

3. Teil Grundzüge der Quantenphysik

Zusätzliche Literatur:

Basedevant & Dalibard, Quantum Mechanics

Schwabl, Quantenmechanik

Alonso/Finn, Quantenphysik

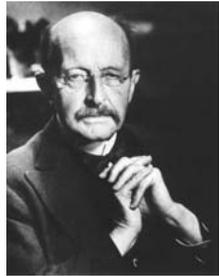
Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics

Messiah, Quantenmechanik

Ergänzende Literatur wird beim jeweiligen Thema angegeben!

0. Kurze Einleitung

Geschichtliches:



1900: Planck'sches Strahlungsgesetz

1905: Einsteins Quantenhypothese für den Photoeffekt

1913: Bohrsches Atommodell

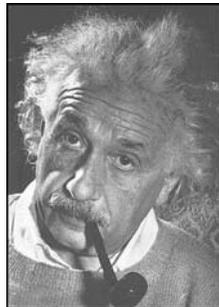
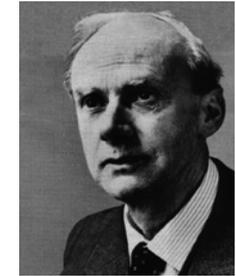
1924: Louis de Broglie: Materiewellen

1925: Formulierung des Pauli-Prinzips

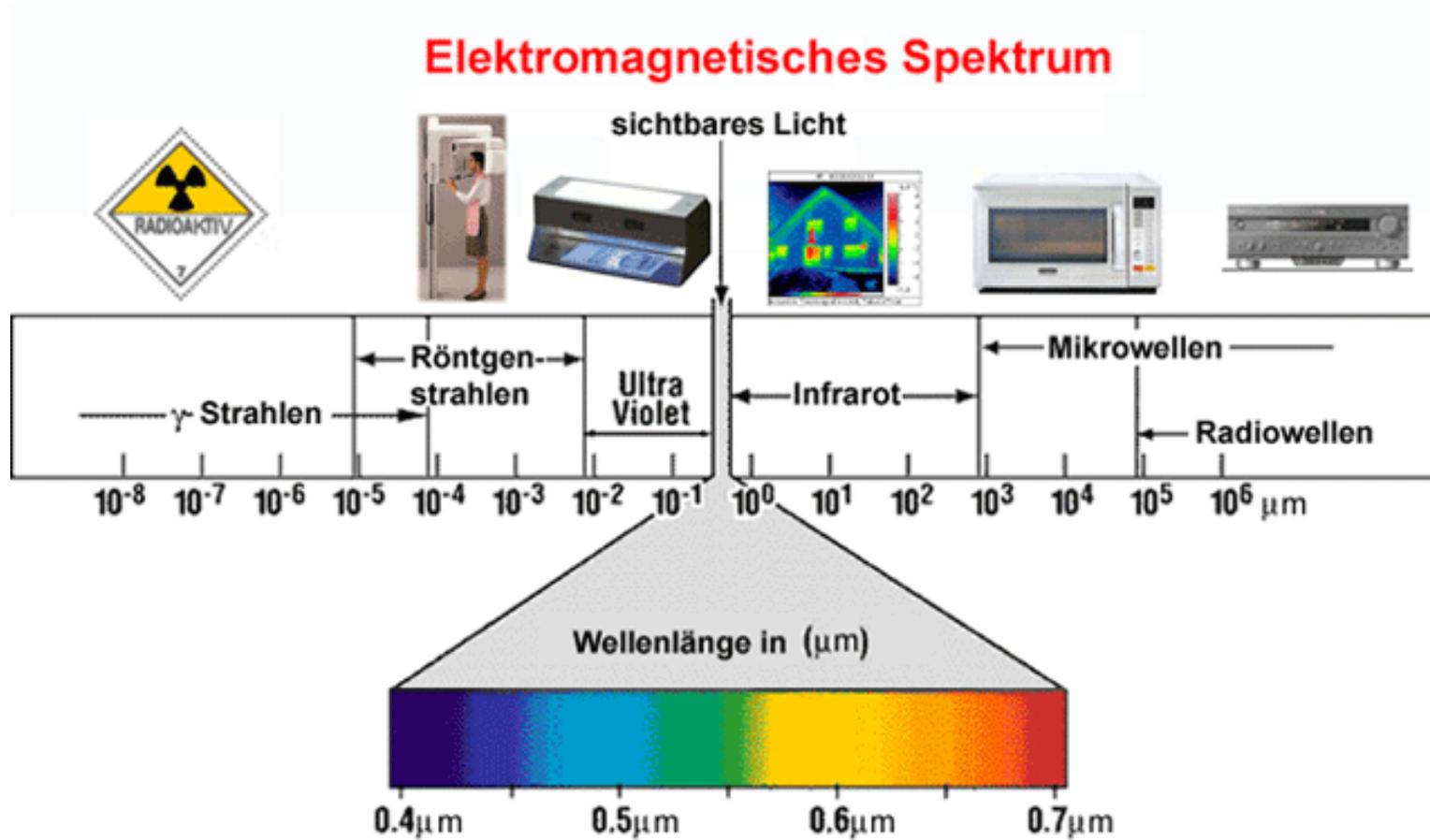
1925/26: Matrizenmechanik Heisenberg, Born

1926: Schrödinger-Gleichung

1928: Dirac-Gleichung



Das elektromagnetische Spektrum



1. Phenomenologie der Quantenphysik

1.1. Quanteneffekte von Licht

1.1.1. Plancksches Strahlungsgesetz

Licht ist eine elektromagnetische Welle. Man definiert verschiedene Größen für die elektromagnetische Strahlung:

Die Intensität (Energieflussdichte, Leistungsdichte) ist durch den Poynting-Vektor definiert:

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \qquad [\vec{S}] = \frac{V \cdot A}{m^2} = \frac{J}{s \cdot m^2}$$

