlich) auch nicht vor.

3.3.2 Fermi-Verteilung – Elektronen in Metallen

Eigenschaften der Verteilungsfunktion $P(E)$

Annahme: E_F fest (s.u.); numerisches Beispiel für $E_F = 2$ eV, $T_F = E_F/k = 23\,000$ K



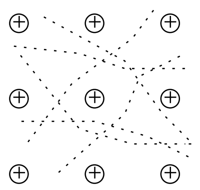
	T (K)	kT (eV)
a	0	0
b	1000	0.085
c	5000	0.43
d	20000	1.7

Diskussion der Kurven:

- a $T = 0$: alle Phasenraumzellen der Zustände E_i bis zur Grenze E_F mit je **1** Fermion besetzt, also *voll*; $P(E) = 1$. Für $E_i > E_F$ alle Zellen leer, d.h. $P(E) = 0$.
- b, c $T > 0$, aber $kT \ll E_F$: Abrundung, Verschmierung der Fermikante
- d $T \gg 0$, $kT \approx E_F$: selbst für die niedrigsten Zustände E_i gibt es unbesetzte Zellen $\Rightarrow$ irgendwann Grenzfall Boltzmann

Allgemeine Regel: Im Bereich $E \gg E_F$ Boltzmann-„Schwanz": dort $e^{-E/kT}$ immer ausreichend!

1. Beispiel: Leitungselektronen



Leitungselektronen quasi-frei, ca. 1–2/Atom in Cu, Ag, ...
Räumliche Elektronen-„Gas"-Dichte: $N/V = 2.5 \cdot 10^{22}\ \mathrm{e}^-/\mathrm{cm}^3$
(1 pro Zelle von 3.5 Å)

Vgl. normales Gas $N/V =\approx 3 \cdot 10^{19}\ /\mathrm{cm}^3$
(„verdünnt" gegenüber Festkörper)

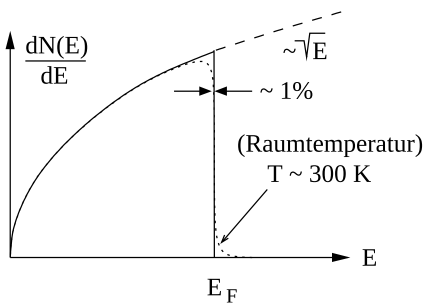
Behandlung nicht-relativistisch, Elektronenspin 1/2 $\Rightarrow g_s = 2$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dN}{dE} = \frac{V}{h^3} 8\pi\sqrt{2m^3}\sqrt{E}\frac{1}{e^{(E-E_F)/kT}+1}}$$

Totale Teilchenzahl N_0 fest: E_F aus $N_0 = \left.\int_0^\infty \frac{dN}{dE}\,dE\right|_{T=0}$

$$\Rightarrow \boxed{E_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3N_0}{\pi V}\right)^{2/3}} \sim (\text{räumliche Dichte})^{2/3}$$

Das Planck'sche Wirkungsquantum h ist in beiden Gleichungen explizit enthalten: Fermiverteilungen sind quantenphysikalischer Natur.



Typische Zahlen: $E_F = 2\ldots7$ eV $\gg kT$!
„Entartungstemperatur":
$T_F = E_F/k = 23\,000 - 82\,000$ K!

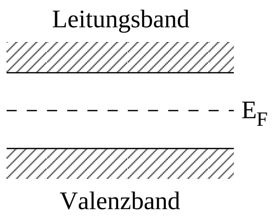
$\Rightarrow$ Fermi-Verteilung extrem scharfkantig bei Raumtemperatur

Vergleiche damit normales Gas mit $A = 100$ (Annahme Fermionen): E_F reduziert um den Faktor 100 (von $n^{2/3}$) $\cdot\, 2 \cdot 10^5$ (von m) $\Rightarrow$ $E_F \approx 10^{-7}$ eV $\Rightarrow$ Boltzmann-Verteilung bei normalen Gasen immer ausreichend

Konsequenzen für Elektronengas

a) Dulong-Petit'sches Gesetz der spezifischen Wärmen von Festkörpern: Beitrag der Elektronen vernachlässigbar klein. Grund: $\langle E\rangle$/Teilchen $= (3/5)E_F$, praktisch unabhängig von T ($C = \mathrm{d}E/\mathrm{d}T = 0$)

b) Halbleiter



Boltzmann-Schwanz der Fermi-Verteilung im Leitungsband
$\Rightarrow$ exponentielle Zunahme der Leitfähigkeit mit der Temperatur

Weitere Anwendungsbeispiele der Fermi-Verteilung:

Atomhülle als Fermigas von Elektronen (s. Physik IV)

Atomkerne als Fermigas von (getrennt) Protonen und Neutronen (s. Physik V)

Astrophysik: Weiße Zwerge mit Fermigas von Elektronen. Hier $E_F \ggg kT$; Druck des entarteten Elektronengases $P = \mathrm{d}E_{\mathrm{tot}}/\mathrm{d}V \propto n^{2/3}$ ist bei Dichten von $\sim 10^8$ kg/m^3 so groß, dass er der Gravitation das Gleichgewicht hält.

3.3.3 Bose-Verteilung – Planck'sches Strahlungsgesetz

Behandlung relativistisch (s. 3.2) $\Rightarrow E = h\nu$

2 Polarisationszustände des Photons $\Rightarrow g_s = 2$

Mit $g(E)dE = g(h\nu)d(h\nu)$

$$g(\nu)d\nu = V\frac{8\pi}{h^3}\frac{(h\nu)^2}{c^3}d(h\nu) = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2 d\nu$$

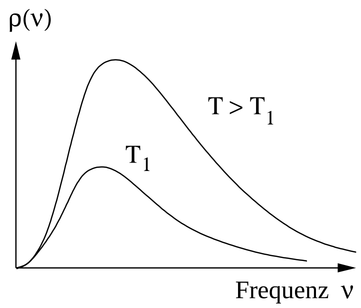
Totale Photonenzahl nicht fest, sondern massiv temperaturabhängig
$\Rightarrow \alpha = 0$, $e^\alpha = 1$ (α nicht durch N_0 fixierbar)

Anzahldichte der Photonen

$$\frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2\frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Energiedichte des Photonen„gases"

Mit $$\rho(\nu) = \frac{1}{V}\frac{dN}{d\nu}h\nu$$



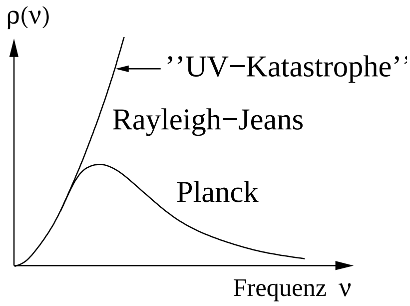
$$\Rightarrow \boxed{\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}d\nu} \quad \textit{Planck}$$

Das Planck'sche Wirkungsquantum h ist in beiden Gleichungen explizit enthalten: Boseverteilungen sind quantenphysikalischer Natur.

Zusatzbemerkungen/Diskussion

1. 3 „Ableitungen": Planck (gequantelte Oszillatoren)
   Einstein (spontane/stimulierte Emission)
   Bosonenstatistik (hier benutzt)

2. **Näherung** $h\nu \ll kT$



$$\boxed{\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT\,d\nu}$$ Rayleigh-Jeans (reiner Phasenraum)

gute Näherung für kleine ν, aber Energiedichte divergiert bei großen ν: „UV-Katastrophe" (Rayleigh-Jeans enthält nicht h!). Die Größe kT in dieser Gleichung entspricht der mittleren Energie der stehenden Wellen im Hohlraum ($2 \times \frac{1}{2}kT$).

3. Durch Differenzieren der Plank'schen Verteilung:

$$\frac{T}{\nu_{\max}} = const.$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\lambda_{\max} \cdot T = const = 2.9 \cdot 10^{-3}[\mathrm{m \cdot K}]}$$ Wien'sches Verschiebungsgesetz

Beispiel: Oberflächentemperatur der Sonne etwa 5500 K, zugehörige Wellenlänge $\lambda_{\max}$ 530 nm (im Grünen)

4. Integral über die gesamte Strahlungsdichte

$$\boxed{S = kT^4}$$ Stefan-Boltzmann

Thermodynamisch ist $S \propto T^4$ streng ohne Quantenhypothese begründbar (vor Planck!), aber: k enthält $h \Rightarrow$ erst durch Planck gelöst

♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 3-9 (Spektrum der Sonne)

Weitere Anwendungsbeispiele der Boseverteilung

flüssiges ^{4}He (s. unten; ausführlich in Physik VI)

Bose-Einstein-Kondensation allgemein (s. Physik IV)

Interferometrie mit Bosonen (Messung von Sternradien; Messung der räumlichen Struktur von Kollisionen in der Elementarteilchenphysik)

Flüssiges ^{4}He

He: Kernspin 0, Elektronenspin 0, Gesamtspin 0 $\Rightarrow$ System von Bosonen

Unterschied zur Planckschen Strahlung: jetzt N fixiert $\Rightarrow N_0$

Bestimmung von e^α aus Normierung mit N_0

$$N_0 = \int_0^\infty g(E)\frac{dE}{e^\alpha e^{E/kT} - 1}$$

Entwicklung nach Potenzen von $A = \frac{N_0 \cdot h^3}{(2\pi mkT)^{3/2}V} = e^{-\alpha}$

$$E = \frac{E_{tot}}{N_0} = \frac{3}{2}kT\left(1 - \frac{1}{2^{5/2}}\frac{N_0 h^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}} + \ldots\right)$$

$\Rightarrow E_{\text{Bose}} < E_{\text{klass}} = (3/2)kT$; jedoch Effekt der Entartung hier schwach (nur 1. Glied der Entwicklung)

Effekt $\uparrow$ mit $m \downarrow$
$T \downarrow$
$N_0/V \uparrow$

Abkühlung auf 4.2 K:

Verflüssigung; Effekt $\sim$1/7 bei dieser Temperatur

Weitere *Abkühlung* mit $p < p_{\text{Dampf}}$ auf 2.2 K:

$\Rightarrow$ λ-Punkt; Phasenübergang zu He II (nicht von obiger Gleichung beschrieben, Effekte jetzt drastisch):

1) kein weiteres Sieden
2) Wärmeleitfähigkeit steigt um Faktor 10^6
3) Viskosität sinkt um Faktor 10^6 ("superflüssig")
4) Bildung dünner Filme mit $v \approx 30$ cm/s über Gesamtoberfläche des Gefäßes innen *und außen*: "Gefäß läuft aus"

Hier wird wirklich ein hoher *Ordnungszustand* erreicht, in dem der Faktor $(1+n)$ voll wirksam ist. Alle He-Atome befinden sich im niedigsten "Quantenzustand" als makroskopischer Zustand, dem *Bose-Kondensat*. Die Aktion eines einzelnen Atoms ist dabei mit der jedes anderen korreliert.

♠ Hinweis Bilder: Eisberg/Resnik Fig. 11-8 und 11-9 (Photos zu flüssigem He)

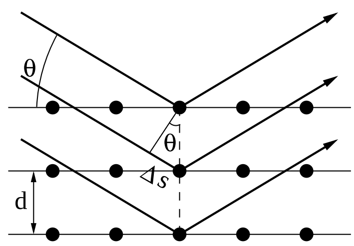
Kapitel 4

Struktur der Materie

4.1 Kristallgitter

In dieser Vorlesung (Physik III) nur angedeutet, in Ergänzung zu 2.4.2, aber nicht wirklich behandelt; siehe Physik V.

Kohärente Streuung von Röntgenstrahlen, Elektronen, Neutronen, etc. an regelmäßig angeordneten Strukturen:



Gangunterschied zwischen benachbarten Strahlen:

$$\Delta s = 2d \sin\theta$$

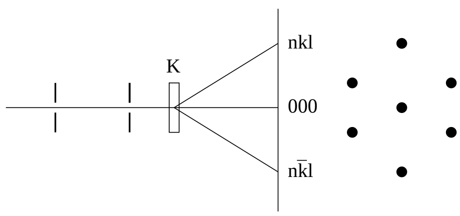
Konstruktive Interferenz für:

$$\boxed{2d \sin\theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, \ldots}$$ *Bragg-Bedingung*

Die Zahl der interferierenden Teilchenstrahlen ist extrem groß ⇒ sehr scharfe Maxima, kaum Intensität in Zwischengebieten.

Verfahren:

1. Laue: ein kontinuierliches Röntgenspektrum strahlt auf einen Kristall



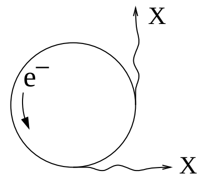
Gitterebenen unter verschiedenen Winkeln zum Strahl orientiert ⇒ geeignete Frequenzen führen zu punktförmigen Reflexen

2. Braggsches Drehkristall-Verfahren: monochromatische Strahlung, Messung der Winkelabhängigkeit der reflektierten Strahlen

3. Debye-Scherrer: monochromatische Strahlung, Mischung von Mikro-Kristallen ⇒ sämtliche Kristall-Orientierungen kommen gleichmäßig in der Probe vor; Reflexe liegen auf Kegelmänteln um die Strahlachse ⇒ konzentrische Kreise bei lokalen Ausschnitten; vergl. Bilder cit. in 2.4.2 (Elektronenbeugung an Kristallgittern).

Anwendungen:

Zwei Haupttypen von Strahlung:



1. Röntgenstrahlung, heute ganz überwiegend in Form von Synchrotronstrahlung aus Elektronen-Synchrotrons; Effektivität der Beugungsexperimente besser bei hohem Z

2. Neutronenstrahlen (z.B. Hochfluss-Reaktoren wie ILL Grenoble, künftig München): Wechselwirkung mit Atomkernen; besonders interessant für leichte Atome wie Wasserstoff

Anwendungen:

Strukturanalyse von Kristallen, Flüssigkeiten, chemischen und biologischen Molekülen etc.

4.2 Räumliche Struktur der Atome: Hülle und Kern

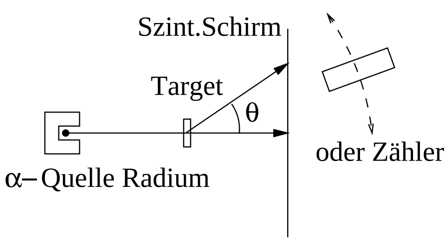
4.2.1 Rutherford - Streuung

Thompson (1897/98): Bestimmung von e/m durch Kanalstrahlen (Ionen) und Kathodenstrahlen (Elektronen), ⇒ $m_{\mathrm{Ion}} \gg m_{el}$; "Plumpudding"-Modell homogen verteilter Ladungen

Lenard, Heidelberg (1903): Streuversuche mit Elektronen an dünnen Metallfolien. Bei langsamen Elektronen: Viel Ablenkung wie für Atomdurchmesser von $10^{-8}cm$. Bei schnellen Elektronen: Ablenkung wie für Atomdurchmesser $10^{-12}cm$. Schlussfolgerung: "Massiver Kern", "viel freier Raum".

Rutherford-Geiger, Marsden: Streuung von α-Teilchen (= He-Atomkernen) an dünnen Au-Folien. Anfänglich Zählen von Lichtblitzen auf Fluoreszensschirm, später nach Erfindung des Zählrohrs durch Geiger viel effektivere Messungen

Versuchsaufbau:

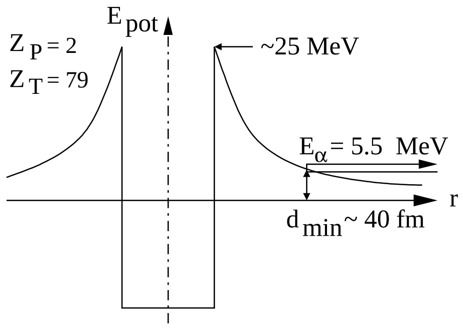


Messung von gestreuter Intensität als Funktion von θ, präziser: des differentiellen Wirkungsquerschnitts $\mathrm{d}\sigma_R/\mathrm{d}\Omega(\theta)$ für Streuung des α-Teilchens durch das Atom

Gründe für Erfolg dieser Experimente und der zugehörigen theoretischen Beschreibung:

- $M_\alpha \gg M_{el}$ (10^4): Ablenkung durch Streuung an Elektronen vernachlässigbar; nur Streuung durch den positiv geladenen Atomkern
- reine „Coulomb-Streuung“ am Atomkern ⇒ zentrales Potential. Die Ausdehnung des Kernes ist nicht relevant, weil der minimale Abstand $d_{min} > R_{\text{Kern}}$ ist (s.u.): Das Potential einer sphärisch symmetrischen Ladungsverteilung ist außerhalb gleich dem einer Punktladung.

  Ladung/Masse für Projektil $Z_P\, e/M_P$, für Targetkern $Z_T\, e/M_T$



Streupotential:

$$E_{\text{pot}}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z_P Z_T e^2}{r}$$

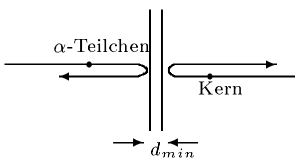
- de-Broglie-Wellenlänge des α-Teilchens

$$\lambda = \frac{h}{mv} \approx 6 \text{ fm } (5.5 \text{ MeV } \alpha\text{-Energie}) \leq \text{Kerndurchmesser} \ll \text{Atomdurchmesser}$$

  ⇒ Das α-Teilchen ist ein gut lokalisiertes Wellenpaket, die „klassische Bahn“ ist eine sinnvolle Vorstellung. Ein reines $1/r$-Potential liefert in jedem Fall für klassische und quantenmechanische Behandlung das gleiche Resultat (sonst wäre Behandlung mit Schrödingergleichung notwendig).

Kurze Skizzierung der theoretischen Behandlung der Rutherford-Streuung wegen grundsätzlicher Bedeutung (Streuung als Hilfsmittel zur Strukturanalyse):

1. Zentraler Stoß im Schwerpunkt-System



In unendlicher Entfernung:

$$E_{kin} = E_{CM} = \frac{1}{2}\mu v^2 = \frac{1}{2}\frac{M_P M_T}{M_P + M_T}v^2 \approx \frac{1}{2}M_P v^2; \quad E_{pot} = 0$$

für $M_T \gg M_P$

am Umkehrpunkt:

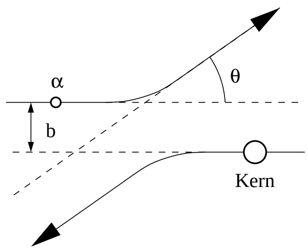
$$E_{kin} = 0; \qquad E_{pot} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z_P Z_T\, e^2}{d_{min}}$$

$$\Rightarrow \qquad d_{min} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z_P Z_T\, e^2}{E_{CM}}; \qquad b = 0$$

Mit $\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\cdot\frac{e^2}{\hbar c} \quad \Rightarrow \quad d_{min} = \alpha\frac{\hbar c}{E_{CM}} Z_P Z_T$

Numerisch: mit $\alpha = 1/137$, $\hbar c = 197$ MeV fm und $E_{CM} = 5.5$ MeV $\quad \Rightarrow \quad d_{min} \approx 40$ fm.

2. Nichtzentraler Stoß im Schwerpunktsystem

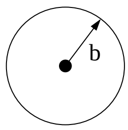


Die Bahnen (Trajektorien), gezeichnet im Schwerpunktsystem, sind *Hyperbeln*, wobei der Kern im Brennpunkt der gegenüberliegenden α-Trajektorie (und umgekehrt) liegt (analog zur Kometenbewegung; auf das Vorzeichen der WW kommt es nicht an). Der Versatz b der asymptotischen Bahnen im ∞ heißt "Stoßparameter".
Aus Energiesatz, Impulssatz und Drehimpulssatz ($\vec{L}$ ist durch b fixiert) erhält man:

$$tan\frac{\theta}{2} = \frac{d_{min}}{2b}$$

(für $b \to 0 \quad tan\frac{\theta}{2} \to \infty, \quad \theta = 180°$ wie 1.)

3. Integraler Wirkungsquerschnitt für Streuwinkel $\geq \theta$



gedachte Fläche transversal zur Flugrichtung des α-Teilchens

$\sigma = \pi\, b^2$=Wirkungsquerschnitt für Stöße mit Stoßparametern $\leq b$, d.h. mit Streuwinkeln zwischen θ und 180°

$$\sigma_R(\geq \theta) = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{d_{min}^2}{\tan^2\dfrac{\theta}{2}}$$

4. Differentieller Wirkungsquerschnitt (für Streuung zwischen θ und $\theta + d\theta$)

Erinnere (siehe 2.2.2): Raumwinkelelement $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$; bei azimutaler Symmetrie (hier gegeben)

$$\int d\varphi = 2\pi \quad \to \quad d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$$

Mit

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{d\sigma_R}{d\theta}\frac{d\theta}{d\Omega}$$

$$\boxed{\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{d_{min}^2}{16}\frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}} = \frac{\alpha^2}{4}\left(\frac{\hbar c}{2E_{CM}}\right)^2 (Z_P Z_T)^2 \frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}}} \quad \text{(nicht-relativistisch)}$$

Alternativ:

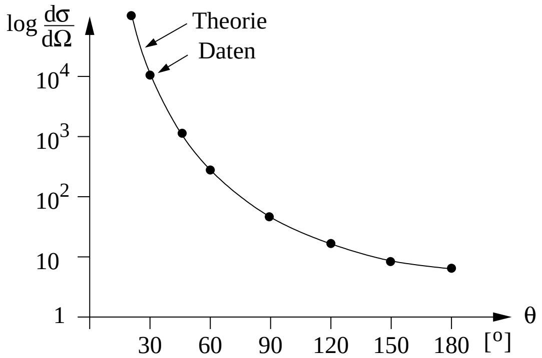
$$\frac{d\sigma_R}{d\cos\theta} = 2\pi\alpha^2\left(\frac{\hbar c}{2E_{CM}}\right)^2 (Z_T Z_P)^2 \frac{1}{(1-\cos\theta)^2}$$

Relativistisch korrekte Formulierung (für Streuung von Elektronen später benötigt):

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{4}\left(\frac{\hbar c}{p \cdot v}\right)^2 (Z_P Z_T)^2 \frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}}$$

Grenzfälle: nicht-relativistisch $pv \to 2E_{cm}$ (s.o.); extrem relativistisch $pv \to pc$

Vergleich mit dem Experiment



Abgesehen von instrumentell bedingten Abweichungen (endliche Blendenöffnung) bei kleinen Winkeln θ exzellente Übereinstimmung mit den Daten über einen dynamischen Bereich von $> 10^4$ in $d\sigma_R/d\Omega$

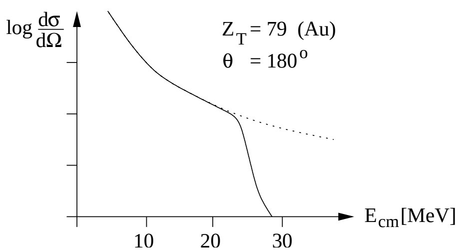
♠ Hinweis Bilder: Rohlf, Originaldaten Geiger et al. (1913) Fig. 6-4 (θ-Abh.), Fig. 6-6 (E_{cm}-Abh.), Fig.6-7 (Z_T-Abh.)

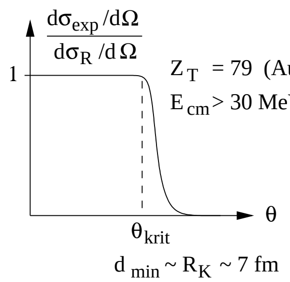
Folgerungen Rutherfords:

- Positive Ladung sowie Masse des Atoms im Kern konzentriert; "Atom leerer als Planetensystem"
- Aus $d\sigma_R/d\Omega \propto Z_T^2$ Bezug zur Ordnungszahl eines Atoms (und damit Bezug zum Moseleyschen Gesetz, s.u.)

Zusatzbemerkungen

- Divergenz von $d\sigma_R/d\Omega$ für kleine θ nur mathematisch. Ist b vergleichbar mit Atomdurchmesser: Kernladung zunehmend abgeschirmt durch Elektronen. Im Grenzfall $b >$ Atomradius geht die streuende Ladung $Z_{T\,\mathrm{eff}} \to 0$. Damit bleibt $d\sigma_R/d\Omega$ auch bei kleinen θ endlich.
- Bei α-Energien > 20 MeV (für $Z > 82$) wird $d_{min} < R_{\mathrm{Kern}}$. Zusätzlich zu den elektrostatischen Kräften treten dann kurzreichweitige Kernkräfte auf, die zu einer Veränderung der Ablenkfunktion $\theta(b)$ führen. Insbesondere kann das α-Teilchen vom Kern absorbiert werden. Dies führt zu einer drastischen Reduktion von $d\sigma_R/d\Omega$ gegenüber der Rutherfordstreuung.





Aus der Abweichung der gemessenen Streuverteilung kann der Radius R_K des Atomkerns abgeschätzt werden. Man erhält daraus, dass die Nukleonen den Kern mit einer konstanten Dichte ausfüllen. Es gilt:

$$R_K \approx r_0 A^{1/3}$$

wobei A die Massenzahl des Atomkerns und $r_0 \approx 1.2 \cdot 10^{-15}$ m ist (s.u.).

4.2.2 Elektronenstreuung und Formfaktoren

Schlussfolgerungen aus 4.2.1:

α-Streuung bei kleinen Energien:

Verifikation des nahezu punktförmigen Atomkerns mit fast der gesamten Atommasse; jedoch keine Aussagen über Struktur des Kerns

α-Streuung bei höheren Energien:

Messung der räumlichen Ausdehnung des Atomkerns; jedoch keine Aussagen über die innere Struktur, insbesondere die Massen- oder Ladungsverteilung, weil die α-Teilchen bereits an der Oberfläche absorbiert werden.

Streuung an ausgedehnten Ladungsverteilungen

Benutzung von Sonden mit nur *schwacher Absorption*, die die ausgedehnte Ladungsverteilung durchdringen können

$\Rightarrow$ **Elektronen** oder Röntgenstrahlung

Voraussetzungen:

1) Transparenz (wie oben definiert)
2) $\lambda \ll$ Dimensionen des Objekts (sonst keine Einzelheiten auflösbar)
3) Beschränkung (hier) auf elastische Streuung

Einheitliches Konzept für Strukturanalyse von Atomen, Atomkernen, Nukleonen, Quarks (s. 4.23 – 4.25); in verwandter Form auch für Festkörper, Moleküle ...

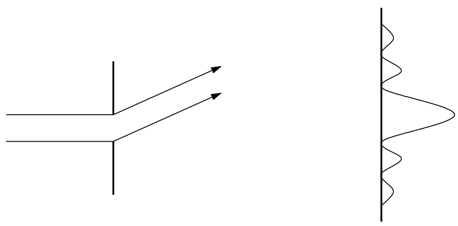
Grundgedanke:

Erweiterung der Streuung an punktförmigen Objekten durch Streuung an ausgedehnten Verteilungen, wobei die einzelnen Streuanteile (von den einzelnen Volumelementen) *kohärent überlagert* werden müssen:

$$P = \left|\sum \psi_i\right|^2 \to \left|\int \ldots\right|^2$$

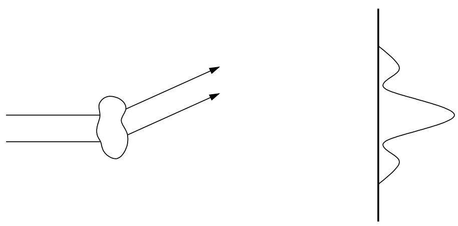
Analogie:

Fraunhofersche Beugung am Spalt (1-dimensional)



$$\begin{pmatrix}\text{Beugungsintensität}\\ \text{auf Schirm im } \infty\end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix}\text{Fouriertransfor-}\\ \text{mierte des Spalts}\end{pmatrix}^2$$

Erweiterung auf 3 Dimensionen und Verallgemeinerung (Beugung $\leftrightarrow$ kohärente Streuung)



$$\begin{pmatrix}\text{Gestreute}\\ \text{Intensität}\\ \text{im } \infty\end{pmatrix} = \text{Punktstreuung} \times \begin{pmatrix}\text{Fouriertrans-}\\ \text{formierte der}\\ \text{räumlichen}\\ \text{Verteilung der}\\ \text{Streuzentren}\end{pmatrix}^2$$

In beiden Fällen *Umkehrung* möglich:

Fouriertransformation des Beugungsbildes bzw. Streumusters:

$\Rightarrow$ Rückschluss auf Struktur des beugenden bzw. streuenden Objekts (Beispiel dazu u.a. auch Holographie)

Plausibler Ansatz:

Streuquerschnitt für kohärente Streuung an den einzelnen Teilen einer Ladungsverteilung

$$\boxed{\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{coh}} = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{Punkt}} \cdot |F(q)|^2}$$

Dabei entspricht $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\mathrm{Punkt}}$ für Elektronen der Rutherfordstreuung an einer punktförmigen Ladung, allerdings modifiziert bezüglich Spin 1/2 sowie Effekten des magnetischen Moments und des Rückstoßes auf das streuende Objekt $\Rightarrow$ **"Mottstreuung"** (s. 4.2.4). Bei Röntgenstrahlung steht hier die Thompson-Streuung (s.u.).

Die Größe $|F(q)|^2$ ist das Quadrat des (**elektrischen**) **Formfaktors**, definiert durch

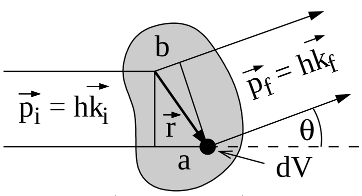
$$\boxed{|F(q)|^2 = \left|\frac{1}{e}\underbrace{\int \varrho(\vec{r})\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,\mathrm{d}V}_{\text{Ortsraum}}\right|^2 \leq Z^2} \quad \text{Formfaktor}$$

Dabei ist $\varrho(\vec{r})$ die räumliche Dichte der Ladungsverteilung, also

$$\frac{1}{e}\varrho(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 \quad \text{mit} \quad \frac{1}{e}\int_0^\infty \varrho(\vec{r})\mathrm{d}V = Z$$

Sie spiegelt mit $|\psi(\vec{r})|^2$ die gesamte Wahrscheinlichkeitsdichte der streuenden Verteilung wider; in einem Atom bzw. Atomkern ergibt die Normierung gerade Z Elektronen (im Atom) bzw. Z Protonen (im Kern).

Der Faktor $e^{i\varphi}$ mit $\varphi = (i/\hbar)\vec{q}\cdot\vec{r}$ beschreibt den Gangunterschied von de-Broglie-Wellen zwischen den einzelnen Volumelementen $\mathrm{d}V$:



mit $a = \frac{\vec{k}_i}{k_i}\vec{r}, \quad b = \frac{\vec{k}_f}{k_f}\vec{r}$

Gangunterschied $1 \leftrightarrow 2$

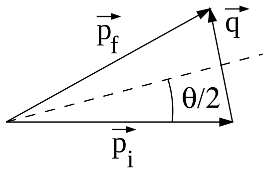
$$\begin{aligned} \Delta\varphi_{12} = \varphi &= 2\pi\left(\frac{b}{\lambda_f} - \frac{a}{\lambda_i}\right) \\ &= k_f b - k_i a \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi &= (\vec{k}_f - \vec{k}_i)\vec{r} \\ &= \frac{1}{\hbar}(\vec{p}_f - \vec{p}_i)\vec{r} \\ &= \frac{1}{\hbar}\vec{q}\vec{r} \end{aligned}$$

Der **Impulsübertrag**

$$\boxed{\vec{q} = \vec{p}_f - \vec{p}_i}$$

ist der entscheidende Parameter des Streuproblems. Für den hier allein betrachteten Fall der *elastischen* Streuung gilt



$$|\vec{p}_i| = |\vec{p}_f| = p$$

$$\boxed{q = 2p\sin\theta/2}$$

wobei p der Teilchenimpuls, θ der Streuwinkel ist.

Insgesamt ist damit der Ausdruck für den Formfaktor plausibel: Er beschreibt das Entstehen der Streuung (= Beugung) als Summation (= Integral) der Beiträge der einzelnen Streuzentren unter Berücksichtigung ihrer Phasendifferenzen φ.

Die strenge Ableitung erfolgt aus der Schrödingergleichung in der Näherung ebener Wellen ("Bornsche Näherung"). Man kann aber das Resultat, wie hier beschrieben, als Fraunhofersche Beugung (Bild im ∞, d.h. ebene Wellen) an einem 3-dimensionalen Objekt auffassen und es so plausibel machen.

Die außerordentliche Bedeutung des Konzepts liegt, wie schon vorher erwähnt, in der Möglichkeit der *Umkehrung*.

Wegen $\varphi = (\vec{k}_f - \vec{k}_i)\vec{r}$ kann man auch interpretieren

$$\boxed{\text{Formfaktor} = \text{Fouriertransformierte der Ladungsverteilung}}$$

Es gilt daher in Umkehrung

$$\boxed{\varrho(\vec{r}) = \frac{e}{(2\pi\hbar)^3}\underbrace{\int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,F(\vec{q})\,\mathrm{d}^3\vec{q}}_{\text{Impulsraum}}}$$

$$\boxed{\text{Ladungsverteilung} = \text{Fouriertransformierte des Formfaktors}}$$

Durch Messung von $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\mathrm{coh}}$ als Funktion von θ (p ist bekannt) erhält man $F^2(q)$ experimentell, und durch anschließende Fourier-Transformation läßt sich $\varrho(\vec{r})$ als experimentelle Messgröße ermitteln.

Sonderfall: *sphärische Symmetrie*, d.h. $\varrho(\vec{r}) = \varrho(r)$ (gegeben in Atomen, spärischen Kernen, Nukleonen); Ableitung s. Literatur

$$\boxed{|F(q)|^2 = \left|\frac{1}{e}\int_{r=0}^{\infty}\frac{\sin(qr/\hbar)}{(qr/\hbar)}\varrho(r)4\pi r^2\mathrm{d}r\right|^2}$$

Schwierigkeit in der Praxis oft: keine ausreichende statistische Genauigkeit bis zu sehr hohen q, entsprechend feinen räumlichen Details.

Dann immer noch verfügbare Mindestinformation aus Entwicklung von $|F(q)|^2$ nach Potenzen von $x = (qr/\hbar)$ für kleine x:

$$\boxed{|F(q)|^2 \approx Z^2 \left(1 - \frac{q^2}{3\hbar^2}\langle r^2\rangle + \dots\right)} \qquad \frac{q^2\langle r^2\rangle}{\hbar^2} \ll 1$$

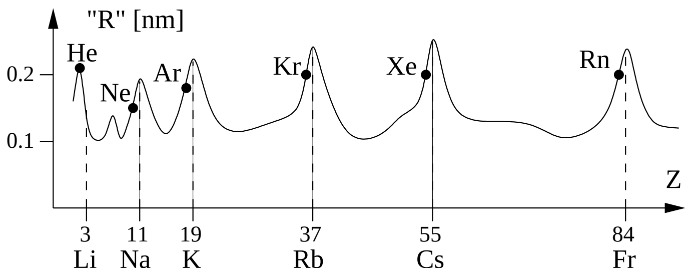
wobei $$\langle r^2\rangle = \frac{\int r^2 \varrho(r)\mathrm{d}r}{\int \varrho(r)\mathrm{d}r}$$ "mittlerer quadratischer Radius" der streuenden Ladungverteilung

4.2.3 Struktur der Elektronenhülle

Die Ausdehnung der Hülle kann aus einer Reihe von Beobachtungen entnommen werden:

1. Abstände von Atomen in Festkörpern oder Flüssigkeiten (aus Dichte und N_A)
2. Co-Volumen in der van-der-Waals-Gleichung
3. Wirkungsquerschnitte für Streuung mit Atomen und ihre v-Abhängigkeit
4. Messungen von $\langle r^2\rangle$ oder von vollständigen Formfaktoren durch elastische Röntgen- oder Elektronenstreuung

Qualitative Diskussion der Ausdehnung (aus 1.)



- Schalen-Struktur, Maxima bei Alkaliatomen
- *im Mittel* nahezu Z-unabhängig innerhalb Faktor <2; Deutung s.u. (ganz anders als bei Atomkernen, s. 4.24)

Messung von Formfaktoren

a) Messung von $\langle \mathbf{r^2}\rangle$ durch Röntgenstreuung (kleine Winkel)

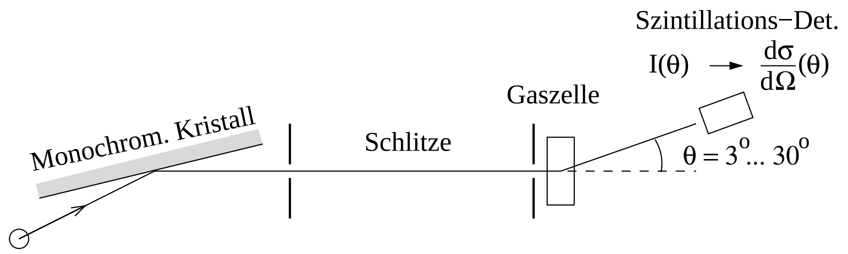
$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\text{Punkt}} \cdot F^2(q)$$

Punktstreuung hier: Thompsonstreuung (s. 2.2.2)

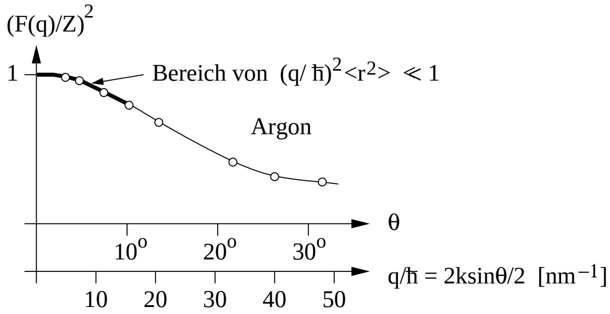
$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\text{Punkt}} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + \cos^2\theta)$$

Beispiel Edelgase: Chipman und Jennings, Phys. Rev. 132, 728 (1963)

Mo K_α-Strahlung $\quad h\nu = 17.5$ keV, $\quad \lambda = 0.07$ nm, $\quad k = 90\ \mathrm{nm}^{-1}$:



Apparatur für Röntgenstreuung



Näherungsbereich $\theta \leq 10°$:

$$\left(\frac{F(q)}{Z}\right)^2 = 1 - \frac{q^2\langle r^2\rangle}{3\hbar^2} + \dots$$

Resultat für $\langle r^2\rangle^{1/2}$ verschiedener Edelgase:

Edelgas	Ne	Ar	Kr	Xe
$\langle r^2\rangle^{1/2}$ [nm]	0.051	0.064	0.055	0.056

Folgerung erneut: $\langle r^2\rangle^{1/2}$ nahezu Z-unabhängig

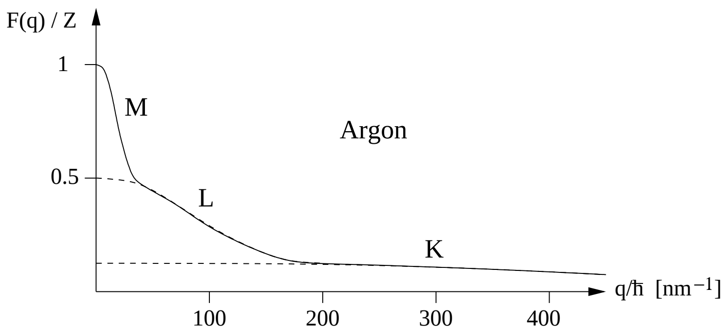
b) Messung von $\rho(\mathbf{r})$ durch Elektronenstreuung

Beispiel Argon: Bartell und Brockway, Phys. Rev. 90, 833 (1953)