S hat die Dimension: Energie pro Volumen mal Geschwindigkeit.

$$\frac{J}{s \cdot m^2} = \frac{J}{m^3} \frac{m}{s}$$

Eine Integration über eine die Quelle umschließende Fläche ergibt die Leistung der Quelle:

$$\Phi = \int_A \vec{S} d\vec{A} = \int_A \vec{S} \cdot \hat{n} r^2 d\Omega \qquad d\Omega = d\phi d \cos \theta$$

↙
Raumwinkel

Die Energiedichte ist gegeben als:

$$w_E = \int \int w_{E,\omega,\Omega} d\omega d\Omega \quad [w_E] = J/m^3$$

Mit der spektralen Energiedichte pro Raumwinkel:

$$w_{E,\omega,\Omega} \quad [w_{E,\omega,\Omega}] = J/(m^3 Hz sr)$$

Für ein isotropes Feld ist die spektrale Energiedichte:

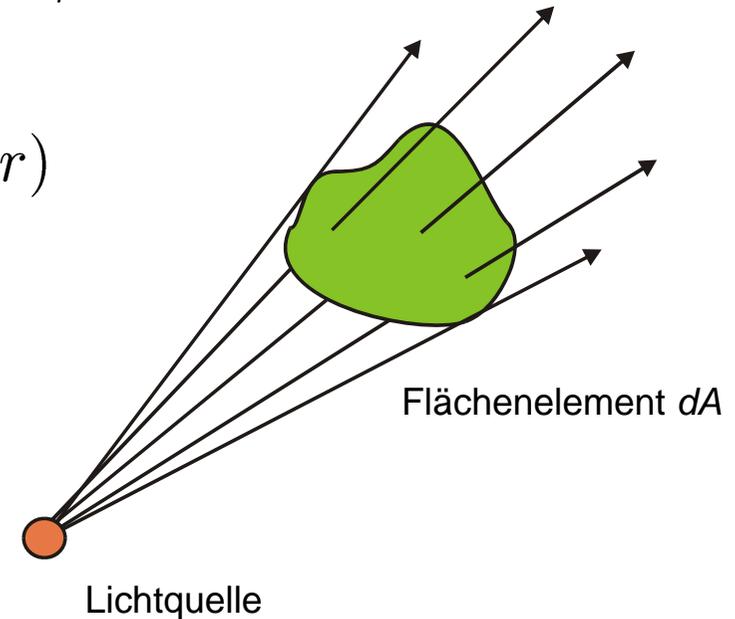
$$w_{E,\omega} = \int w_{E,\omega,\Omega} d\Omega = 4\pi w_{E,\omega,\Omega}$$

Für ein monochromatisches Feld folgt:

$$\begin{aligned} w_E &= \epsilon_0 \int |\vec{E}|^2 \delta(\omega_0 - \omega) d\omega \\ &= \epsilon_0 |\vec{E}(\omega_0)|^2 = |\vec{S}|/c \end{aligned}$$

Für die Intensität I (Leistung pro Flächeneinheit) folgt somit:

$$I = |\vec{S}| = c\epsilon_0 |\vec{E}(\omega_0)|^2 \quad [I] = W/m^2$$



Man findet viele weitere Bezeichnungen für Strahlungsgrößen, z.B photometrische Größen:

Lichtstrom

$$\Phi_V = K_m \int_{380 \text{ nm}}^{780 \text{ nm}} V(\lambda) \frac{\partial \Phi(\lambda)}{\partial \lambda} d\lambda$$

↑
Konstante (683 lm W⁻¹)
←
Beleuchtungsfunktion
des menschl. Auges

$$[\Phi_V] = \text{lm} \quad \text{Einheit: lumen}$$

Man findet oft die Bezeichnung ANSI-lumen (von American National Standards Institut)

Def: Die Leistung von 1 W einer monochromatischen Welle (bei 555 nm) entspricht 683 lumen

Beleuchtungsstärke

$$E_V = \int \frac{\partial^2 \Phi_V}{\partial A \partial \Omega} d\Omega$$

↑
Fläche der ausgedehnten Lichtquelle

$$[E_V] = \text{lx} \quad \text{Einheit: lux}$$

Lichtstärke

$$I_V = \frac{\partial \Phi_V}{\partial \Omega}$$

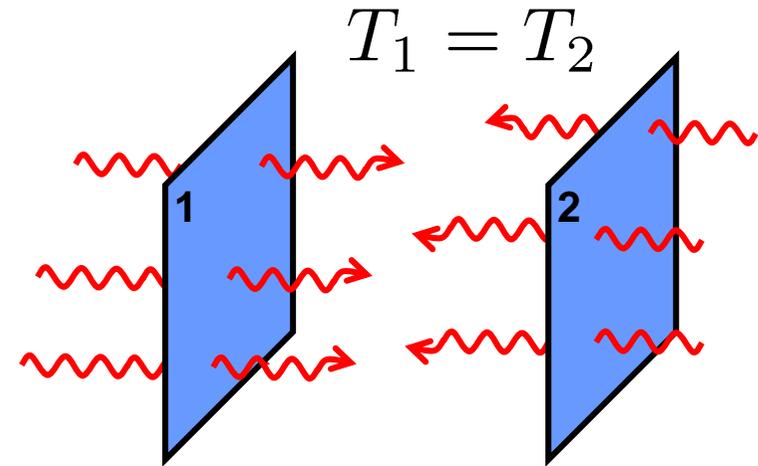
$$[I_V] = \text{cd} \quad \text{Einheit: candela}$$

Der Schwarze Strahler

Man betrachte zwei strahlende Platten mit Absorptions(Emissions)koeffizient $a_{1,2}$ ($e_{1,2}$) im thermodynamischen Gleichgewicht:

$$a_{1,2} + e_{1,2} = 1$$

$$a_2(\lambda)P_1(\lambda) = a_1(\lambda)P_2(\lambda)$$



Leistungsaufnahme von (2) aus dem Feld von (1) = Leistungsaufn. von (1) aus dem Feld von (2)