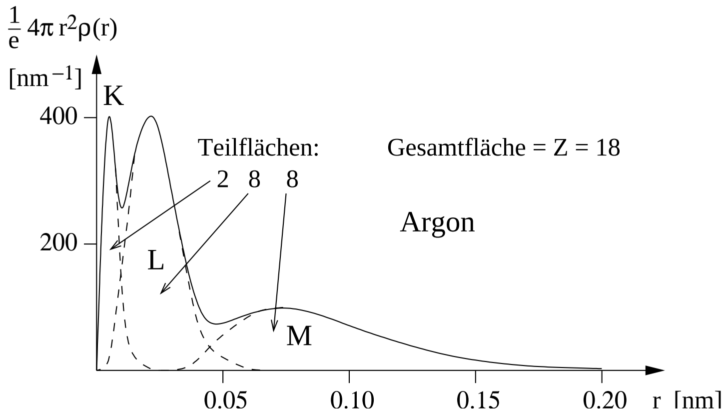
$E_e = 40$ keV, $\lambda = 0.006$ nm, $k = 1050$ nm^{-1}

Wegen viel kleinerer Wellenlänge als bei a) Messungen bei größeren q möglich; dadurch Auflösung viel feinerer Details

Resultat für $F(q)$:



Resultat für $\varrho(r)$ aus Fouriertransformation von $F(q)$:



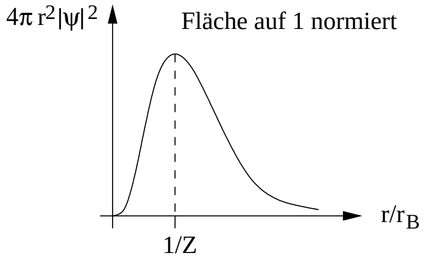
♠ Hinweis Bilder: obige Referenz, Fig. 2 ($\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ vs. q), Fig. 4 ($F(q)$ vs. q)

Résumée der Messungen von $F(q)$ bis zu hinreichend hohem q:

Die gesamte Struktur der einzelnen Elektronenschalen $n = 1$(K), $n = 2$(L), $n = 3$(M) im Argon-Atom wird aufgelöst; direkter Zugang zu den "verschmierten" $|\psi(r)|^2$

Genaueres zur theoretischen Beschreibung der Struktur der Hülle s. 4.3, speziell 4.3.2. Im Vorgriff auf die dortigen Resultate:

Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ für ein Elektron in der K-Schale eines Atoms mit Ordnungszahl Z:

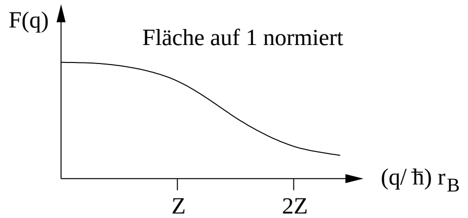


$$|\psi(r)|^2 = \frac{1}{e}\varrho(r) \propto \left(e^{-Z\cdot r/r_B}\right)^2$$

$$\text{mit } r_B = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar c}{m_e c^2} = 0.053 \text{ nm}$$

(Bohrscher Radius)

Fouriertransformierte von $|\psi|^2$ (für ein Elektron in der K-Schale)



$$F(q) \propto \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{q}{\hbar}\frac{r_B}{2Z}\right)^2\right)^2}$$

Z-Abhängigkeiten: Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ "schrumpft" mit $1/Z$; Formfaktor $F(q)$, interpretierbar als *Impulsverteilung des Elektrons im gebundenen Zustand*, expandiert mit Z, d.h. wird "härter".

Im Mehrelektronensystem expandieren die Schalen annähernd mit n^2 (s. 4.3.2), gleichzeitig wird wegen Abschirmung der Kernladung durch die inneren Schalen für die weiter außen liegenden Schalen $Z_{\text{eff}} < Z_{\text{Kern}}$, so dass die Schrumpfung mit Z weniger stark erfolgt; insgesamt kompensieren sich diese Effekte derart, dass die *äußere Dimension der Atome nicht sehr stark von Z abhängt* (s.o.)

In Mehrelektronensystemen keine einfachen analytischen Gleichungen für die äußeren Elektronen angebbar. Stattdessen: "selbstkonsistentes Potential", "Hartree-Fock"-Rechnungen

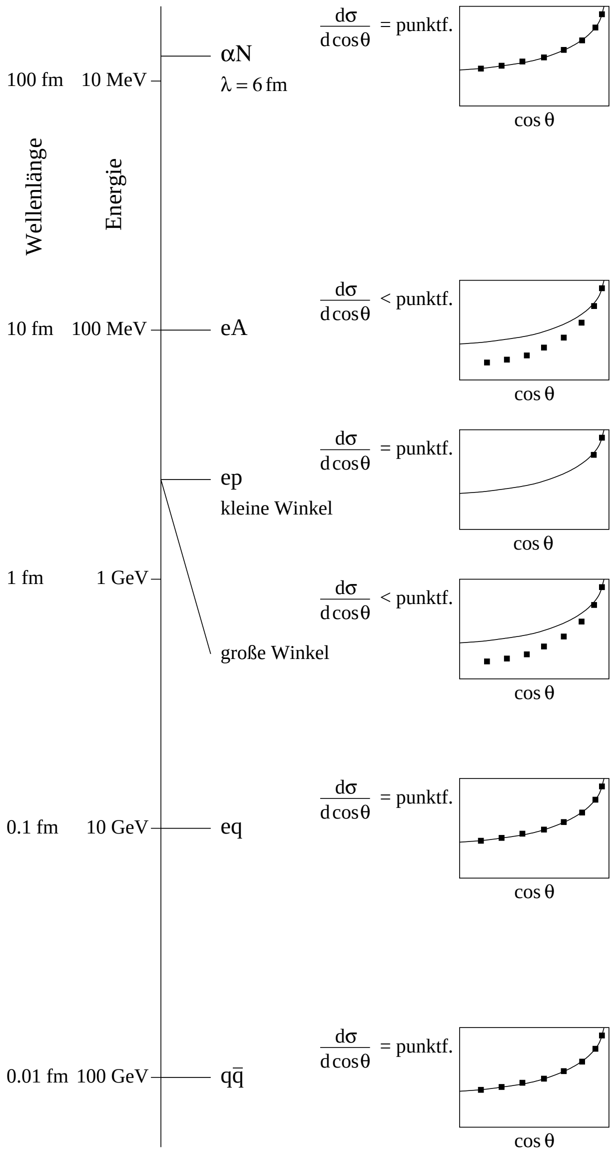
♠ Hinweis Bild: Ref. wie vorher, Fig. 5 (Vergleich von Daten für $\varrho(r)$ mit Hartree-Rechnungen)

4.2.4 Struktur der Atomkerne, Nukleonen und Quarks

Empfohlene Zusatzlektüre für dieses (schwierige) Kapitel: Rohlf, “Modern Physics”; bei weitergehenden Ansprüchen: Perkins, “High Energy Physics”

Atomkerne sind nicht punktförmig, sondern aus Nukleonen (Protonen und Neutronen) zusammengesetzt. Nukleonen sind ebenfalls nicht punktförmig, sondern aus Quarks und Gluonen zusammengesetzt. Quarks erscheinen nach heutigem Kenntnisstand – wie auch Leptonen – punktförmig, doch wird auch hier über eine Zusammensetzung (“Leptoquarks”) spekuliert.

Hierarchie-Schema der aufgelösten Strukturen in stark-wechselwirkenden Systemen, abhängig von der Energie, d.h. der Wellenlänge der in Streuexperimenten benutzten Teilchen, vorwiegend *Elektronen* (angelehnt an Rohlf, Fig. 6-23)



α-Kern elastische Streuung
bei kleinen Energien $d_{\min} > R_K$; unempfindlich auf Ausdehnung des Atomkerns. Historisch: Entdeckung des Kerns

e-Kern elastische Streuung
Atomkern hat endliche Ausdehnung und interne Strukur

e-Proton elastische Streuung
bei kleinen Winkeln, d.h. kleinen q unempfindlich auf Ausdehnung

e-Proton elastische Streuung
bei großen q empfindlich: Proton hat endliche Ausdehnung und interne Struktur

e-Quark elastische Streuung
(“Tief-”) inelastische e-Proton Streuung kann als elastische Streuung an Quarks interpretiert werden. Historisch: Entdeckung der Quarks

Quark-Antiquark elastische Streuung
Ausdehnung der Quarks ≤ 0.001 fm $= 10^{-18}$ m

Merkregel für Auflösung feiner Strukturen (relativistische Teilchen)

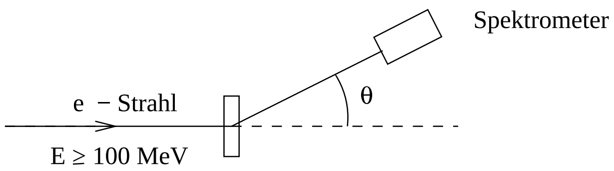
$$\lambda = 2\pi\frac{\hbar}{p} = 2\pi\frac{\hbar c}{E} = \frac{1.24}{E\,[\mathrm{GeV}]}\ [\mathrm{fm}] \quad < \quad \text{Struktur}$$

Falls mehr als die bloße Abmessung R gemessen werden soll, erfordert dies wegen $q < p$ verschärft (s. 4.22, 4.23)

$$\frac{qR}{\hbar} \gg 1$$

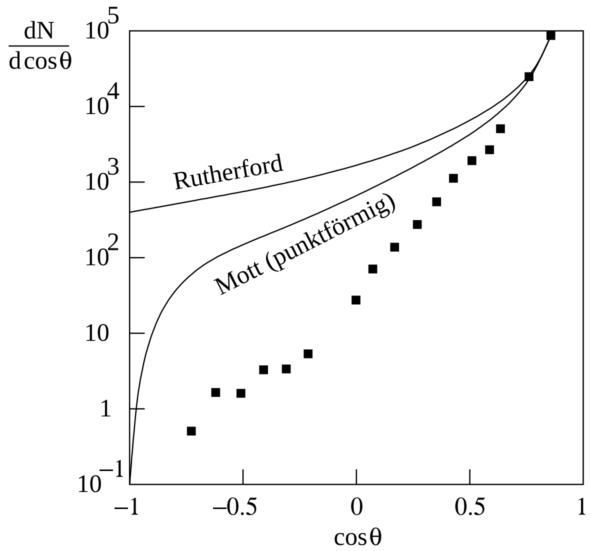
1. Messung von $\rho(\mathbf{r})$ von Atomkernen durch Elektronenstreuung

Prinzipieller experimenteller Aufbau



Das (üblicherweise magnetische) Spektrometer misst präzise die Energie der gestreuten Elektronen und erlaubt, die elastische Streuung von der inlastischen zu separieren.

1. Beispiel: **125 MeV e$^-$ an Au** (Hofstadter 1953)



$\rho(r)$ aus

$$F^2(q) = \frac{\left(\dfrac{d\sigma}{d(\cos\theta)}\right)_{\text{exp}}}{\left(\dfrac{d\sigma}{d(\cos\theta)}\right)_{\text{Mott}}}$$

Der Faktor Z^2 wird hier üblicherweise in $(d\sigma/d\cos\theta)_R \propto Z_T^2$ absorbiert, so dass $F^2(q) \leq 1$

Der genaue punktförmige Streuquerschnitt für Elektronen ist die

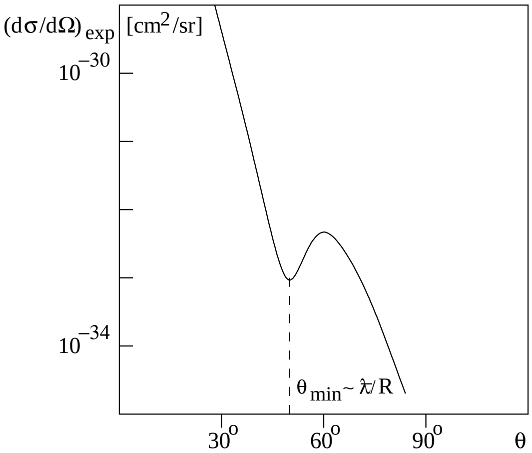
Mottstreuung

$$\left(\frac{d\sigma}{d(\cos\theta)}\right)_{\text{Mott}} = \left(\frac{d\sigma}{d(\cos\theta)}\right)_R \cdot \frac{1+\cos\theta}{2} \cdot \frac{1}{1 + \dfrac{(1+\cos\theta)}{M_K c^2} E_e}$$

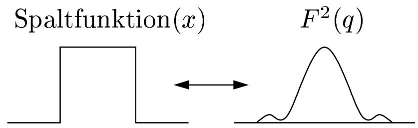
bei der die Rutherford-Streuung (Hauptterm) noch auf den Einfluss des magnetischen Moments des Elektrons (mittlerer Term, $\to 1$ für kleine θ, $\to 0$ für $\theta \to 180°$) und den Kernrückstoß (letzter Term, $\approx$1 bis zu GeV-Energien) korrigiert wird.

♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 6-13 (Originaldaten Hofstadter)

2. Beispiel: **450 MeV e$^-$ an ^{12}C** (Hofstadter 1957)



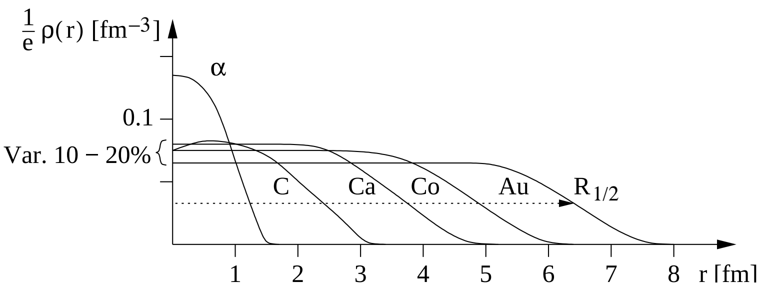
Hier kleinere Wellenlänge als im 1. Beispiel Minimum in $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)$ wegen destruktiver Interferenz der abbildenden Elektron-(de-Broglie)-Wellen. Analogie:



(Die Dichteverteilung in Kernen ist eine relativ scharf definierte Kugel, s.u.)

♠ Hinweis Bilder: Povh, "Teilchen und Kerne", Figs. 5.5 und 5.7 ($\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ mit mehreren Diffraktionsminima)

Resultate für $\rho(\mathbf{r})$ aus Fourier-Transformation von $F(q)$:



Zentrale Ladungsdichte getragen von den Protonen des Kerns

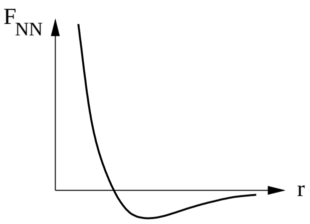
$$\rho \approx const$$

Die Nukleonendichte, getragen von den Protonen *und Neutronen*, ist nahezu exakt konstant

$$n_{\text{nucleon}} = 0.16 \text{ fm}^{-3}$$

Die Protonendichte $n_p = \rho$ variiert im wesentlichen mit dem Verhältnis Z/A der Atomkerne: $\rho = 0.16Z/A$. Die Größe Z/A ändert sich von 0.5 bei leichten Kernen bis $\sim$0.4 bei schweren.

Deutung der konstanten Dichte:



Die Nukleon-Nukleon-Kräfte haben als Funktion des Abstandes einen attraktiven Teil, der die Kerne bindet, und einen repulsiven Teil, der lokal sättigt:

$\Rightarrow$ konstanter mittlerer Abstand der Nukleonen

$\Rightarrow$ konstante Dichte

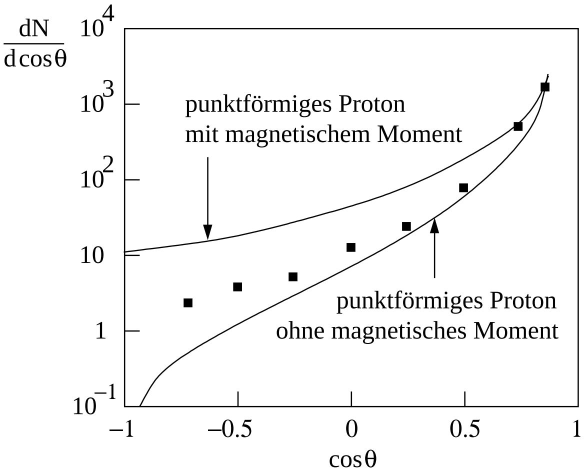
Konsequenz der konstanten Dichte (s. auch Abweichungen von der Rutherfordstreuung für α-Teilchen in 4.21):

$$R_K \approx R_{1/2} \approx r_0 A^{1/3} \quad \text{mit} \quad r_0 = 1.2 \text{ fm}$$

Atomkerne und Atomhülle verhalten sich somit als Funktion der Zahl der Konstituenten ganz unterschiedlich: Atomkerne werden monoton größer wegen der Sättigung (Kurzreichweitigkeit) der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung; Atomhüllen bleiben etwa gleich groß und füllen sich durch zunehmende Elektronen*dichte* (Langreichweitigkeit der elektromagnetischen Wechselwirkung).

2. Messung von $\rho(\mathbf{r})$ von Protonen durch Elektronenstreuung

1. Beispiel: **550 MeV $\mathbf{e^-}$ an p (als $\mathbf{H_2}$)** (Hofstadter 1956)



Verkomplizierung:

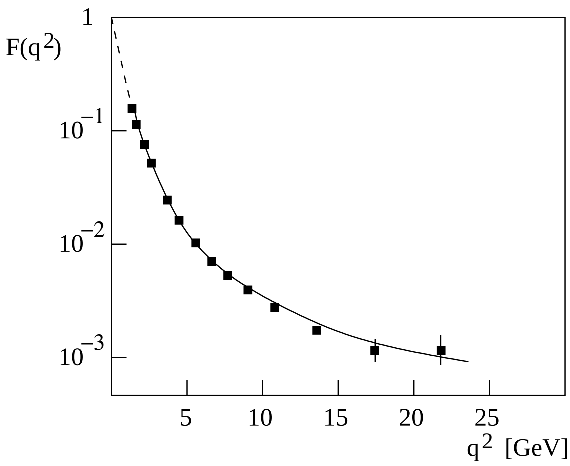
Punktförmige Mottstreuung an der Ladung des Protons *unterschätzt* den Wirkungsquerschnitt!

Notwendige Ergänzung:

Streuung zusätzlich durch Wechselwirkung mit dem *magnetischen Moment* des Protons. Erst dann Daten *unterhalb* der Punktstreuung

Folgerung: $|F(q)|^2 < 1$; Protonen haben eine endliche Ausdehnung

2. Beispiel: **$\mathbf{e^-}$ bis 16 GeV an p (als $\mathbf{H_2}$)** (Panofski 1968)



Der Formfaktor ist dominiert durch den magnetischen Anteil (s. 1. Beispiel). Das magnetische Moment des Protons hat eine räumliche Dichteverteilung, die weitgehend mit der elektrischen Ladungsverteilung $\rho(r)$ übereinstimmt.
Der steile Abfall mit q zeigt eine extreme Unterdrückung der elastischen Streuung bei hohen q. Stattdessen dominiert die elastische Streuung an einzelnen Quarks (s.u.)

Resultat für $\rho(\mathbf{r})$ aus Fourier-Transformation von $F(q)$:

$$\rho = \rho_0 e^{-c \cdot r}$$

Zu dieser exponentiellen r-Abhängigkeit bis heute keine theoretische Modellvorstellung

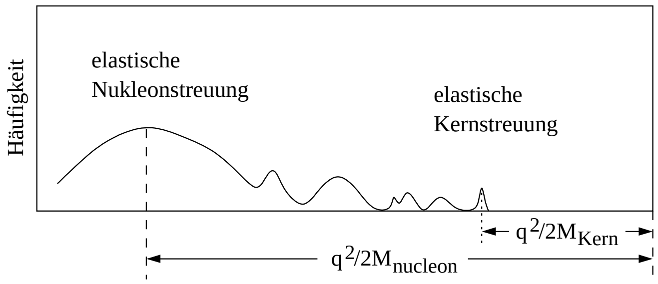
Numerisch: $\left\langle R_p^2 \right\rangle^{1/2} = 0.8$ fm

Abschlussbemerkung: Die Pionierexperimente zur elastischen Elektronenstreuung an Kernen und Nukleonen gehen auf R. Hofstadter in Stanford zurück; Nobelpreis dafür 1961

♠ Hinweis Bilder: Rohlf Fig. 6-16 (Daten Hofstadter); Perkins Fig. 5.9 (4. Auflage 2000); Figs. 7.9, 7.10 (2. Auflage 1982); Povh Fig. 6.2

3. Quark-Struktur von Protonen aus "tief"-inelastischer Elektronenstreuung

Analogie:



Elektron-Kern-Streuung

$$\frac{q}{\hbar} R_K \gg 1$$

Energiespektrum der gestreuten Elektronen

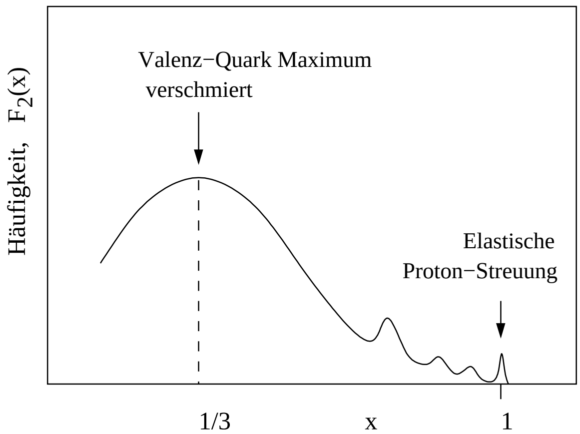
Scharfes Maximum im Wirkungsquerschnitt für Energieverlust $q^2/2M_K$:
elastische e-Kern-Streuung; für $(q/\hbar)R_K \gg 1$ massiv unterdrückt, d.h. $F(q) \ll 1$ (s.o.)

Breites Maximum im Wirkungsquerschnitt für Energieverlust $q^2/2M_{\text{nucleon}}$
quasi-elastische Streuung an individuellen *Nukleonen* für $(q/\hbar)R_K \gg 1$ stark favorisiert ("inelastisch" bezüglich des Bezugsystems Elektron-Kern). Starke Verbreiterung des Maximums infolge Fermibewegung der Nukleonen innerhalb des Kerns.

Resultat: Bei größeren q bessere räumliche Auflösung; "man sieht" die Nukleonen und weniger den Kern.

Tief-inelastische Elektron-Proton-Streuung

Beispiel: **10 GeV e^- an p (als H_2)** (Freedman, Kendall und Taylor, in den 60ern; Nobelpreis 1990)



Elektron-Proton-Streuung

$$\frac{q}{\hbar} R_p \gg 1$$

Energiespektrum der gestreuten Elektronen in Form der "Strukturfunktion" $F_2(x)$ Abszisse:

$$x = \frac{q^2}{2M_p \nu} = \frac{EE'(1-\cos\theta)}{(E-E')M_p c^2}$$

mit $\nu = E - E'$ (Energieverlust des gestreuten Elektrons)

Scharfes Maximum im Wirkungsquerschnitt für $x = 1$, d.h. Energieverlust $\nu = q^2/2M_p$:

elastische e-Proton-Streuung; für $(q/\hbar)R_p \gg 1$ massiv unterdrückt, d.h. $F(q) \ll 1$ (s.o.)

Breites Maximum im Wirkungsquerschnitt für $x \approx 1/3$, d.h. Energieverlust $\nu = 3q^2/2M_p$:

quasi-elastische Streuung an *Quarks*, d.h. den punktförmigen Konstitutenten des Protons, für $(q/\hbar)R_p \gg 1$ stark favorisiert ("tief"-inelastisch bezüglich des Bezugssystems Elektron-Proton). Starke Verbreiterung des Maximums infolge Fermibewegung der Quarks innerhalb des Protons.

Resultat: Bei größeren q "sieht man" die anscheinend punktförmigen Quarks und weniger das Proton. Die Variable x wird als anteilige (bewegte!) Masse der Quarks bezüglich der Gesamtmasse des Protons interpretiert ($\sim$1/3). Die x-Verteilung ist fast unabhängig vom Wert der Variablen, aus denen x gebildet wird: der Strahlenergie E, dem Streuwinkel θ, insbesondere dem Impulstransfer q ("Skalenverhalten").

♠ Hinweis Bilder: Perkins Figs, 7.13 und 7.16 (2. Auflage 1982)

4. Substruktur der Quarks?

Tief-inelastische Elektronstreuung bei 10 GeV (s. 3.):

Entdeckung der Quark-Substruktur im Proton
Streuverhalten der Quarks "semi-quantitativ" wie das punktförmiger Teilchen

Tief-inelastische Elektronstreuung bei $\gg$ 10 GeV:

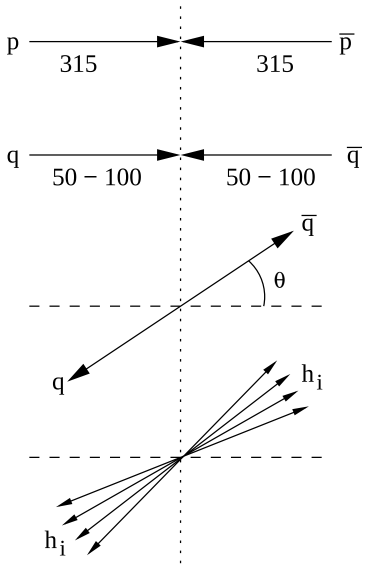
Potentiell Test auf punktförmige Quarks
Gegebenenfalls Messung von "Quark-Formfaktoren"

Extremfall e-Proton-Collider HERA bei DESY in Hamburg:
28 GeV e$^-$ auf 820 GeV p $\Rightarrow$ Schwerpunktsenergie $2\sqrt{E_1 E_2} = 300$ GeV
Impulsüberträge bis $q = 150$ GeV/c (!) zugänglich
Stand Januar 2003: kein Hinweis auf Abweichung von Punktstruktur

Alternative: **Elastische Quark-Antiquark-Streuung aus Proton-Antiproton-Stößen**

Grundidee: p enthält 3 Quarks: uud
$\bar{\text{p}}$ enthält 3 Antiquarks: $\bar{u}\bar{u}\bar{d}$

Stoß p$\bar{\text{p}}$ äquivalent zu Stößen $q\bar{q}$ (verschiedene Kombinationen möglich)



p$\bar{\text{p}}$-Stoß (CERN SP$\bar{\text{P}}$S Collider, Energien in GeV)

q$\bar{\text{q}}$-Stoß (einlaufend)
(nur 1/6 bis 1/3 der Proton-Energie in Quarks)

q$\bar{\text{q}}$-Stoß (auslaufend)
(*elastisch* in deren CM-System!)

q nicht frei existent ("Confinement")
Fragmentierung der Quarks in 2 Jets von Hadronen h_i
Rekonstruktion der Quarkimpulse
Rekonstruktion der q$\bar{\text{q}}$-Energie in deren CM-System

Streuung Quark-Antiquark exakt wie *Rutherford-Streuung* (s. 4.21)

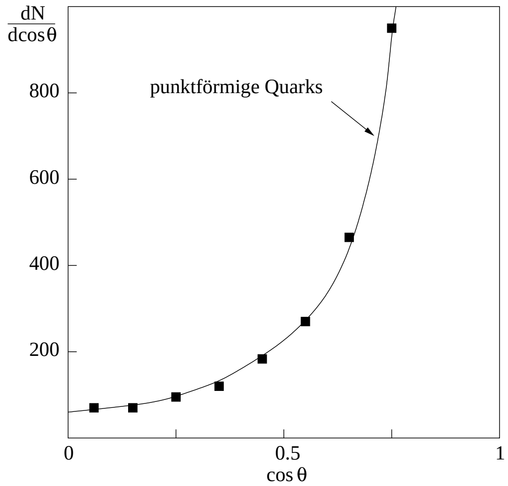
$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}(\cos\theta)} \propto \alpha_s^2 \frac{1}{s} \frac{1}{(1-\cos\theta)^2} \qquad s = E_{cm}^2$$

Jedoch: hier *starke*, nicht elektromagnetische *Wechselwirkung*

$$\Rightarrow \qquad \alpha = \alpha_{\text{em}} = 1/137 \quad \text{durch} \quad \alpha_s \quad \text{zu ersetzen}$$

Numerisch: $\alpha_s \approx 0.1$ für 100 GeV Quarks

Beispiel: **$\mathbf{p\bar{p}}$-Stöße bei $\mathbf{E_{cm} = 630}$ GeV** (Experiment UA1, Rubbia et al., 1986)



Rutherford-Streuung von Quarks (und Gluonen)

Perfekte Übereinstimmung von Daten und Theorie ($\propto 1/(1-\cos\theta)^2$)

Resultat: Quarks punktförmig bis zu Stoßenergien von $>$ 100 GeV, äquivalent einer Grenze für die räumliche Ausdehnung von $\leq 10^{-18}$ m

Zukunftsperspektive:

2007: pp-Collider LHC am CERN mit $E_{cm} = 14$ TeV $\Rightarrow$ Test der Punktförmigkeit bis einige 10^{-20} m

4.3 Energetische Struktur der Atome

4.3.1 Gequantelte Energiezustände

Mikroskopische Systeme, die zusammengesetzt sind, also eine Substruktur aus i.A. "kleineren" Bestandteilen besitzen (Moleküle, Atome, Atomkerne, Hadronen wie Nukleonen) haben über ihre Grundzustände hinaus angeregte (quasi-) stationäre Zustände. Die Zustände sind *diskret*, d.h. *gequantelt*, können bei höheren Anregungsenergien aber auch nahezu kontinuierlich verteilt sein.

Historische Entwicklung:

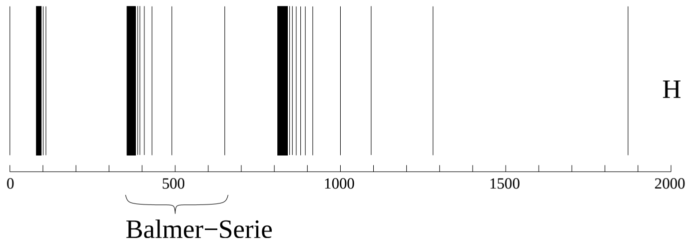
Linienspektren von Atomen

Emission diskreter Spektrallinien, charakteristisch für das jeweilige Element, seit >200 Jahren bekannt.

1814 Fraunhofersche Linien als *Absorptions*-Linien im ansonsten kontinuerlichen Schwarzkörperspektrum der Sonne.

1860 ff. Begründung der systematischen "Spektralanalyse" durch Kirchhoff und Bunsen in Heidelberg: viele Hinweise auf direkten Zusammenhang von charakteristischen diskreten Emissions- und Absorptionslinien mit den jeweiligen Atomen. Vor 1900 bereits einige 10^4 Linien bekannt und katalogisiert.

1885 Balmer erkennt Regularitäten im H-Spektrum:



$$\frac{1}{\lambda} = C\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

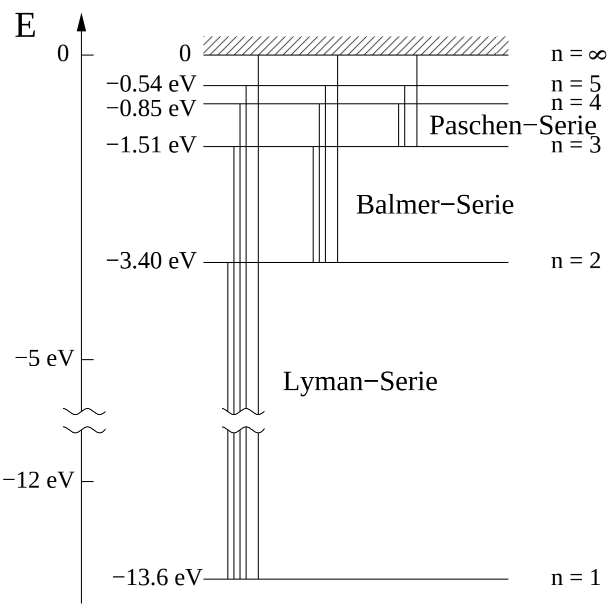
$m, n > m$ ganzzahlig

"Balmer-Serie" im Sichtbaren: $m = 2, n = 3, 4, \ldots$

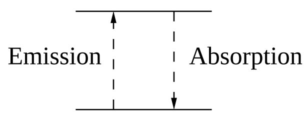
Vorhersage aller Serien (eine für jedes m) mit jeweils unendlich vielen Linien. Verallgemeinerung auf andere Atome durch Ritz und Rydberg. C = "Rydbergkonstante" $Ry = 1.09677576 \cdot 10^7$ m^{-1} für Wasserstoff

1913 **Bohrsches Atommodell**, angeregt durch Rutherford (Hülle $\leftrightarrow$ punktförmiger Atomkern) und Balmers Regularitäten $\Rightarrow$ ad-hoc Postulat der *Drehimpulsquantelung* als Ursache *diskreter angeregter Energiezustände* der Elektronenhülle (Nobelpreis 1922)

Beipiel: **Termschema H-Atom**



Die Spektrallinien erscheinen als Übergänge zwischen den diskreten Energiezustände des Atoms



Übergangsenergie

$$\Delta E = |E_n - E_m| = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

"Spektroskopie" mikroskopischer Systeme = Ermittlung der diskreten Energiezustände und der zugehörigen Quantenzahlen (s.u.) In komplizierten Spektren: Ritzsches Kombinationsverfahren

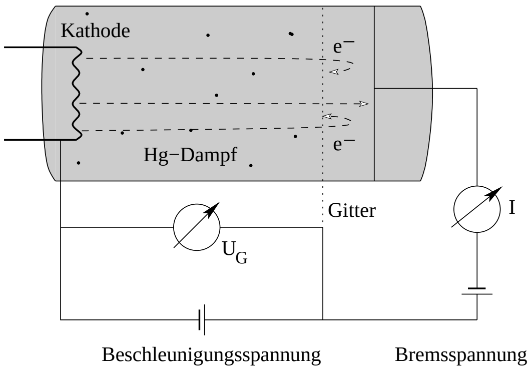
Hinweis und Erinnerung (s. 2.8.3): alle angeregten Zustände mit endlicher Lebensdauer τ sind nur "quasi"-stationär, d.h. nicht beliebig scharf definiert, sondern unterliegen der Unschärfe-Relation mit

$$\Delta E \cdot \tau \approx \hbar = 6.6 \cdot 10^{-16} \text{ [eV s]}$$

Im H-Atom: $\tau \sim 10^{-8}$ s $\quad \Rightarrow \quad \Delta E/E \sim 10^{-8}$

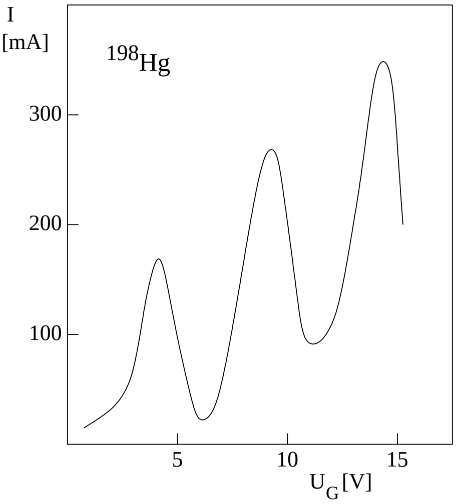
1914 Angeregt durch Bohrsches Atommodell, Experiment von Franck und Hertz (Nobelpreis 1925):

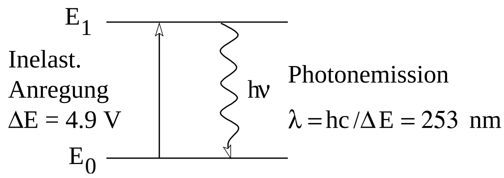
Inelastische Elektronenstreuung an Hg-Atomen



Beschleunigung der Elektronen zwischen Kathode und Gitter; Endenergie eU_G. Kleine Gegenspannung von ca. 1.5 V zwischen Gitter und Anode. Messgröße I als Funktion von U_G

Resultat:





Stromzunahme mit U_g, bis $eU_G = 4.9$ eV, dann resonante Anregung der Hg-Atome. Verbleibende Elektronenenergie unzureichend, um Gegenspannung zu überwinden $\Rightarrow$ Stromabnahme. Periodische Wiederholung bei $2 \cdot 4.9$ eV ... etc.

Bemerkernswert: $\lambda = 253$ nm ist die intensivste Linie im gesamten (komplizierten) Hg-Spektrum. Beweis der Abstrahlung dieser Linie als Folge der Anregung mit Elektronen ebenfalls durch Franck und Hertz.

Moderne Varianten in Atomphysik, Kernphysik etc.: Inelastische Streuung von Elektronen oder anderen Sonden; Messung der Spektren der gestreuten Teilchen mit präzisen Spektrometern

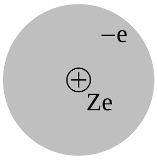
♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 3.16 (Originaldaten Franck und Hertz 1914)

4.3.2 Schrödinger-Lösung für Ein-Elektron-Systeme und Drehimpuls-Quantelung

Trotz gewisser numerischer Erfolge (und großem Einfluss auf die weiteren Fortschritte): Die Elektronenbahnen im Bohrschen Atommodell widersprechen den elementaren Prinzipien der Quantenmechanik wie der Heisenbergschen Unschärferelation (vgl. 2.8.1, 2. Beispiel b.); die Drehimpuls-Quantelung existiert zwar, ist aber numerisch inkorrekt und *nicht* Ursache der Energie-Quantelung.