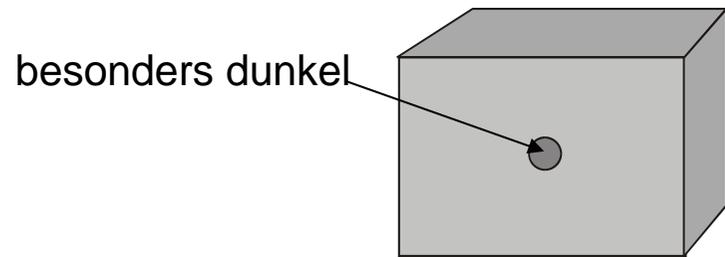
$$\begin{aligned} P_1(\lambda) &= a_1(\lambda)P_2(\lambda)/a_2(\lambda) \\ &= a_1(\lambda)P_S(\lambda) \end{aligned}$$

Kirchhoffsches
Strahlungsgesetz

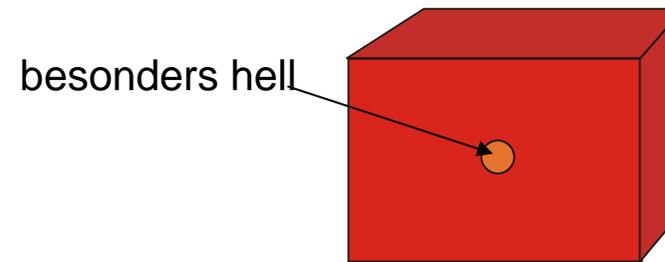
Ein schwarzer Strahler hat ein Absorptionsvermögen von 1.

Die Strahlungsleistung ist bei einem Schwarzen Strahler maximal!

Realisierung von schwarzen Strahlern z.B. durch vollständig geschwärmte Metallkästen mit einem Loch (deshalb auch Hohlraumstrahlung):



geringe Temperatur



hohe Temperatur

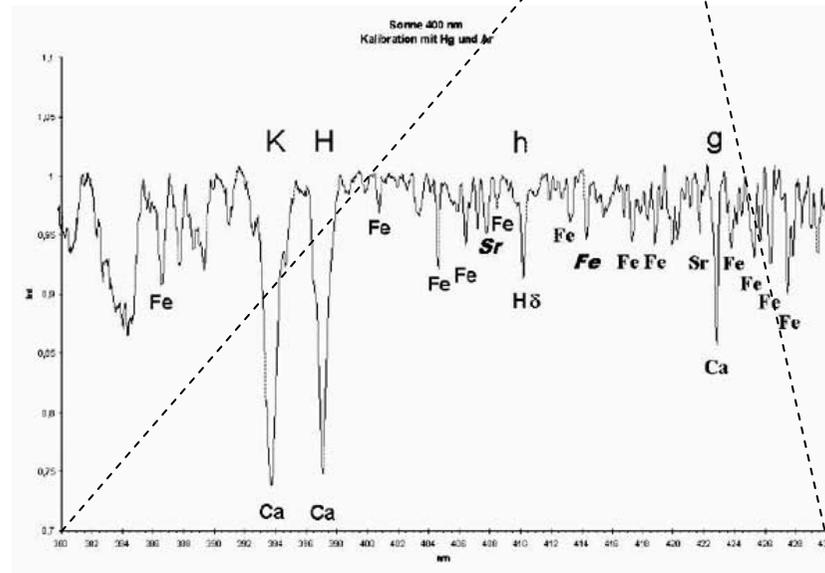
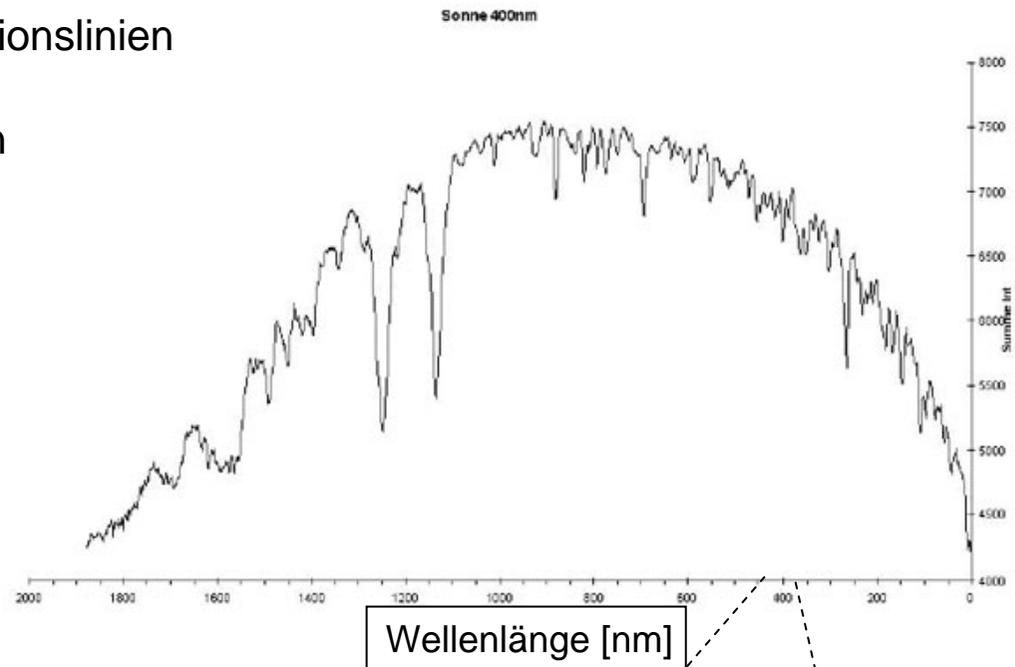
Einfache fundamentale Frage: Wie sieht die spektrale Energiedichte für einen Schwarzen Strahler aus (Energiedichte der Hohlraumstrahlung)?