Korrekte theoretische Behandlung mit Hilfe der (zeitabhängigen) *Schrödingergleichung* (ab 1925 mit enormen Erfolgen in der gesamten Atomphysik)

Potentielle Energie des Systems Elektron (Ladung $-e$) und Kern (Ladung $+Ze$)



Zentralpotential

$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Hier zunächst ignoriert: Endliche Ausdehung der Ladungsverteilung des Kerns (s. jedoch später)

Schrödingergleichung:

$$\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right)\psi(\vec{r}) = 0$$

Dabei ist m die reduzierte Masse

$$m = \frac{m_{\mathrm{el}} M_{\mathrm{Kern}}}{m_{\mathrm{el}} + M_{\mathrm{Kern}}} \approx m_{\mathrm{el}} \quad \text{wegen} \quad m_{\mathrm{el}} \ll M_{\mathrm{Kern}}$$

Hinweis: Formulierung der Dynamik mit der Schrödingergleichung in 3 Dimensionen $\Rightarrow$ Möglichkeit von *Drehimpuls* automatisch eingebaut

Lösungsweg: Wegen Zentralpotential Einführung von Polarkoordinaten r, θ und φ; $\Rightarrow \Delta\psi(\vec{r})$ in Polarkoordinaten

Produktansatz: $\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$

Separation der Schrödingergleichung in 3 *entkoppelte* Eigenwertgleichungen für die Funktionen $R(r), \Theta(\theta)$ und $\Phi(\varphi)$ mit jeweils unabhängigen Randbedingungen; dadurch 3 unterschiedliche Typen von Quantenzahlen

(Einzelheiten siehe Rohlf oder jedes einführende Lehrbuch der Atomphysik)

Resultate

$\psi(\vec{r})$	$=$	$R(r)$	$\cdot$	$\Theta(\theta)$	$\cdot$	$\Phi(\varphi)$
Eigenwerte		Energie		Drehimpuls		z-Komp. des Drehimpulses
Quantenzahlen		Haupt-QZ		Drehimpuls-QZ		Magnetische QZ
		n		l		m_l
Eigenfunktionen		radial		polar		azimutal
abhängig von		n, l		l, m_l		m_l

Dabei

Haupt QZ	$n = 1, 2, 3, \ldots$
Drehimpuls QZ	$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$
Magnetische QZ	$m_l = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$

1) Eigenwerte der Energie

Die Eigenwerte der Energie E folgen aus den Randbedingungen der radialen Gleichung $R(r)$ und hängen allein von der Hauptquantenzahl n ab:

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2}(\alpha Z)^2(mc^2)\frac{1}{n^2} \qquad (\alpha Z)^2 \ll 1}$$

Dabei $\alpha = \dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\dfrac{1}{\hbar c} = \dfrac{1}{137}$ — Kopplungskonstante der elektromagnetischen Wechselwirkung (schon mehrfach im Skriptum benutzt)

Für $Z = 1, n = 1$ mit $mc^2 = 0.511$ MeV

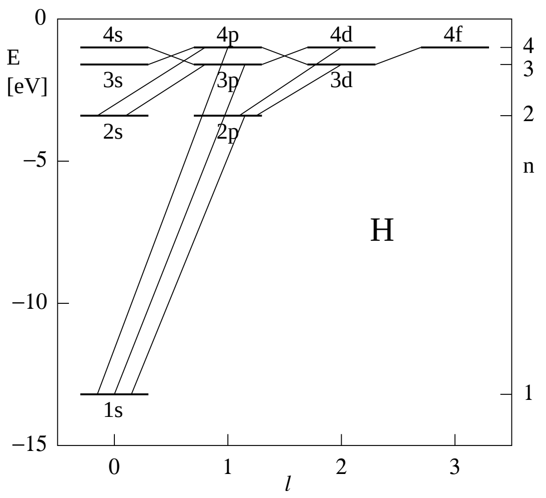
$E_1 = -13.6$ eV — Bindungsenergie des Elektrons im Grundzustand des H-Atoms (s.a. 2.81 und 4.31)

Bedeutung von $(\alpha Z)^2 \ll 1$: — Mittlere kinetische Energie des Elektrons (Virialsatz)

$$\langle E_{\text{kin}_1}\rangle = |E_1| = \frac{1}{2}m\langle v_1^2\rangle$$

$\Rightarrow \quad \langle v_1^2\rangle/c^2 = (\alpha Z)^2 \ll 1$ — bedeutet somit die Bedingung für die nicht-relativistische Näherung, entsprechend der Nutzung der (nicht-relativistischen) Schrödingergleichung

Kommentar: Obige Schreibweise der Eigenwerte ist physikalisch besonders transparent, und man sollte sich daher diese und keine andere einprägen. Die Größe α weist direkt auf die elektromagnetische Wechselwirkung hin. $(\alpha Z)^2$ enthält die Warnung der nicht-relativistischen Näherung und bildet gleichzeitig den ersten Term einer Reihenentwicklung nach Potenzen von $(\alpha Z)^2$ (d.h. $(\alpha Z)^4, \ldots$) für alle höheren Korrekturen über die Schrödingergleichung hinaus (s.u.); $(\alpha Z)^2$ ist auch der niedrigste Term einer Reihenentwicklung der Lösung der Dirac-Gleichung (s.u.).



Rolle der übrigen Quantenzahlen:
Für jeden Zustand n gibt es verschiedene Werte von l und m_l, insgesamt

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

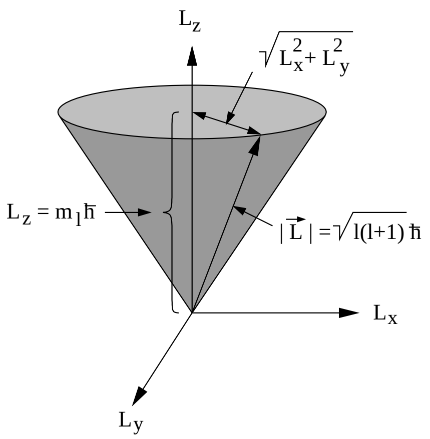
Jeder Zustand n ist “entartet” mit dem “Entartungsgrad” n^2.
Die favorisierten Strahlungsübergänge sind allerdings auf l empfindlich mit der “Auswahlregel” $\Delta l = \pm 1$

(Spektroskopische Nomenklatur: s,p,d,f für $l = 0, 1, 2, 3$)

Beachte: Die Entartung ist eine Eigenschaft der Schrödinger-Lösungen des Wasserstoff-ähnlichen Systems. Effekte, die nicht von der Schrödingergleichung beschrieben werden, heben sämtliche Entartungen auf, im Wasserstoff-Atom subtil, bei höheren Z und in Mehrelektronen-Systemen massiv (s. 4.3.4 und 4.3.5).

2) Eigenwerte des Drehimpulses

Die Eigenwerte des Drehimpulses $\vec{L}$ bzw. seiner Komponente L_z in z-Richtung folgen aus den Randbedingungen der polaren Gleichung $\Theta(\theta)$ bzw. der azimutalen Gleichung $\Phi(\varphi)$:

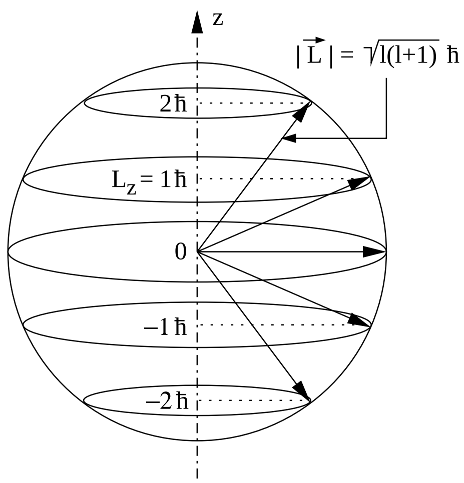


$$\boxed{\begin{aligned} \vec{L}^2 &= l(l+1)\hbar \\ L_z &= m_l\,\hbar \end{aligned}}$$

$\vec{L}^2$ und L_z (d.h. *eine* der 3 Raumkomponenten von $\vec{L}$) sind gequantelt und gleichzeitig scharf definiert. Auch die Kombination $\left(L_x^2 + L_y^2\right)^{1/2}$ ist mit $\vec{L}^2$ und L_z gleichzeitig scharf definiert, nicht aber die Komponenten L_x oder L_y separat.
Hintergrund: Unschärferelation für den Drehimpuls (s. 2.8.2, s.u.)

> Ein zentrales Potential bedeutet (wie auch klassisch) Drehimpulserhaltung. *Drehimpulserhaltung* in der Quantenmechanik bedeutet *fester Kegelmantel* mit $\vec{L}^2$ und L_z fest, *nicht* (wie klassisch) eine feste Raumrichtung von $\vec{L}$.

Beachte: Der Kegelmantel ist Ausdruck der Unschärferelation $\delta L \cdot \delta\varphi \geq \hbar/2$, die bei festem L den Azimutwinkel φ völlig unbestimmt lässt. Er hat *nichts* mit dem Präzessionskegel zu tun, der von einem klassischen Drehimpuls $\vec{L}$ bei Vorliegen eines äußeren Drehmoments $\vec{M} \neq 0$ durchlaufen wird (das Analogon dazu existiert in der Quantenmechanik zusätzlich, z.B. als Wirkung eines äußeren Magnetfeldes auf ein inneres magnetisches Moment
(⇒ Larmorpräzession, s.u.).



Bei festem $\vec{L}^2$, d.h. festem l:

Beschreibung aller erlaubten Komponenten L_z durch die verschiedenen m_l: “Richtungsquantelung”

Beispiel $l = 2$:

$$L_z = 2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$$

⇒ 5 verschiedene Kegelmäntel

In freien Atomen ohne äußere Felder: alle m_l gleich wahrscheinlich
⇒ keine räumliche Orientierung von $\vec{L}$

In äußeren Feldern, z.B. einem Magnetfeld: verschiedene Besetzungen der m_l
⇒ Netto-Orientierung von $\vec{L}$
(daraus Wahl der Bezeichnung “magnetische” QZ)

Verallgemeinerung: Die Drehimpulsquantelung (hier aus Schrödinger-Lösung für H-Problem) ist ein generelles Phänomen der Quantenmechanik. Sie gilt in anderen Zentralpotentialen, die den Drehimpuls erhalten, ebenso wie bei freier Rotation (siehe z.B. 4.4.3 Rotation von Molekülen)

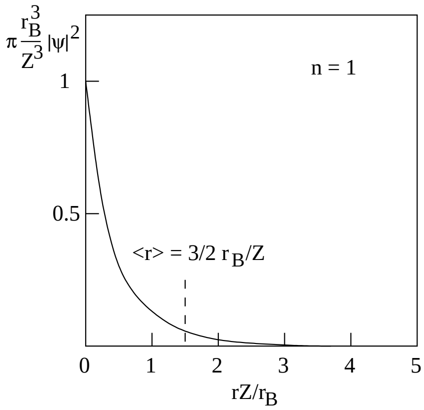
3) Eigenfunktionen

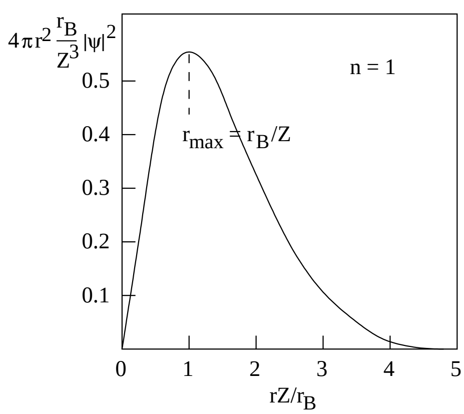
Die Eigenfunktionen $\psi(\vec{r}) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ sind im Allgemeinen von allen 3 Quantenzahlen abhängig $\Rightarrow \psi_{nlm}$

Sonderfälle

1. *Eigenfunktionen mit* $l = 0$
   - sphärisch symmetrische Lösungen, nur von n abhängig
   - Maximum von $|\psi_{n00}|^2$ prinzipiell bei $r = 0$, d.h. am Ort des Kerns!

   Beispiele:



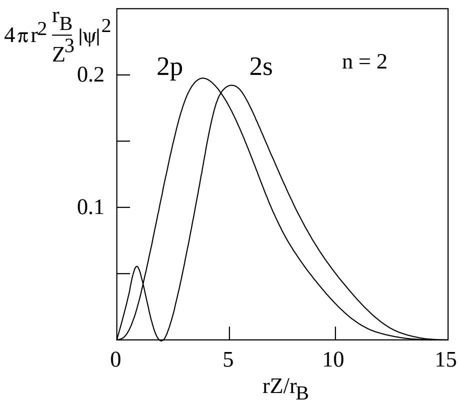


$\boxed{\mathbf{n = 1}}$ $\quad \psi_{100}(r) = \left(\frac{Z^3}{\pi r_B^3}\right)^{1/2} e^{-\frac{rZ}{r_B}}$ mit $r_B = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar c}{mc^2} = 0.053$ nm ("Bohrscher Radius")

Der Vorfaktor vor der e-Funktion entspricht der Normierung

$$\int_{r=0}^{\infty} 4\pi r^2 |\psi_{100}(r)|^2 \mathrm{d}r = 1$$

Beachte erneut: $|\psi_{100}(r)|^2$ maximal am Kernort
sowie $4\pi r^2 |\psi_{100}(r)|^2$ maximal bei $rZ/r_B = 1$ (Reminiszenz an die 1. Bohrsche "Bahn")

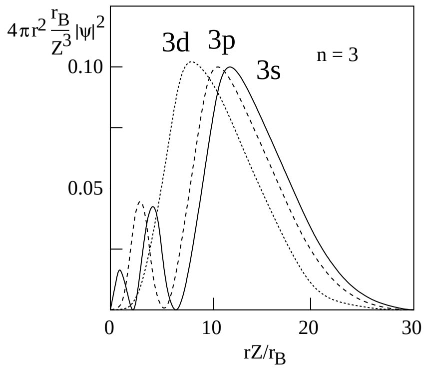


$\boxed{\mathbf{n = 2}}$ (hier 2s)

$$\psi_{200}(r) = \frac{1}{4}\left(\frac{Z^3}{2\pi r_B^3}\right)^{1/2} \left(2 - \frac{rZ}{r_B}\right) e^{-\frac{rZ}{2r_B}}$$

2 Maxima in $4\pi r^2 |\psi|^2$;
Hauptmaximum bei $rZ/r_B \approx 1.3n^2$

Kommentar zu Fall $n = 2, l = 1$ (2p) s.u.



$\boxed{\mathbf{n = 3}}$ (hier 3s)

$$\psi_{300}(r) = \frac{1}{81}\left(\frac{Z^3}{3\pi r_B^3}\right)^{1/2}\left(27 - \frac{18rZ}{r_B} + 2\frac{(rZ)^2}{r_B^2}\right) e^{-\frac{rZ}{3r_B}}$$

3 Maxima in $4\pi r^2 |\psi|^2$
Hauptmaximum bei $rZ/r_B \approx 1.4n^3$

Kommentar zu den Fällen $l = 1$ (3p) und $l = 2$ (3d) s.u.

2. *Eigenfunktionen mit $l \neq 0$*
   - Lösungen nicht sphärisch symmetrisch, sondern von θ und φ abhängig
   - $|\psi_{nlm}|^2 = 0$ bei $r = 0$. d.h. am Kernort $\Rightarrow$ kleinere Abschirmung des Kerns durch Elektronen mit $l \neq 0$ bezüglich weiter außen liegender Schalen in Mehr-Elektronen-Systemen
   - Die Beispiele für $l \neq 0$ in obigen Bildern enthalten geeignete Summen über die $|\psi_{nlm}|^2$ mit verschiedenen m_l (s. Rohlf); nur 1 Maximum in $4\pi r^2 |\psi_{n(l-1)}|^2$ wie 2p, 3d,...; dies liegt bei exakt $rZ/r_B = n^2$ (erneut wie die Bohrschen "Bahnen")

♠ Hinweis Bilder: Rohlf Fig. 8-5 (3-dimensionale Darstellungen von $|\psi|^2$ für verschiedene n, l, m); Giancoli Fig. 28-7; Bergmann-Schäfer IV-1 (1975) Figs. II-11 und II-12

♠ Hinweis Eigenfunktionen: Rohlf Tabelle 8-1 (alle ψ von 1s bis 3d)

3. **Resumée: Schalenstruktur des Ein-Elektron-Systems**
   - *Hauptschalen:* Zustände mit der Hauptquantenzahl n. Energieeigenwerte ausschließlich durch n bestimmt. Räumliche Anordnung von n *und* l abhängig; Expansion der Hauptschalen ungefähr $\propto n^2$
   - *Nebenschalen:* Zustände mit verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen l zum gleichen n. Alle Energie-Eigenwerte gleich (s. jedoch 4.3.4 – 4.3.6). Besonderheiten in der räumlichen Anordnung: für $l = 0$ Maximum von $|\psi|^2$ bei $r = 0$, d.h. am Ort des Kerns, für $l \neq 0$ $|\psi|^2 = 0$ bei $r = 0$
   - Z-Abhängigkeit: Räumliche Anordnung von Haupt- und Nebenschalen skaliert exakt mit $1/Z$

   Zusatzbemerkung: Unterscheide strikt zwischen *Ein-* und *Mehr*-Elektronen-Systemen. Die Expansion der Hauptschalen mit n^2 ist nur in Ein-Elektron-Systemen isoliert beobachtbar und kann dort zu vergleichsweise enormen Dimensionen führen ("Rydberg-Atome"). In Mehr-Elektronen-Systemen kompensieren sich die n^2- und $1/Z$-Abhängigkeit für die jeweils *äußersten* Elektronen so, dass die Grundzustände aller Atome vergleichbare Dimensionen haben (bereits in 4.2.3 diskutiert).

4.3.3 Bahn- und Spinmagnetismus

1) Bahn-Drehimpuls des Elektrons und Bahn-Magnetismus

Eine bewegte Ladung wie die des bewegten Elektrons in H-ähnlichen Systemen ist immer mit einem Strom und damit mit einem magnetischen Moment verknüpft.

Dabei unzureichend: chaotische Bewegung, die bei einer Lokalisierung auf Δx von der Impulsunschärfe Δp herrührt (Unschärferelation). Immer notwendig: "Geordnete" Bewegung, die einem *definierten Drehimpuls* entspricht.

Beispiel Grundzustand des H-Atoms: für $n = 1$ nur $l = 0$ möglich; $\Rightarrow$ kein Drehimpuls, kein magnetisches Moment (eines der Probleme des Bohrschen Atommodells)

Ableitung des Zusammenhangs Drehimpuls $\leftrightarrow$ magnetisches Moment s. Literatur (Rohlf oder jedes andere Lehrbuch der Atomphysik); z.B. semi-klassisches Modell eines Kreisstroms

Resultat:

$$\boxed{\vec{\mu}^{\,\mathrm{Bahn}} = -\frac{e}{2m}\vec{L}}$$

magnetisches Moment der Bahnbewegung: *"Bahnmoment"*

Das negative Vorzeichen berücksichtigt die negative Ladung des Elektrons: Richtung des magnetischen Moments entgegengesetzt zur Richtung des Bahndrehimpulses.

Oft benutzte Schreibweise (s.u.):

$$\vec{\mu}^{\,\mathrm{Bahn}} = -\frac{e}{2m} \cdot g_l \cdot \vec{L}$$

dabei g Landéscher g-Faktor mit $g = g_l = 1$ für die Bahnbewegung.

z-Komponente des magnetischen Moments

$$\mu_z = -\mu_B \cdot m_l \quad \text{mit} \quad \boxed{\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}}$$

Bohrsches Magneton

Numerisch: $\mu_B = 5.788 \cdot 10^{-5}$ eV/T

Relevanz des magnetischen Moments

1) Im äußeren B-Feld Ausrichtung von $\vec{\mu}$ relativ zu der dann extern ausgezeichneten z-Achse. *Larmorpräzession* mit der *Larmor-Frequenz*

$$\omega_L = \frac{eB}{2m}$$

Potentielle Energie eines magnetischen Dipols in einem Magnetfeld $E_{\mathrm{pot}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$; dadurch Verschiebung der jeweiligen Eigenwerte

$$\Delta E = -\mu_z \cdot B_z = \mu_B B m_l = \hbar\omega_L \cdot m_l$$

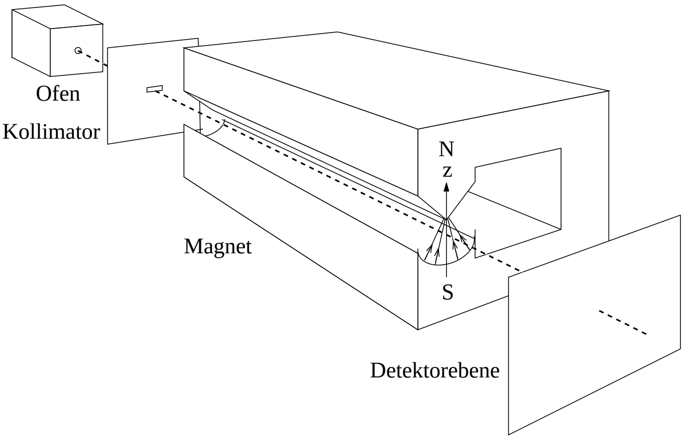
2) Wechselwirkung des Bahnmoments $\vec{\mu}^{\,\mathrm{Bahn}}$ mit dem Spinmoment $\vec{\mu}^{\,\mathrm{Spin}}$

$\Rightarrow$ *Spin-Bahn-Wechselwirkung* $\Rightarrow$ Aufhebung der meisten Entartungen der Eigenwerte E_n (s. unten)

2) Eigendrehimpuls (Spin) des Elektrons und Spin-Magnetismus

Direkte Bestimmung von atomaren Drehimpulsen und der zugehörigen magnetischen Momente mit Atomstrahl-Methoden möglich. Erstes Experiment dieser Art:

Stern-Gerlach-Experiment (1921)



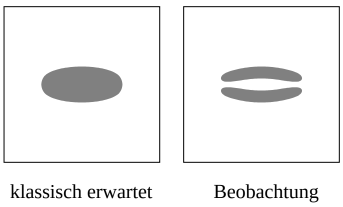
Grundidee:
Ablenkung eines Strahls von *neutralen* Ag-Atomen in einem *inhomogenen* Magnetfeld abhängig von der *Orientierung des magnetischen Moments* in diesem Feld (keine Lorentzkraft im üblichen Sinne)

Bei $\vec{B}$-Feld dominant in z-Richtung $\perp$ Flugrichtung, und *Gradient* (Änderung) des Feldes ebenfalls in z-Richtung, Ablenkung des Strahls durch Netto-Kraft in z-Richtung

$$F_z = \mu_z \cdot \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Erwartung für klassische räumliche Verteilung von $\vec{\mu}$, d.h. ohne Quantisierung von μ_z: verbreiterter Strahlfleck
Erwartung für quantenmechanische Verteilung von $\vec{\mu}$, d.h. Quantisierung von μ_z: Auftrennung des Strahls in Teilstrahlen abhängig von der Zahl der Komponenten von μ_z

Resultate



1) Existenz einer Aufspaltung des Strahls:
   Direkter experimenteller Beweis für *Richtungsquantelung*

2) Aufspaltung in 2 Komponenten:
   zunächst mysteriös; inkompatibel mit Erwartung $(2l+1)$ für Bahnmomente, z.B. 0 bzw. 3 Komponenten für $l = 0$ bzw. 1

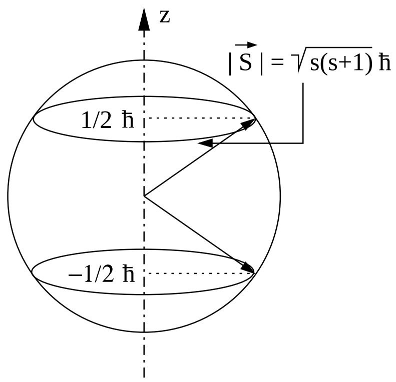
3) Größe der Aufspaltung zunächst ebenfalls sonderbar, "zu groß" (s.u.)

Ag-Atome: nur 1 Elektron in äußerster Schale (5s) $\Rightarrow l = 0$
H-Atome (Experiment 1927 Phillips und Taylor): nur 1 Elektron insgesamt (1s) $\Rightarrow l = 0$

In *beiden* Fällen jedoch 2 Komponenten beobachtet!

Deutung

1925 Goudsmit und Uhlenbeck (zur Interpretation der Feinstruktur in den Linienspektren von Na):
Elektron hat **Eigendrehimpuls**



$$\boxed{\begin{array}{rcl} \vec{S}^2 &=& s(s+1)\hbar^2 \\ S_z &=& m_s\hbar \end{array}}$$

Elektron-Spin

$$\boxed{\begin{array}{rcl} s &=& 1/2 \\ m_s &=& \pm 1/2 \end{array}}$$

Mit dem Spin des Elektrons ist ein **magnetisches Eigenmoment** verknüpft:

$$\boxed{\vec{\mu}^{\,\mathrm{Spin}} = -\frac{e}{m}\vec{S}}$$

Spinmoment

oder $$\vec{\mu}^{\,\mathrm{Spin}} = -\frac{e}{2m} g_s \vec{S} \qquad \text{mit } g_s = 2$$

In den H- bzw. Ag-Atomen ist der Gesamtdrehimpuls im Grundzustand nicht 0, sondern gerade der Eigendrehimpuls des Elektrons $\Rightarrow$ $(2s+1) = 2$ Komponenten in der Strahlaufspaltung. Die *Größe* der Aufspaltung entspricht jedoch einem magnetischen Moment für den Drehimpuls $1\hbar$, nicht $\frac{1}{2}\hbar \Rightarrow$ der Landésche g-Faktor ist $g_s = 2$, *doppelt so groß* wie der des Bahnmoments $g_l = 1$.

1928: Dirac-Gleichung (relativistisch korrekt):
Elektronenspin $s = 1/2$ und g-Faktor $g_s = 2$ exakt beschrieben $\Rightarrow$ s und g_s in diesem Sinne "relativistische Effekte"

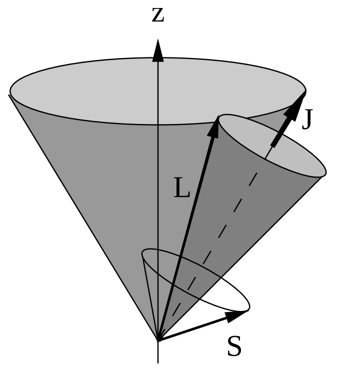
Seit den 40er-Jahren weitere Modifikation von g_s bekannt (durch Effekte der Quantisierung elektromagnetischer Felder, QED):

$$\boxed{g_s = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \ldots\right) = 2.00232\ldots}$$

Abschlussbemerkung: Eigendrehimpuls und Eigenmoment des Elektrons in Verknüpfung mit punktförmiger Ausdehnung entziehen sich jeder Anschauung. Eine klassische rotierende Kugel mit endlicher Ausdehnung führt zu unsinnigen Konsequenzen (Überlichtgeschwindigkeit auf der Oberfläche etc.); s. dazu die ausführliche Diskussion in Eisberg/Resnik. Im Übrigen: Nobelpreis für Stern 1943.

3. Spin-Bahn-Wechselwirkung

Für den Fall $\vec{L} = 0$, d.h. $l = 0$ wird der Gesamtdrehimpuls des Atoms allein durch den Spin getragen (s.o). Für den Fall $\vec{L} \neq 0$ koppeln $\vec{L}$ und $\vec{S}$ vektoriell zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$:



"LS-Kopplung"

$$\boxed{\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{J}^2 &= j(j+1)\hbar^2 \\ J_z &= m_J \hbar \end{aligned}}$$

Ursache der Kopplung ist die *magnetische Wechselwirkung* zwischen dem Bahnmoment $\vec{\mu}^{\,\mathrm{Bahn}}$ des Elektrons und seinem Eigenmoment $\vec{\mu}^{\,\mathrm{Spin}}$. Für die Momente gilt entsprechend

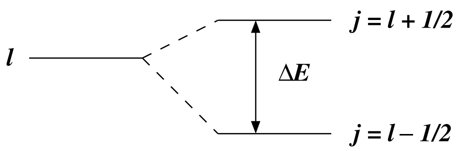
$$\boxed{\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\left(\vec{L} + 2\vec{S}\right)}$$

dabei $g_l = 1$
$g_s = 2$

Berechnung der Wechselwirkung s. Literatur (z.B. aus der Orientierung des Spinmoments im Magnetfeld der Bahnbewegung des Elektrons in einem semi-klassischen Bild).

Zentrales Resultat: **Feinstruktur-Aufspaltung**

Magnetische Wechselwirkungs-Energie, abhängig von der Orientierung des Spinmoments relativ zur Bahn (wegen $s = 1/2$ nur 2 Möglichkeiten: parallel oder antiparallel)



Aufspaltung jedes Zustands l in 2 Zustände

$$\Delta E \propto (\alpha Z)^4$$

Wirksam in allen Atomen in allen Schalen (s. H-Atom 4.3.4, s. Röntgen-Feinstruktur in 4.3.5)

4.3.4 Wasserstoff-Atom

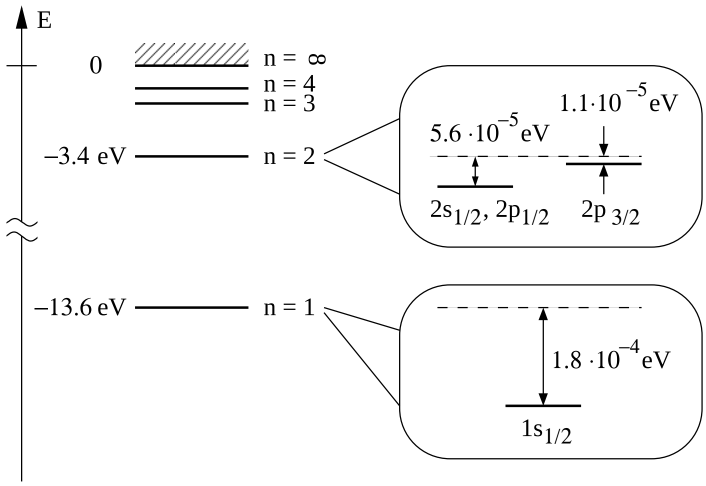
Hier keine Wiederholung der Schrödinger-Lösung; s. dazu 4.3.2 mit $Z = 1$. Stattdessen: Beschränkung auf die *Abweichungen* von der Schrödinger-Lösung.

2 Ursachen für Abweichungen/Modifikationen:

1) relativistische Korrekturen
2) Spin-Bahn-Aufspaltung

Größenordnung der Modifikationen: *absolut* $\propto (\alpha Z)^4$, *relativ* zum Hauptterm $\propto (\alpha Z)^2$, d.h. $<10^{-4}$ für $Z = 1$. Genaue numerische Behandlung aller Teilaspekte s. z.B. Rohlf

1) Resultat ohne QED-Effekte



Die relativistischen Korrekturen sind *absolut* $\propto 1/n^3$ und vergrößern die Bindungsenergie (s. 4.3.5). Die Spin-Bahn-Aufspaltung beträgt ca. $4.5 \cdot 10^{-5}$ eV für den $n = 2$ Zustand.

Zusatzbemerkung:

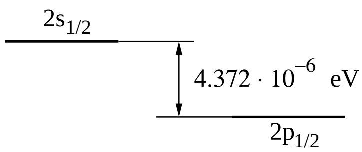
Die relativistisch korrekte Dirac-Gleichung enthält automatisch die relativistischen Korrekturen und beschreibt korrekt Spin und Spinmoment des Elektrons, die LS-Kopplung und die Feinstruktur-Aufspaltung. Anders als die Schrödinger-Eigenwerte (nur von n abhängig) sind dabei die Eigenwerte von n und j abhängig; es gibt also immer noch eine Entartung für Zustände mit gleichem j, z.B. $2s_{1/2} \leftrightarrow 2p_{1/2}$. In der Entwicklung mit Termen bis zu α^4 ergibt sich

$$E_{n,j} = -\frac{1}{2}\alpha^2(mc^2)\frac{1}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right] \qquad \textbf{Dirac-Eigenwerte}$$

In den einführenden Lehrbüchern werden allerdings die Modifikationen der Schrödinger-Eigenwerte durchweg ad hoc und nicht mit der Dirac-Gleichung behandelt (wie im Rohlf); dies folgt nicht nur der historischen Entwicklung, sondern gibt auch Einblick in die relevanten physikalischen Effekte.

2) QED-Effekte

In der Quantenelektrodynamik gibt es Effekte wie die “Selbstenergie” des Elektrons oder die “Vakuumpolarisation”, die nicht nur für die Abweichung von g_s von exakt 2 verantwortlich sind (s.o.), sondern auch für weitere Verschiebungen der Energie-Eigenwerte. Der zentrale Effekt ist die “Lambshift” (Lamb 1947, Nobelpreis 1955)



Lambshift

Aufhebung der Entartung $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$
(Beobachtung der Energiedifferenz mit HF-Techniken)

$\Rightarrow$ Verminderung der Bindungsenergie des $2s_{1/2}$ Zustands (ca. 12% der Spin-Bahn-Aufspaltung)

Hintergrund: Elektron “verschmiert”, Verminderung der Wechselwirkung mit dem Kern in der Nähe des Kernorts; daher nur für s-Zustände relevant, für die $|\psi_{n00}(0)|^2 \neq 0$, s. 4.3.2

Erheblich größerer Effekt für den $1s_{1/2}$ Zustand; jedoch nur als absolute Termverschiebung beobachtbar, nicht als Aufspaltung eines entarteten Dubletts mit Hilfe einer Differenzmessung

Moderne Forschung: Präzisionsmessungen zur Lambshift in H-Atomen als Präzisionstest der QED (s. dazu auch 4.3.6)

4.3.5 Mehr-Elektronen-Systeme: Schalenstruktur und Periodensystem

Die energetische und räumliche Anordnung der Elektronen in Mehr-Elektronen-Systemen beruht auf folgenden Leitprinzipien:

1. **Unabhängige Bewegung** der Elektronen in einem zentralen Potential $V(r) \propto Z_{\text{eff}} e^2$, wobei für die innersten Elektronen $Z_{\text{eff}} \approx Z$, für die äußeren Elektronen infolge der zunehmenden *Abschirmung des Kerns* $Z_{\text{eff}} < Z$; Extrem für das letzte Elektron: $Z_{\text{eff}} \approx 1$.

2. Schrittweises Auffüllen von Haupt- und Nebenschalen gemäß **Pauli-Prinzip** (s. 3.1.2):

   Jeder Quantenzustand kann mit höchstens 1 Elektron besetzt werden. Oder: Jedes Elektron hat einen verschiedenen Satz von Quantenzahlen. Angewandt auf die vorliegende Situation:

   4 Quantenzahlen: n, l, m_l, m_s (oder n, l, j, m_j)

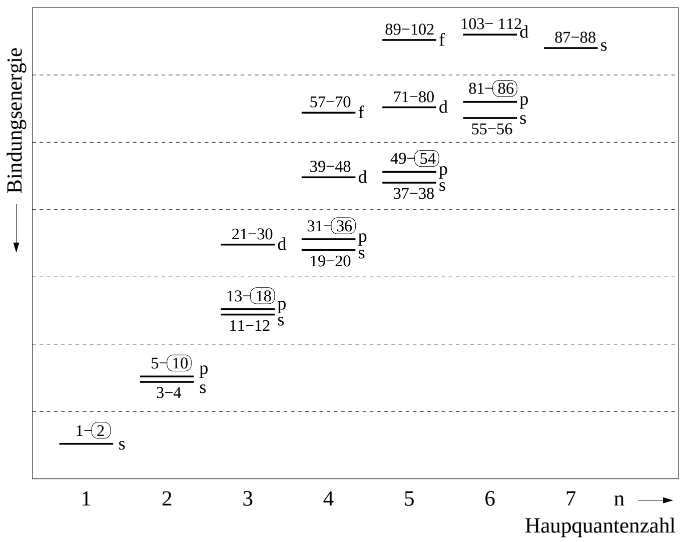
   Besetzungszahlen ingesamt: $2 \cdot (2l+1)$ mit $l \leq (n-1)$ für jede Hauptschale n

   Besetzungszahlen der Nebenschalen:

$l = 0$	(s)	2 Elektronen mit $m_l =$	0	und $m_s = \pm 1/2$
$l = 1$	(p)	6 Elektronen mit $m_l =$	$\pm 1, 0$	und $m_s = \pm 1/2$
$l = 2$	(d)	10 Elektronen mit $m_l =$	$\pm 2, \pm 1, 0$	und $m_s = \pm 1/2$
$l = 3$	(f)	14 Elektronen mit $m_l =$	$\pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$	und $m_s = \pm 1/2$

3. Monotone Auffüllung der Energieniveaus von Haupt- und Nebenschalen in Richtung abnehmender Bindungsenergie, d.h. Grundzustand definiert als **niedrigster Zustand** im Mehr-Elektronen-Termschema (*Bindungsenergie maximal*)

Dynamisches Termschema für den Aufbau der Atome (Die Niveauabstände gelten für die jeweils neu hinzukommenden Elektronen und sind daher im gesamten Schema wegen $Z_{\text{eff}} \approx 1$ von der Größenordnung eV)



Radikale *Aufhebung der Entartung* der Ein-Elektronen-Zustände E_n infolge der Kernabschirmung durch die jeweils weiter innen angeordneten Elektronen

Nebenschalen-Energien monoton in l: größere $l \rightarrow$ größerer Kernabstand $\rightarrow$ stärkere Abschirmung $\rightarrow$ schwächere Bindung; sogar *Überlappungen* der aufgebrochenen Hauptschalen!

Kumulative Besetzungszahlen (durch Addition der differentiellen, s.o.) entsprechend den atomaren *Ornungszahlen* der Elemente

Zentrale Resultate

Abschluss von $n = 1$ für He mit $(1s)^2$, von $n = 1$ und $n = 2$ für Ne mit $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$, also insgesamt 10 Elektronen (in den ersten zwei der insgesamt 8 Hauptgruppen des Periodensystems). Weiterer *"regulärer"* Aufbau bis zum Ar mit $Z = 18$, dann erstmals *"irregulär*: die 3d-Zustaände liegen höher als die 4s-Zustände wegen der starken Abschirmung der d-Elektronen; zunächst 2 Elemente in 4s (K, Ca), dann Auffüllen von 3d. In den nächsten Schalen Wiederholung dieses Musters für 4d, 5d und 6d ("Nebengruppen"). Analoges gilt für die 4f und 5f-Zustände, für die die Abschirmung noch stärker ist als für die d-Zustände (Ausnahmen s.u.).

Periodensystem

I	II											III	IV	V	VI	VII	VIII
1 H $1s^1$																	2 He $1s^2$
3 Li $2s^1$	4 Be $2s^2$											5 B $2p^1$	6 C $2p^2$	7 N $2p^3$	8 O $2p^4$	9 F $2p^5$	10 Ne $2p^6$
11 Na $3s^1$	12 Mg $3s^2$					Nebengruppen						13 Al $3p^1$	14 Si $3p^2$	15 P $3p^3$	16 S $3p^4$	17 Cl $3p^5$	18 Ar $3p^6$
19 K $4s^1$	20 Ca $4s^2$	21 Sc $3d^1 4s^2$	22 Ti $3d^2 4s^2$	23 V $3d^3 4s^2$	24 Cr $3d^5 4s^1$	25 Mn $3d^5 4s^2$	26 Fe $3d^6 4s^2$	27 Co $3d^7 4s^2$	28 Ni $3d^8 4s^2$	29 Cu $3d^{10} 4s^1$	30 Zn $3d^{10} 4s^2$	31 Ga $4p^1$	32 Ge $4p^2$	33 As $4p^3$	34 Se $4p^4$	35 Br $4p^5$	36 Kr $4p^6$
37 Rb $5s^1$	38 Sr $5s^2$	39 Y $4d^1 5s^2$	40 Zr $4d^2 5s^2$	41 Nb $4d^4 5s^2$	42 Mo $4d^5 5s^2$	43 Tc $4d^6 5s^2$	44 Ru $4d^7 5s^2$	45 Rh $4d^8 5s^2$	46 Pd $4d^{10}$	47 Ag $4d^{10} 5s^1$	48 Cd $4d^{10} 5s^2$	49 In $5p^1$	50 Sn $5p^2$	51 Sb $5p^3$	52 Te $5p^4$	53 I $5p^5$	54 Xe $5p^6$
55 Cs $6s^1$	56 Ba $6s^2$	71 Lu $5d^1 6s^2$	72 Hf $5d^2 6s^2$	73 Ta $5d^3 6s^2$	74 W $5d^4 6s^2$	75 Re $5d^5 6s^2$	76 Os $5d^6 6s^2$	77 Ir $5d^7 6s^2$	78 Pt $5d^9 6s^1$	79 Au $5d^{10} 6s^1$	80 Hg $5d^{10} 6s^2$	81 Tl $6p^1$	82 Pb $6p^2$	83 Bi $6p^3$	84 Po $6p^4$	85 At $6p^5$	86 Rn $6p^6$
87 Fr $7s^1$	88 Ra $7s^2$	103 Lr $6d^1 7s^2$	104 Rf $6d^2 7s^2$	105 Db $6d^3 7s^2$	106 Sg $6d^4 7s^2$	107 Bh $6d^5 7s^2$	108 Hs $6d^6 7s^2$	109 Mt $6d^7 7s^2$	110 $6d^8 7s^2$	111 $6d^{10} 7s^1$	112 $6d^{10} 7s^2$						

Lanthaniden $(6s^2)$

57 La $5d^1$	58 Ce $4f^1 5d^1$	59 Pr $4f^3$	60 Nd $4f^4$	61 Pm $4f^5$	62 Sm $4f^6$	63 Eu $4f^7$	64 Gd $4f^7 5d^1$	65 Tb $4f^9$	66 Dy $4f^{10}$	67 Ho $4f^{11}$	68 Er $4f^{12}$	69 Tm $4f^{13}$	70 Yb $4f^{14}$

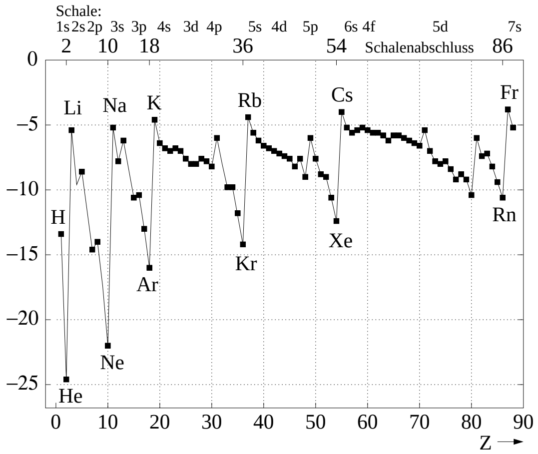
Aktiniden $(7s^2)$

89 Ac $6d^1$	90 Th $6d^2$	91 Pa $5f^2 6d^1$	92 U $5f^3 6d^1$	93 Np $5f^5$	94 Pu $5f^6$	95 Am $5f^7$	96 Cm $5f^7 6d^1$	97 Bk $5f^9$	98 Cf $5f^{10}$	99 Es $5f^{11}$	100 Fm $5f^{12}$	101 Md $5f^{13}$	102 No $5f^{14}$

Periodensystem der Elemente (Mendeleev 1870)

- Ursprüngliche Aufstellung allein aufgrund der Ähnlichkeiten im chemischen Verhalten
- 8 Hauptgruppen (vertikal) mit analogen chemischen Eigenschaften in jeder Gruppe
- 7 Perioden (horizontal) entsprechend $n = 1$ bis $n = 7$
- 4 Nebengruppen (horizontal) mit Auffüllen von 3d, 4d, 5d, 6d $\rightarrow$ Übergangsmetalle
- Weitere 2 Gruppen (horizontal) mit Auffüllen von 4f und 5f $\rightarrow$ Seltene Erden (Lanthaniden) bzw. Aktiniden
- Schwerste bekannte Elemente $Z = 107 - 112$ entdeckt bei der GSI Darmstadt in den Jahren 1981 – 1995, Namensvorschläge von dort (Bohrium, Hassium, Meitnerium, 110 – 112 noch offen)

Atome mit vollständig gefüllten Nebenschalen: sphärisch symmetrische Ladungsverteilungen; gesamte Drehimpulse für Bahn $\vec{L} = \sum \vec{l}_i = 0$ und Spin $\vec{S} = \sum \vec{s}_i = 0$. Größere Lücken im Termschema (einige eV) zwischen 1s, 2p, 3p, 4p, 5p, 6p und den jeweils nächsthöheren s-Zuständen. Zugehörige Elemente mit Schalenabschluss unterhalb der Lücke: die chemisch inaktiven Edelgase; mit 1 Elektron oberhalb der Lücke: die chemisch besonders aggressiven Alkalimetalle.