➡ relativ einfach zu messen:

(z.B. Sonne als schwarzer Strahler mit einer Temperatur von 5800 K)

Man kann verschiedene Vorüberlegungen anstellen, wie $w_{E,\omega}$ aussehen muss. Aus der Thermodynamik folgt z.B., dass die Strahlung isotrop und homogen sein muss.

Teil des Sonnenspektrums:
 Die Einbrüche sind Absorptionslinien
 durch spezifische atomare
 Übergänge in Bestandteilen
 der Sonnenmaterie.



Herleitung der Planckschen Formel

s. auch R. Loudon, „The Quantum Theory of Light“

Um 1900 waren die folgenden Gesetze/Zusammenhänge bekannt, teils aus experimentellem Befund, teils aus thermodynamischen Erwägungen:

1) Wien'sches Verschiebungsgesetz:

$$\lambda_{max} \cdot T = 2,8978 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$$

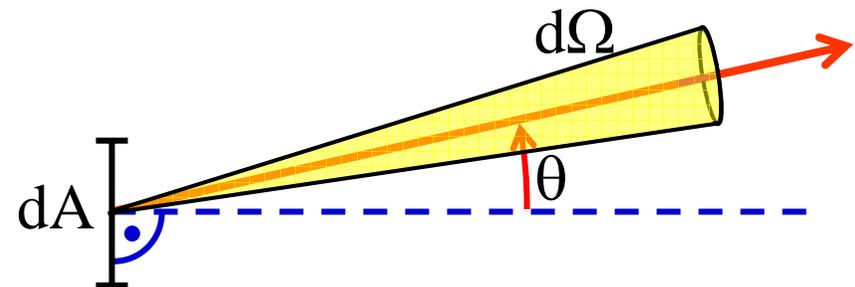
2) Stefan-Boltzmann-Gesetz

(Leistung, die pro Fläche eines schwarzen Strahlers in den Halbraum abgegeben wird):

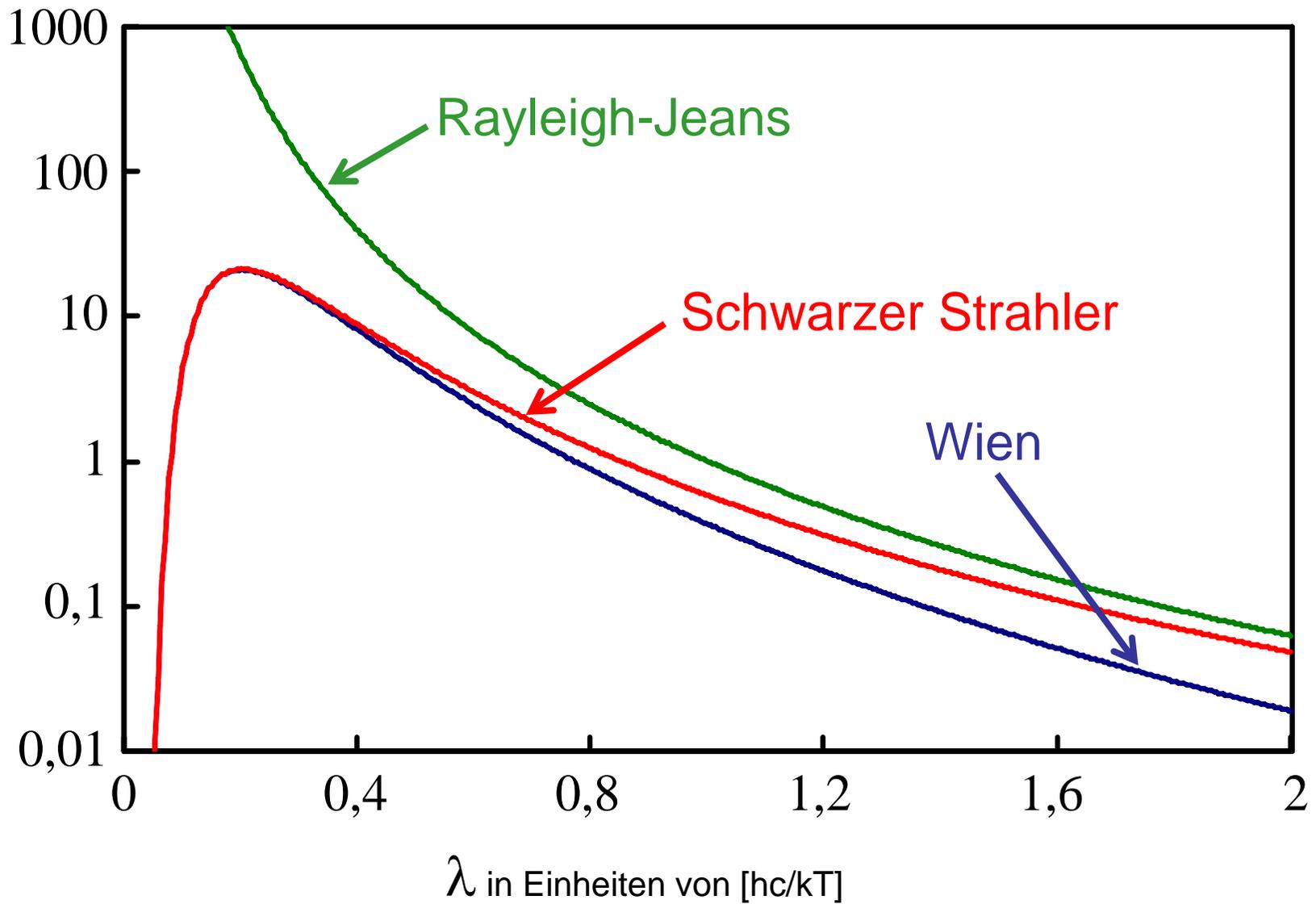
$$\int \int w_{E,\omega} / 4\pi c \cos(\theta) d\omega d\Omega = \sigma T^4 \quad \sigma = 5.6703 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \text{K}^{-4}$$

1) Gesetz von Rayleigh-Jeans:

$$w_{E,\omega}^{R.J.} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T = \frac{k_B T}{\pi^2 c \lambda^2}$$



$w_{E,\lambda}$ in Einheiten von $[2(kT)^5/(h^4c^3)]$



Problem: Das Gesetz von Rayleigh-Jeans ist nur eine Approximation für kleine Frequenzen (grosse Wellenlängen) und der Ausdruck für die gesamte Energiedichte divergiert.