Ionisationsenergien der Elemente (Bindungsenergien des letzten, am wenigsten gebundenen Elektrons

Überzeugende Demonstration der *Schalenstruktur der Atome*

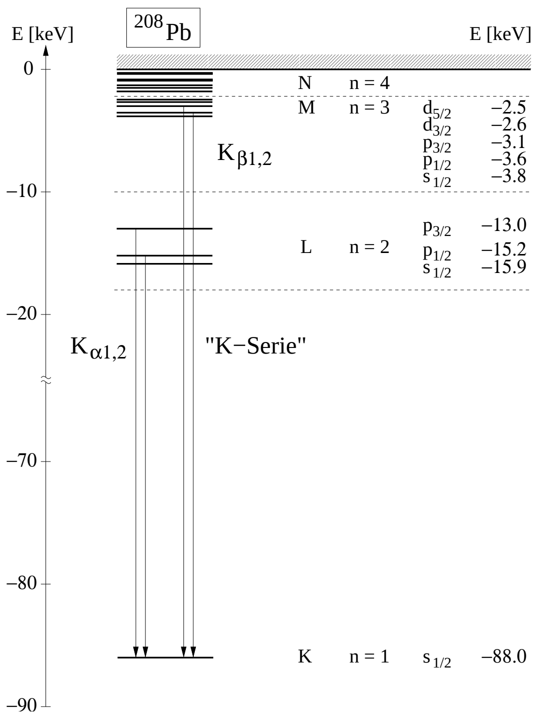
Maximale Bindungsenergien für die Edelgase (gefüllte p-Nebenschalen); minimale Werte für die Alkalien (mit jeweils 1 Elektron in der nächsten s-Schale)

Hinweis und Warnung: Das hier benutzte Mehr-Elektronen-Termschema darf nicht mit dem festen Termschema eines individuellen Atoms verwechselt werden. Es ist *"dynamisch"*: der Termwert einer Nebenschale ändert sich mit zunehmender Füllung bis schließlich zur Umkehr einer lokalen Reihenfolge. Beispiel 3d: die 4s-Zustände werden zunächst besetzt, aber eine *voll* besetzte d-Schale endet *unterhalb* von 3s (der Wechsel erfolgt in 3d bereits bei Besetzungszahlen von 9 und 10 ⇒ siehe Cu und Zn im Periodensystem). Analoges gilt für die höheren Nebenschalen. Insgesamt verstärkt sich das "Aneinanderrücken" der Nebenschalen mit wachsendem Z, d.h. mit der Füllung weiterer darüberliegender Schalen. In den inneren Schalen ist die Aufspaltung in Nebenschalen wieder klein gegenüber dem Abstand der Hauptschalen (s. 4.3.6).

4.3.6 Innere Elektronenschalen und charakteristische Röntgenstrahlung

In Mehr-Elektronen-Systemen werden voll besetzte Hauptschalen, deren Bindungsenergien durch eine effektive Kernladung $Z_{\text{eff}} \gg 1$ bestimmt sind, als *"innere Elektronenschalen"* bezeichnet. Die Ablösung eines einzelnen Elektrons aus einer voll besetzten Schale führt zu einem einzelnen *Loch*, das sich energetisch in einem Termschema analog zu einem *Einzel-Elektron-System* beschreiben lässt (s.u. für wirkliche Ein-Elektronen-Systeme mit $Z \gg 1$).

Beispiel: Termschema ("Röntgenniveaus") für $^{208}_{82}$Pb



Hauptschalen $n = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ mit den historisch bedingten Bezeichnungen K,L,M,N,O,...

Aufspaltung in *Nebenschalen* < Abstand der Hauptschalen (keine Irregularitäten wie beim Aufbau des Periodensystems)

Füllung eines Lochs durch ein Elektron aus einer (voll besetzten) höherliegenden Schale unter Emission *charakteristischer Röntgenstrahlung* ("K-Serie" eingezeichnet). Alternativer Prozess: *Auger-Übergänge* (s. 2.2.1)

Vergleich mit H-Atom

- Energetische Schwerpunkte der Hauptschalen nur sehr angenähert $\propto 1/n^2$ wegen starker *Abschirmeffekte* (L-Schale: $\sim$14 keV statt $(1/4) \cdot 88 = 22$ keV; M-Schale: $\sim$3 keV statt $(1/9) \cdot 88 = 10$ keV)
- *Aufspaltung* in Nebenschalen mit streng eingehaltener Hierarchie $\mathrm{s}_{1/2}$, $\mathrm{p}_{1/2}$, $\mathrm{p}_{3/2}$, $\mathrm{d}_{3/2}$, $\mathrm{d}_{5/2}, \ldots$
- *Feinstruktur-Aufspaltung* $l \pm 1/2$ wie im H-Atom mit Skalierung $\propto (\alpha Z)^4$. Beispiel $2\mathrm{p}_{3/2} \leftrightarrow 2\mathrm{p}_{1/2}$: 2.2 keV verglichen mit $(4.5 \cdot 10^{-5}) \cdot (82)^4 = 2.0$ keV
- Zustände $\mathrm{s}_{1/2}$ *unterhalb* $\mathrm{p}_{1/2}$ wegen *kleinerer Abschirmeffekte* für die s- als für die p-Elektronen. *Lambshift* (mit umgekehrtem Vorzeichen) im Vergleich dazu vernachlässigbar klein

Charakteristische Röntgenstrahlung

- Serien K, L, M, ... für primäre Leerstelle in $n = 1, 2, 3, \ldots$ analog zu den Serien Lyman, Balmer, Paschen ... im H-Atom. Nomenklatur $\alpha, \beta, \ldots$ für $\Delta n = 1, 2, \ldots$. Beispiel L $\rightarrow$ K: K_α; M $\rightarrow$ K: K_β, ...
- Auswahlregel für die Übergänge $\Delta l = \pm 1$ ("elektrische Dipolstrahlung"). Feinstruktur der Übergänge durch die Feinstruktur-Aufspaltungen im Termschema. Beispiel $2\mathrm{p}_{3/2} \rightarrow 1\mathrm{s}_{1/2}$: K_{α_1}; $2\mathrm{p}_{1/2} \rightarrow 1\mathrm{s}_{1/2}$: K_{α_2} (immer Dubletts)

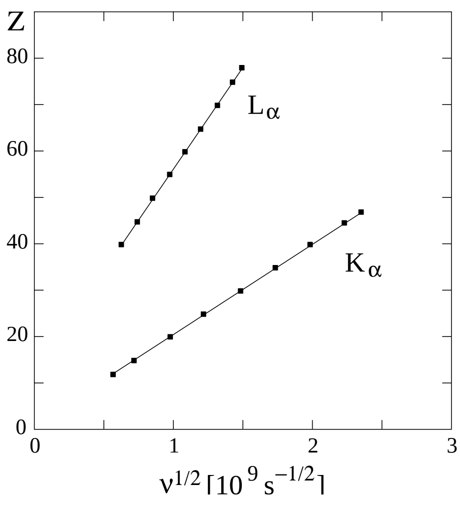
Z-Abhängigkeit / Moseleysches Gesetz

Erwartete Eigenwerte für die K-Schale entsprechend der Schrödinger-Lösung für das Ein-Elektron-System mit der Kernladung Ze (s. 4.3.2)

$$E_n = -\frac{1}{2}(\alpha Z)^2 mc^2 \left(\frac{1}{n^2}\right)$$

Erwartete Frequenzen für die Übergänge, z.B. die K_α-Serie

$$h\nu_{K_\alpha} = E_2 - E_1 = \frac{1}{2}(\alpha Z)^2 mc^2 \left(1 - \frac{1}{4}\right)$$



Moseley (1914)

Empirischer Befund

$$\nu_K \text{ und } \nu_L \propto Z^2$$

Korrekte Interpretation im Rahmen des Bohrschen Modells (1913); quantitativer Beweis für die Richtigkeit der Annahme Ordnungszahl Z = Ladung des Atomkerns; korrekte Vorhersage für fehlende Elemente im Periodensystem

Quantitative Übereinstimmung der Übergangsfrequenzen mit der Schrödinger-Lösung, falls die Kernladung Z ersetzt wird durch

$$Z_{\text{eff}} = Z - 1 \qquad \text{für die K-Serie}$$
$$Z_{\text{eff}} = Z - 7.4 \qquad \text{für die L-Serie}$$

Interpretation dieser Korrektur: Abschirmeffekte für die K- bzw. L-*Übergänge*

Kritische Anmerkung

Nahezu alle dem Autor bekannten Lehrbücher (Ausnahme z.B. Bergmann-Schäfer) ignorieren einen offensichtlichen Widerspruch zwischen den tatsächlichen Röntgenniveaus und der Schrödinger-Lösung für die Übergangsenergien. Für das Beispiel Pb (s.o.) ist $E_L/E_K = 14/88 = 0.16$, nicht $1/n^2 = 1/4$. Die gute Übereinstimmung von Daten und Schrödinger-Lösung für die *Übergänge* beruht auf einer Kompensation zwischen Abweichungen im *Übergangsfaktor* ($1 - 0.16 = 0.84$ vs. $1 - 0.25 = 0.75$) und vergleichbar großen Abweichungen in den *K-Bindungsenergien:* die L$\rightarrow$K-Übergänge "sehen" nur einen sehr kleinen Teil der insgesamt existierenden Abschirmeffekte.

Wichtig für die weitere Diskussion: Bei hohen Z ist $(\alpha Z)^2$ nicht mehr $\ll 1$, d.h. Berücksichtigung relativistischer Effekte notwendig. *Exaktes* Resultat der Dirac-Gleichung für die $1s_{1/2}$ Eigenwerte

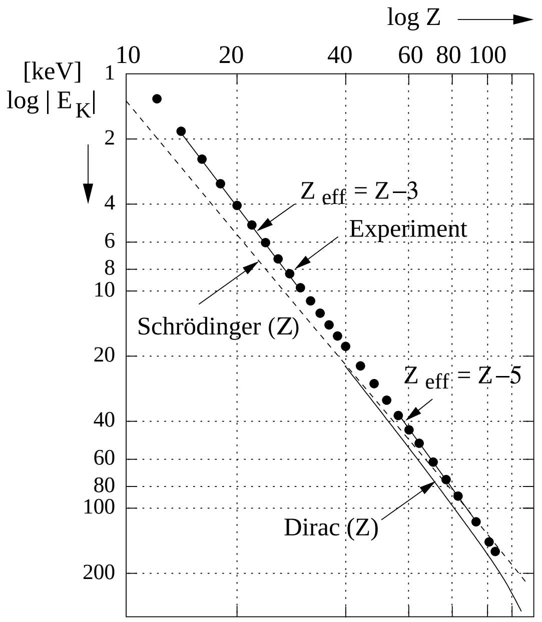
$$E_{1s_{1/2}} = \left(\sqrt{1-(\alpha Z)^2} - 1\right) mc^2$$

Dirac-Eigenwerte
($n = 1, j = \frac{1}{2}$; punktförmige Kerne)

Zusammenhang mit früher:

für $(\alpha Z)^2 \ll 1$ Entwicklung bis zur Ordnung $(\alpha Z)^2 \Rightarrow$ Schrödinger-Lösung
Entwicklung bis zur Ordnung $(\alpha Z)^4 \Rightarrow$ Dirac-Lösung für H-Atom (s. 4.3.4)

Transparente Illustration der wahren Verhältnisse für die K-Bindungsenergien (direkt gemessen, z.B. als K-Kanten beim Photoeffekt, s. 2.2.1) im Vergleich zu den Schrödinger- bzw. Dirac-Werten:



K-Bindungsenergien

Befund:

Experimentelle Daten für E_K zwar $\propto Z_{\text{eff}}^2$, aber numerisch um ca. 13 – 25% geringere Bindung als die theoretischen (Schrödinger- bzw. Dirac-) Werte für $Z_{\text{eff}} = Z$ im gesamten Bereich von Z

Interpretation:

Abschirmung für die K-Schale erheblich größer als $Z_{\text{eff}} = (Z - 1)$, eher zwischen $(Z - 3)$ bei niedrigen und $(Z - 5)$ bei hohen Z (s. auch Beispiel für $_{92}$U weiter unten)

Für die L-Schale is die Abschirmung noch viel drastischer, für $L_{II,III}$ in Pb z.B. $Z_{\text{eff}} = (Z - 20)$

Moderne Fragestellungen

1) Ein-Elektron-Systeme bei hohen Z

Präparation von Ionen mit nur 1 Elektron: Beschleunigung von Ionen mit niedrigen Ladungszuständen in Schwerionen-Beschleunigern; beim nachfolgenden Durchgang durch dünne Folien "Strippen" fast aller Elektronen bis auf ein einziges.

Hauptziel: **Lambshift**-Messungen bei hohen Z unter Nutzung der $(\alpha Z)^4$-Abhängigkeit relativ zum H-Atom; Test der QED in Bereichen extrem hoher $\vec{E}$ und $\vec{B}$-Felder (dadurch unterschiedlich von Tests am H-Atom). Erinnere: Lambshift maskiert (unmessbar) in gefüllten Schalen; theoretisch nicht genau genug behandelbar

Beispiel: $\mathbf{E_{1s1/2}}$ **für 1-Elektron** $\mathbf{{}_{92}U}$

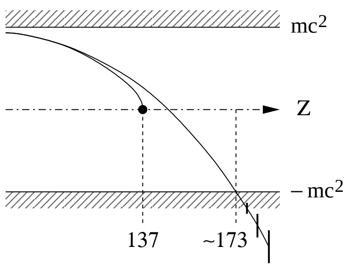
Experimenteller Wert (GSI Darmstadt 2002)		-131.81 ± 0.010 keV
Theoretischer Wert (Dirac + endliche Kernausdehnung + QED)		-131.815 ± 0.001 keV
⇒ Extraktion der Lambshift	exp.	469 ± 10 eV
	theor.	465 ± 1 eV

Nebenprodukt: Vergleich mit K-Energie von ${}_{92}$U (Effekte der endlichen Kernausdehnung ($\sim$+0.2 keV) und QED (bis auf eV) dabei identisch): $E_K = -115.6$ keV

⇒ 12% schwächer gebunden wegen Abschirmung des Kerns durch alle übrigen 91 Elektronen

⇒ $Z_{\text{eff}} \approx Z - 5$

2) Hypothethisch: **Atome mit Z > 137**



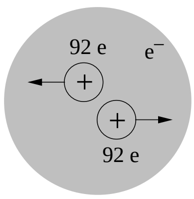
Dirac-Resultat imaginär für $Z > 137$ (mathematisch verursacht durch punktförmigen Kern)

Lösung durch Korrektur auf endliche Kernausdehnung. Bindungsenergie $< -2mc^2$ für $Z \geq 173$ ("Eintauchen in das negative Energiekontinuum")

Konsequenz: Ein "nackter" Kern mit $Z \geq 173$ erzeugt in seiner zunächst ungeladenen Umgebung *spontan* ein e^+e^--Paar; das Elektron bindet in $1s_{1/2}$, das Positron verlässt das System als freies Teilchen. Die Umgebung des Kerns wird dadurch negativ aufgeladen: "Zerfall des neutralen Vakuums in ein geladenes" in extrem hohen elektrischen Feldern.

Science Fiction?

Experimente bei GSI Darmstadt zwischen 1980 und 1995 an sogenannten *"Quasi-Atomen"*:



Zwei langsam (im Vergleich zur "Bahngeschwindigkeit" des Elektrons) aneinander vorbeifliegende Urankerne mit je $Z = 92$ bilden vorübergehend ein System mit $Z = 184$, das für das 1s-Elektron beinahe wie ein "normaler" Kern erscheint. Das 1s-Elektron ist hier hochrelativistisch; die Wellenfunktion ist vollständig auf die Kerne und die unmittelbare Umgebung konzentriert.

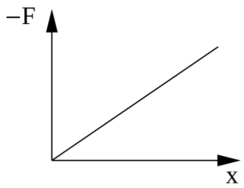
Suche nach monoenergetischen Positronen aus solchen Stößen bis heute leider inkonklusiv; Problem bleibt weiterhin offen

4.4 Moleküle: Vibrationen und Rotationen

Die Dynamik der Moleküle ist ebenso wie die detailierte Atomphysik Gegenstand der Physik IV. Wegen grundsätzlicher Bedeutung hier vorweggenommen: der *harmonische Oszillator* als eines der 3 wichtigsten Beispiele für gebundene Zustände in der Quantenmechanik (neben dem Kasten- und dem $1/r$-Potential), die *Vibration von Molekülen* als einfaches Anwendungsbeispiel, die *Rotation von Molekülen* als das Paradebeispiel eines freien (starren) Rotators in der Quantenmechanik, und die *spezifischen Wärmen* von Gasen als einer der historisch frühesten experimentellen Hinweise auf Quantelung in mikroskopischen Systemen.