Letzteres bezeichnet man auch als die UV-Katastrophe

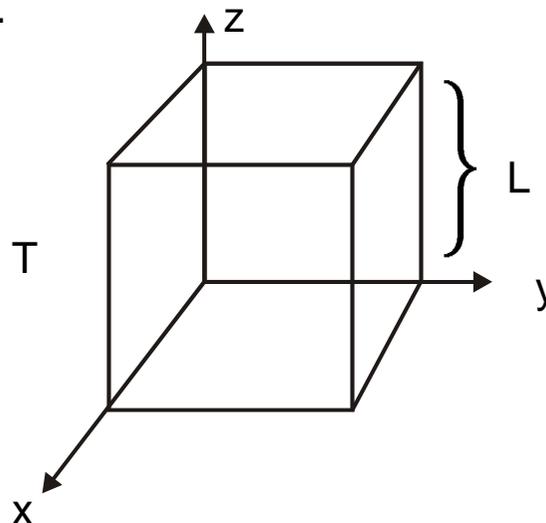
UV-Katastrophe beim Gesetz von Rayleigh-Jeans:

$$\int_0^\infty w_{E,\omega}^{R.J.} d\omega \rightarrow \infty$$



Modendichte des elektromagnetischen Feldes

Planck ging von einem würfelförmigen Hohlraum aus. Das Strahlungsfeld im Inneren des Würfels befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht mit den leitenden Wänden des Würfels bei einer Temperatur T .



Mögliche Lösungen der Wellengleichung $\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$ mit der Randbedingung, dass am Rand des Würfels Knoten der Stehwellen ($E=0$) sind, ergeben sich als:

$$E_x(r, t) = E_x(t) \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$$

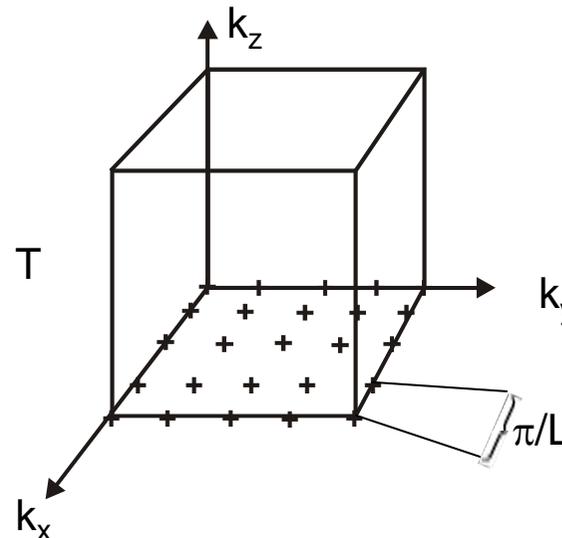
$$E_y(r, t) = E_y(t) \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z)$$

$$E_z(r, t) = E_z(t) \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z)$$

mit $k_x = \pi \nu_x / L$; $k_y = \pi \nu_y / L$; $k_z = \pi \nu_z / L$;

für ganzzahlige $\nu_x, \nu_y, \nu_z = 0, 1, 2, 3, \dots$

Die möglichen Wellenvektoren können ebenfalls im k-Raum (reziproken Raum) als Punkte innerhalb eines Würfels dargestellt werden (der Übersichtlichkeit halber hier nur in der x-y-Ebene):



Die Anzahl $N_k dk$ aller möglichen k -Werte im Volumen $(\pi/L)^3$ ist somit:

$$N_k dk = \frac{1}{8} (4\pi k^2 dk) (\pi/L)^{-3} \times 2 \quad \leftarrow \text{Polarisation}$$

Somit ist die Modendichte $\rho_k dk = k^2 dk / \pi^2$ oder

$$\rho_\omega d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$$

Die spektrale Energiedichte ist dann:

$$w_{E,\omega} = \langle E \rangle \rho_\omega$$

Klassisch würde hieraus mit $\langle E \rangle = k_B T$

sofort das Gesetz von Rayleigh-Jeans folgen.

Plancks Annahme: Jede Mode des Feldes ist mit einem harmonischen Oszillator in den Wänden im thermodynamischen Gleichgewicht. Jeder Oszillator kann nur diskrete Energien annehmen:

$$E_n = n\hbar\omega = nh\nu$$

mit $\hbar = h/(2\pi)$ $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Plancksches Wirkungsquantum

h hat die Dimension einer Wirkung oder eines Drehimpulses (Kraft x Weg x Zeit)

$$[h] = N \cdot m \cdot s$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht ist die Wahrscheinlichkeit P_n ,

dass ein Oszillator die Energie $E_n = n\hbar\omega$ hat, nach der Boltzmann-Verteilung:

$$P_n = \frac{\exp(-n\hbar\omega/k_B T)}{\sum_n \exp(-n\hbar\omega/k_B T)}$$

Im folgenden wird die Abkürzung benutzt: $U = \exp(-\hbar\omega/k_B T)$

Mit dieser Abkürzung ist:

$$P_n = U^n / \sum_n U^n$$

Der Nenner ergibt sich als geometrische Reihe zu: $\sum_n^\infty U^n = 1/(1 - U)$

daher: $P_n = (1 - U)U^n$

Für die mittlere Anregung \bar{n} folgt:

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \sum_n n P_n = (1 - U) \sum_n n U^n \\ &= (1 - U) U \frac{\partial}{\partial U} \sum_n U^n = U / (1 - U) \end{aligned}$$

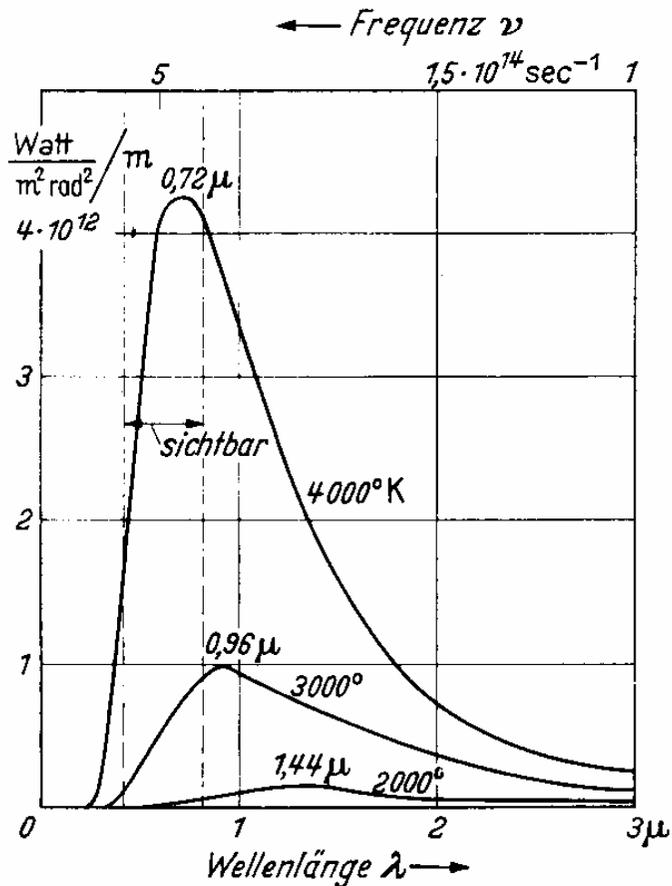
Somit folgt

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$

← Thermische Photonenzahlverteilung (Bose-Statistik)

Damit ergibt sich für die spektrale Energiedichte die Plancksche Strahlungsformel:

$$w_{E,\omega} = \hbar\omega \bar{n} \rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$



Spektrum des schwarzen Strahlers für verschiedene Temperaturen

Bemerkung: Das Wirkungsquantum h ist eine sehr kleine Grösse!

Zahlenbeispiel: Eine Lichtquelle (Glühbirne) von 100 W (typische Effizienz von 1%) emittiert bei einer mittleren Wellenlänge von ungefähr 500 nm

$$0,01 \cdot \frac{100 \cdot 500 \times 10^{-9}}{6,6 \times 10^{-34} \cdot 3 \times 10^8} = 3 \times 10^{18}$$

Photonen pro Sekunde!



Aus der Planckschen Strahlungsformel lassen sich durch Näherung der Exponentialfunktion (für kleine oder grosse T) approximative Formeln finden:

$$1) \quad \hbar\omega \ll k_B T \qquad w_{E,\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T$$

Klassischer Grenzfall: $\hbar \rightarrow 0$ Rayleigh-Jeans

$$2) \quad \hbar\omega > k_B T \qquad w_{E,\omega} = \frac{4(2\pi)^4 h}{c^3} \omega^3 e^{-\hbar\omega/k_B T}$$

Wiensches Strahlungsgesetz

$$3) \text{ Maximum von } w_{E,\omega} \qquad \lambda_{max} = 0,2014 \frac{hc}{k_B T}$$
$$T \lambda_{max} = 2,898 \times 10^{-3} m \cdot K$$

Wiensches Verschiebungsgesetz

$$4) \text{ Gesamte Leistungsdichte} \qquad \frac{c}{4} \int w_{E,\omega} d\omega = \sigma T^4$$

Stefan-Boltzmann-Gesetz

Der Name „Photon“ für die Schwingungsmoden des Feldes wurde erst später (1926) durch den Chemiker G. N. Lewis vorgeschlagen.



G. N. Lewis

Bemerkung: Die Plancksche Theorie macht keine Aussage über das Wesen von Licht als einem „Teilchen“. Dies wurde erst 1905 von Einstein in seinem Paper zum Photoeffekt vorgeschlagen, in dem er von unteilbaren Raumpunkten mit der Energie $\hbar\omega$ spricht (siehe 1.1.2).

Die Wahrscheinlichkeit P_n lässt sich auch schreiben als:

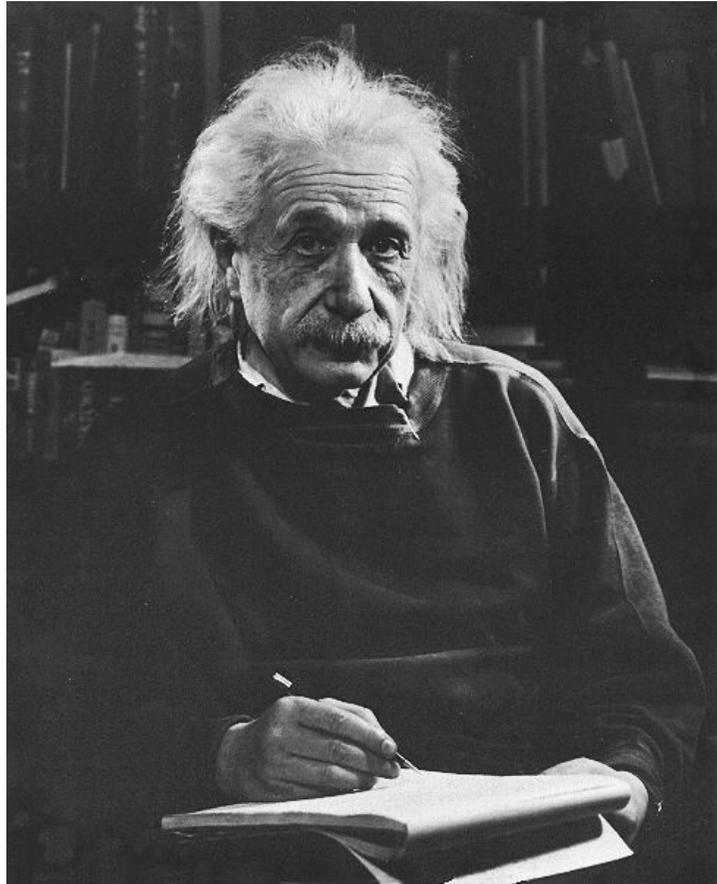
$$P_n = \frac{(\bar{n})^n}{(1+\bar{n})^{1+n}}$$

Für die statistische Grösse Varianz folgt mit dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$\Delta n = \sqrt{\bar{n}^2 - \bar{n}^2} = \bar{n}^2 + \bar{n}$$

Die Fluktuationen sind also immer grösser als der Mittelwert der Verteilung.

1.1.2. Der Photoeffekt

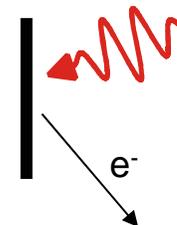


*Einstein 1905 (Annalen der Physik):
Über einen die Erzeugung und Verwandlung
des Lichtes betreffenden heuristischen
Gesichtspunkt*

„Es scheint mir nun in der Tat, daß die Beobachtungen über die „schwarze Strahlung“, ..., und andere die Erzeugung bzw. Verwandlung des Lichtes betreffende Erscheinungsgruppen besser verständlich erscheinen unter der Annahme, daß die Energie des Lichtes diskontinuierlich im Raume verteilt sei. ... es besteht dieselbe aus einer endlichen Anzahl von in Raumpunkten lokalisierten Energiequanten, welche sich bewegen, ohne sich zu teilen und nur als Ganze absorbiert und erzeugt werden können.

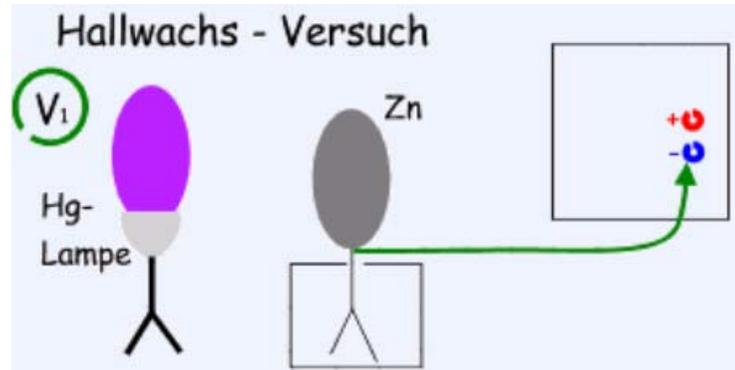
Photoelektrischer Effekt:

$$E_{\text{kin}} = h\nu - W$$

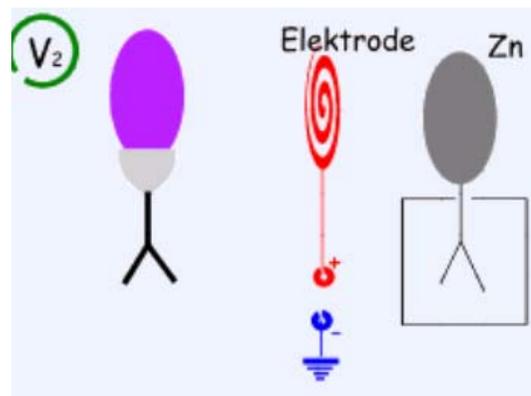


Beobachtung von Hallwachs 1888:

- a) Ein negativ aufgeladenes Elektrometer wird durch Lichteinstrahlung entladen.
- b) Ein positiv aufgeladenes Elektrometer bleibt geladen.