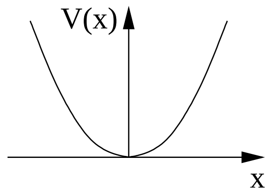
4.4.1 Der quantisierte harmonische Oszillator

Klassischer Oszillator



Hookesches Gesetz
für rücktreibende Kraft
einer gespannten Feder

$$F = -cx$$



zugehöriges Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}cx^2$$

Dynamik: z.B. zwei durch die Feder verbundene Massen m_1 und m_2 mit reduzierter Masse μ

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Bewegungsgleichung $$\mu \frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + cx = 0$$

Harmonische Lösungen $$x = x_0 \sin(\omega_0 t + \varphi) \quad \text{mit} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{c}{\mu}}$$

Amplitude x_0 und Phase φ definiert durch die Anfangsbedingungen

Quantenmechanische Beschreibung

Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators (in 1 Dimension)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}cx^2\right)\psi(x) = 0$$

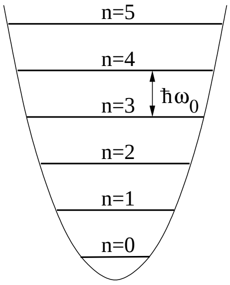
Ansatz für $\psi(x)$ und Lösungsweg siehe Literatur (in allen Lehrbüchern enthalten)

Resultate

1) Eigenwerte der Energie

Quantelung (wie immer) aus Randbedingungen; 1 Dimension, kein Spin $\Rightarrow$ 1 Quantenzahl

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0} \qquad n = 0, 1, 2, \ldots;\ \text{ganzzahlig}$$



$E_5 = \frac{11}{2}\hbar\omega_0$

$E_4 = \frac{9}{2}\hbar\omega_0$

$E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega_0$

$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega_0$

$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$

$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$

- Eigenwerte *äquidistant*

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0$$

- *Nullpunktsenergie*

  niedrigster Zustand mit $n = 0$ nicht im Potentialminimum, sondern darüber: Unschärferelation erzwingt Mindest-Bewegungsenergie $\Delta p_x^2/2m$ wegen Lokalisierung auf Δx.

2) Eigenfunktionen

$$\boxed{\psi_n(x) = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}(ax)^2} H_n(ax)}$$

mit

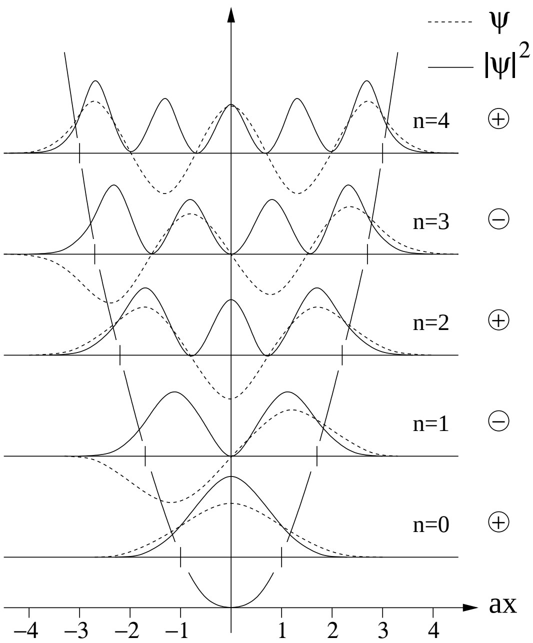
$$a = \left(\frac{\mu\omega_0}{\hbar}\right)^{1/2} = \left(\frac{\sqrt{\mu c}}{\hbar}\right)^{1/2}$$

und

$$H_n(ax) = (-1)^n e^{+(ax)^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}(ax)^n}\left(e^{-(ax)^2}\right) \qquad \text{Hermitesche Polynome}$$

Der Vorfaktor der $\psi_n(x)$ stellt die Normalisierung von $|\psi(x)|^2$ auf 1 sicher.

Beispiele für die niedrigsten Zustände:



$\boxed{n = 2}$

$\psi_2(x) \propto (4a^2x^2 - 2)e^{-(1/2)a^2x^2}$

$\boxed{n = 1}$

$\psi_1(x) \propto (2ax)e^{-(1/2)a^2x^2}$

$\boxed{n = 0}$

$\psi_0(x) \propto e^{-(1/2)a^2x^2}$

Nullpunkts-“Schwingung”

ψ_0 und $|\psi_0|^2$ Gauß-Funktionen zentriert bei $x = 0$

Beachte folgende Eigenschaften der $\psi_n(x)$:

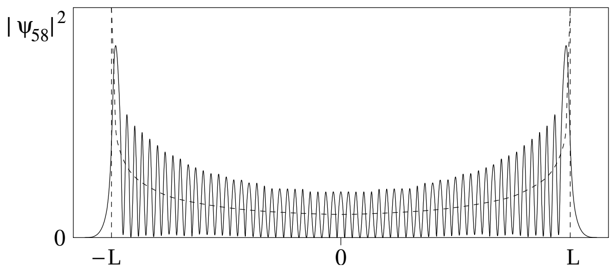
1) Alle Wellenfunktionen sind $\neq 0$ ***außerhalb*** des klassisch erlaubten Bereichs ($V(x) > E_n$, im Bild auf der jeweiligen Achse markiert)

   $\Rightarrow$ Exponentiell abklingendes Eindringen in den klassisch verbotenen Bereich (Tunneleffekt)

2) Wellenfunktionen haben definierte *"Parität"* (die beim H-Atom erwähnten $\Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$ ebenfalls, dort aber nicht diskutiert): bei Spiegelung am Ursprung ($x \to -x$) kein Vorzeichenwechsel für gerade n (+), Vorzeichenwechsel für ungerade n (-).

3) Asymptotisches Verhalten für $n \gg 1$

$n = 58$



$(n+1)$ Maxima für $|\psi_n|^2$

Hauptmaxima außen: Ozsillation um die *klassisch* zu erwartende Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines schwingenden Systems (maximal an den Umkehrpunkten $x = \pm L$)

$\Rightarrow$ *Bohrsches Korrespondenzprinzip:* Übergang zur klassischen Physik im Grenzfall sehr hoher Quantenzahlen

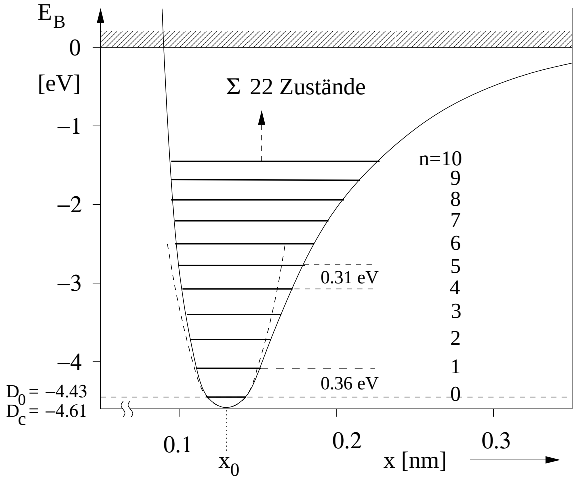
4.4.2 Vibration von Molekülen

Bindung von Atomen zu Molekülen s. einführende Chemievorlesung; s. Physik IV. Verschiedene Bindungstypen, z.B. ionen-ähnlich (HCl), kovalent (H_2) etc. Hier Beschränkung auf 2-atomige Moleküle: *lokales Minimum* in der potentiellen Energie als Funktion des interatomaren Abstands x $\Rightarrow$ 1-dimensionales Problem

1. Beispiel: **HCl-Molekül**

H-Elektron $\to$ Cl; Bindung H^+Cl^- ionisch; starkes Dipolmoment

Potentialverlauf $V(x)$: für kleine x elektrostatische Abstoßung durch die spürbar werdenden positiv geladenen Atomkerne; für große x Anziehung durch die entgegengesetzt geladenen H^+ und Cl^--Ionen, wegen Coulombgesetz $\to 0$ für $x \to \infty$; dazwischen Potentialminimum bei $x = x_0 \approx 0.13$ nm



Potential $V(x)$ *anharmonisch*; in Nähe des Minimums $x = x_0$ jedoch harmonische Näherung (Taylor-Entwicklung) mit $V(x) \approx (1/2)c(x-x_0)^2$ möglich

Eigenzustände wegen zunehmender Abweichung von der harmonischen Näherung nur "fast" äquidistant; $\hbar\omega_0 = 0.36$ eV für $(E_1 - E_0)$, <0.36 eV für höhere n

Bindungsenergie ("Dissoziationsenergie") $D_0 = -4.43$ eV; dadurch Beschränkung auf insgesamt 22 Zustände (verschieden von H-Atom mit $n \to \infty$!)

Übergänge mit *Auswahlregel* $\Delta n = \pm 1$ zwischen benachbarten Zuständen; Emission oder Absorption *elektrischer Dipolstrahlung*, dabei Änderung des Dipolmoments und Änderung der Parität der Wellenfunktion

2. Beispiel **H_2-Molekül**

Kovalente Bindung, homonukleares Molekül mit zwei identischen Atomen, kein Dipolmoment

Potentialverlauf $V(x)$ qualitativ ähnlich zu HCl. Jedoch keine elektrischen Dipolübergänge zwischen Nachbarniveaus möglich. Stattdessen (Physik IV): Verknüpfung mit elektronischen Übergängen, Raman-Spektren, Photo-Elektron-Spektren (s.u. Bild Rohlf)

Besonderheit: Vergleich H_2 mit D_2-Molekül

$\Rightarrow$ direkter **Hinweis auf Nullpunktsenergie**

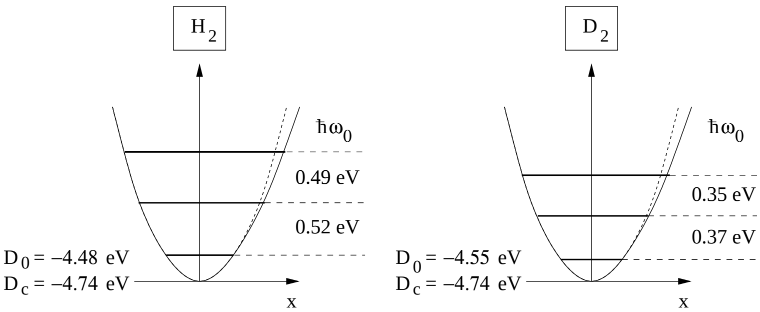
Grundgedanke:

Wasserstoff hat mehrere Isotope je nach Masse des Kerns: normaler Wasserstoff H (p) mit $A = 1$, Deuterium D (pn) mit $A = 2$, und Tritium T (pnn) mit $A = 3$.

D_2 vs. H_2-Molekül: Potential $V(x)$ völlig *identisch*, $D_c = -4.74$ eV in beiden Fällen

aber	reduzierte Masse μ	$1/2$
	$\hbar\omega_0 \propto \sqrt{\mu}$	$1/\sqrt{2}$
somit	$\hbar\omega_{0,\mathrm{H}_2} = 0.52$ eV	$\Rightarrow \hbar\omega_{0,\mathrm{D}_2} = 0.37$ eV

Dissoziationsenergie D_0 definiert als Differenz von Nullpunktsenergie und Kontinuumsgrenze, somit *Unterschied* ΔD_0 zwischen D_2 und H_2 gegeben durch 1/2 Unterschied $\Delta(\hbar\omega_0)$



experimenteller Unterschied der Dissoziationsenergien D_0 ca. 0.07 eV

direkte *Messung des Unterschieds* und damit der *Existenz der Nullpunktsenergie*

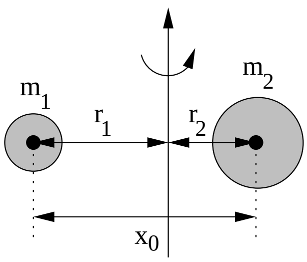
Merkregel für typische Übergangsenergien zwischen Vibrationszuständen in 2-atomigen Molekülen:

$$\boxed{\begin{aligned} E_{\mathrm{vib}} = \hbar\omega_0 &\approx 0.1\ldots0.5 \text{ eV} \\ \lambda_{\mathrm{vib}} &\approx \text{einige } \mu\text{m (im nahen Infrarot)} \end{aligned}}$$

♠ Hinweis Bild: Rohlf Fig. 10-6 (Photoeffekt am Molekül H_2^+; Spektrum der emittierten Photoelektronen als Spiegelbild der insgesamt 15 Vibrationszustände von H_2^+)

4.4.3 Rotation von Molekülen

Energie eines **klassischen starren Rotators** mit Rotationsfrequenz ω, Trägheitsmoment J und Drehimpuls $L = J\omega$



$$E_R = \frac{1}{2}J\omega^2 = \frac{L^2}{2J} = \frac{L^2}{2\mu x_0^2}$$

dabei $\quad J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu x_0^2$

mit $\quad \mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad$ wie früher

Erinnere bei Atomen: Gesamtmasse im nahezu punktförmigen Kern konzentriert

Freier Rotator in der Quantenmechanik: direkte Übernahme der Resultate zum Ein-Elektron-System (4.3.2) für $\vec{L}^2$ und ψ_{lm}

$$\boxed{\vec{L}^2 = l(l+1)\hbar^2}$$

Eigenwerte des Drehimpulses; $\quad l = 1, 2, \ldots$

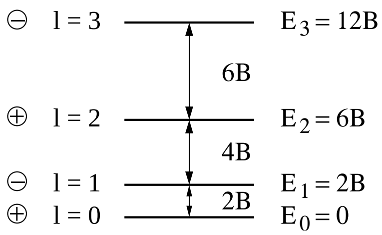
$$\boxed{\psi_{lm} = \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)}$$

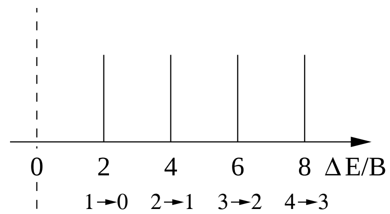
Eigenfunktionen der Rotation

$$\Rightarrow \quad \boxed{E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} l(l+1)}$$

Eigenwerte der Rotationsenergie
$\big($aus $\quad E_R = L^2/(2\mu r_0^2)\big)$

Illustration des Termschemas der Rotation (Abkürzung $B = \hbar^2/2\mu x_0^2$)



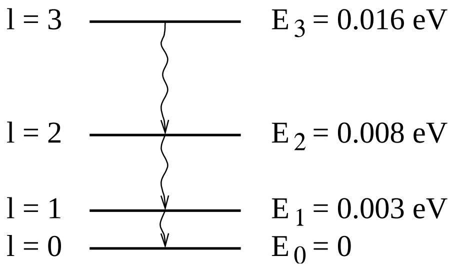


Termenergien $\sim$ quadratisch mit l zunehmend

Termdifferenzen (Übergangsenergien) linear mit l zunehmend

1. Beispiel: **HCl-Molekül**

Permanentes Dipolmoment (s. 4.4.2) $\quad \Rightarrow$ alle Rotationszustände sind realisiert



$$B = \frac{\hbar^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} \approx 1.3 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

Übergänge mit *Auswahlregel* $\Delta l = \pm 1$ zwischen benachbarten Zuständen (wie im H-Atom); Emission oder Absorption *elektrischer Dipolstrahlung*, dabei Änderung der Parität der Wellenfunktion (wie im H-Atom und bei der Vibration)

♠ Hinweis Bild: Haken-Wolf "Molekülphysik …" Fig. 9.1 (Absorptions-Spektrum von HCl)

2. Beispiel: **Homonukleare Moleküle wie O_2, H_2**

Komplizierung: Symmetriecharakter der Gesamtwellenfunktion des Moleküls (einschließlich Spin des Atomkerns) bezüglich Austausch der beiden Atome bestimmt die überhaupt möglichen Rotationszustände; in O_2 z.B. nur $l = 0, 2, 4, \ldots$; s. Physik IV

Merkregel für typische Übergangsenergien zwischen Rotationszuständen in 2-atomigen Molekülen

$$\boxed{\begin{array}{c} \Delta E_R = \text{ einige } \dfrac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} \approx 0.001 \ldots 0.01 \text{ eV} \\ \lambda_R \approx 100 \ldots 1000\ \mu\text{m (im fernen Infrarot und länger)} \end{array}}$$

4.4.4 Spezifische Wärmen 2-atomiger Gase

Erinnere klassische statistische Thermodynamik:

Gesamtenergie eines Gases/Molekül:

$$E_{\text{ges}} = \frac{1}{2} f\, kT$$

Dabei f Zahl der *Freiheitsgrade* des Moleküls, definiert als "Zahl der kanonisch konjugierten Variablen, die quadratisch zur Gesamtenergie beitragen"

Spezifische Wärme/Molekül bei konstantem Volumen

$$\boxed{C_V = \left(\frac{\partial E_{\text{ges}}}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{2} f k}$$

2-atomige Moleküle

3 Freiheitsgrade der Translation: $E_{\text{kin}} = \dfrac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$

2 Freiheitsgrade der Vibration: $E_{\text{vib}} = \dfrac{1}{2\mu} p_{x_{\text{rel}}}^2 + \dfrac{1}{2} c x_{\text{rel}}^2$

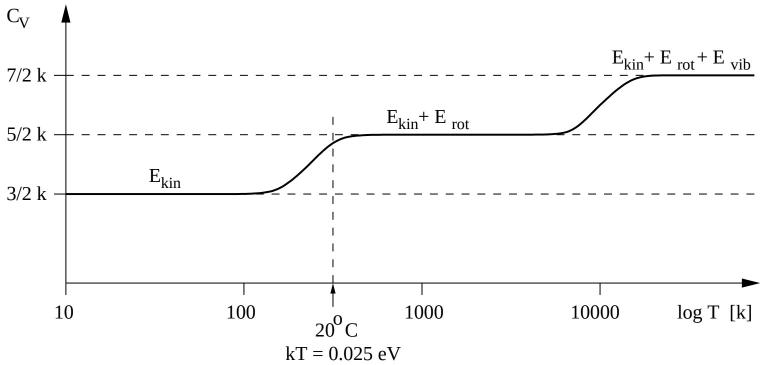
2 Freiheitsgrade der Rotation: $E_{\text{rot}} = \dfrac{L_x^2}{2J_x}$ sowie $\dfrac{L_y^2}{2J_y}$

(Rotation um die Symmetrieache entfällt, da sie quantenmechnisch nicht definierbar ist: keine Randbedingungen für $\Phi(\varphi)$)

Somit zu erwarten: $C_V = \dfrac{7}{2} k$

Beobachtung stattdessen: $7/2k$ nur als Grenzfall bei sehr hohen Temperaturen, darunter weniger: **"Einfrieren von Freiheitsgraden"** möglich (bekannt bereits vor 1900, doch damals rätselhaft)

Beispiel: **H_2-Molekül**



Empirischer Verlauf von $C_V = C_V(T)$

Interpretation

Im *thermischen Gleichgewicht* bei Temperaturen $>10^4$ K freier Austausch aller Energieformen (kinetisch, Rotation, Vibration) in *inelastischen* Stößen zwischen den Molekülen. Bei kleineren Temperaturen jedoch: Behinderung des Austausches wegen *Quantelung* von Rotation und Vibration.

Kriterien:

$E_{\text{kin}} = \frac{3}{2}kT < E_{1,\text{vib}} = \hbar\omega_0 = 0.1\ldots0.5$ eV je nach Gas
$\Rightarrow$ Einfrieren der Vibration bei Temperaturen $T = 1000\ldots5000$ K

$E_{\text{kin}} = \frac{3}{2}kT < E_{1,\text{rot}} = 2\left(\frac{\hbar^2}{2J}\right) = 0.001\ldots0.01$ eV je nach Gas
$\Rightarrow$ Einfrieren der Rotation bei Temperaturen $T = 10\ldots100$ K

Die analytische Beschreibung der Übergänge erfolgt mit Boltzmann-Faktoren $e^{-E_{\text{vib}}/kT}$ bzw. $e^{-E_{\text{rot}}/kT}$ für die Besetzungswahrscheinlichkeiten.

Resumée: Bei Zimmertemperatur $C_V \approx 5/2$ k (bzw. $5/2R$ pro Mol) für die meisten 2-atomigen Gase