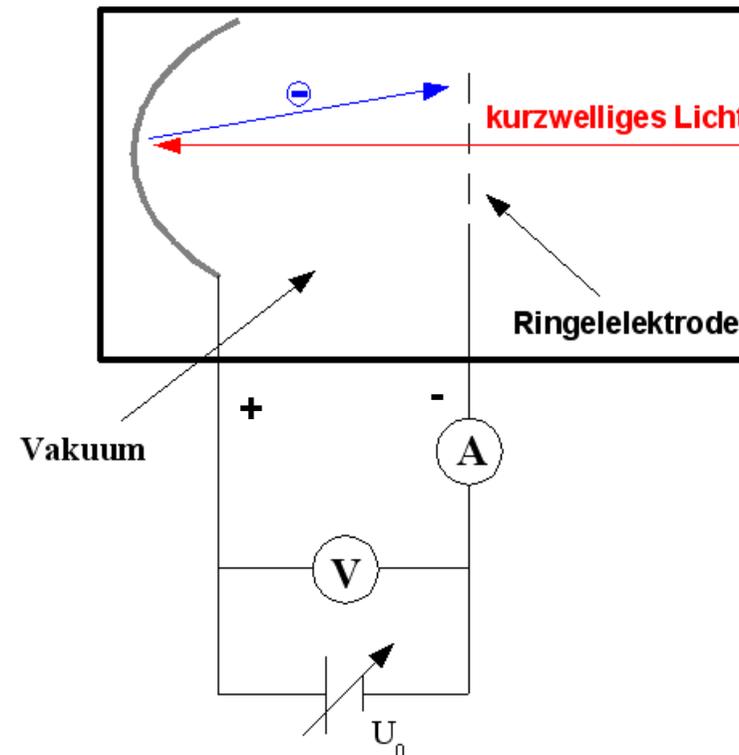


Entladung bei negativer Ladung



Negative Aufladung

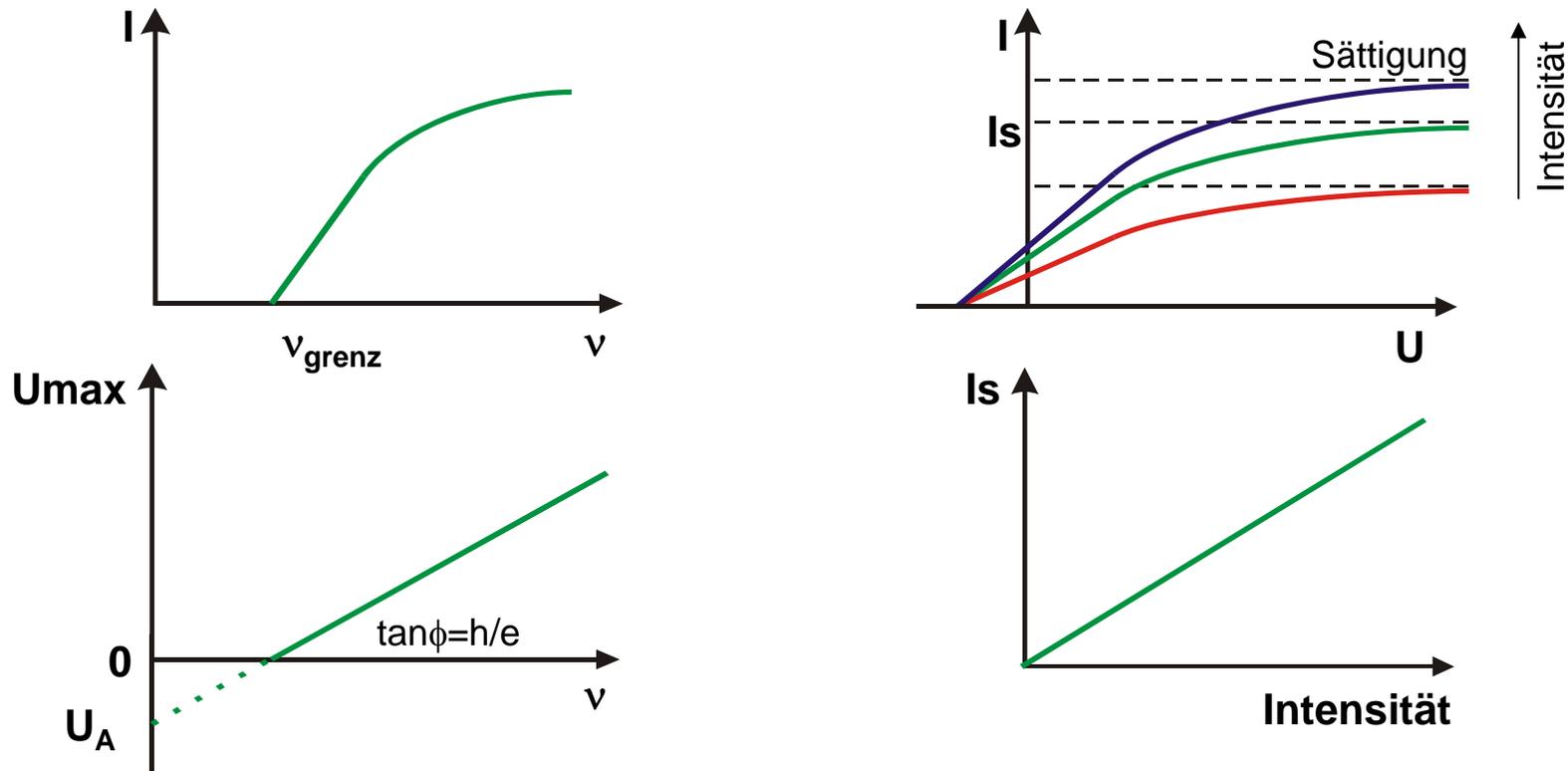
Quantitativ kann der Effekt mit der Gegenfeldmethode untersucht werden:



Beobachtungen:

- a) Der Strom setzt oberhalb einer charakteristischen Frequenz ν_{grenz} ein.
- b) Wenn die Gegenspannung U_{max} einen bestimmten Wert überschreitet, fließt kein Strom mehr.
- c) Der Sättigungsstrom ist der Intensität des einfallenden Lichtes proportional.
- d) Es existiert praktisch keine Zeitverzögerung zwischen dem Lichteinfall und dem Einsetzen des Stromes.

Klassisch ist die Frequenzabhängigkeit zunächst nicht zu erklären!



Eine Erklärung fand Einstein unmittelbar aus der „Photonenhypothese“:

Energiebilanz:

$$\frac{1}{2} m_e v_e^2 = h\nu - eU_A$$

kinetische Energie der Photoelektronen

Energie des Photons

Austrittsarbeit (materialspezifisch)

Da die kinetische Energie gleich eU_{max} ist folgt:

$$eU_{max} = h\nu - eU_A$$

$$U_{max} = \frac{h\nu}{e} - U_A$$

Steigung durch Wirkungsquantum bestimmt!

Proportionalität zu ν !

Beispiel für Austrittsarbeiten:

Metall	U_A [eV]	λ_{GR} [nm]
Li	2,46	504
Na	2,28	543
K	2,25	551
Rb	2,13	582
Cs	1,94	639
Cu	4,48	277
Pt	5,36	231

Beispiel für klassische Zeitverzögerung beim Photoeffekt:

Bei einer Bestrahlungsintensität von 1 mW/cm^2 , 2 eV Austrittsarbeit und einer Elektronendichte von $10^{15}/\text{cm}^2$ müsste man etwa 100 msec warten bis der erste Strom fließt!
Dies wird nicht beobachtet!

1.1.3. Der Comptoneffekt

Laut Einstein/Planck existieren Lichtquanten mit einer charakteristischen Energie.

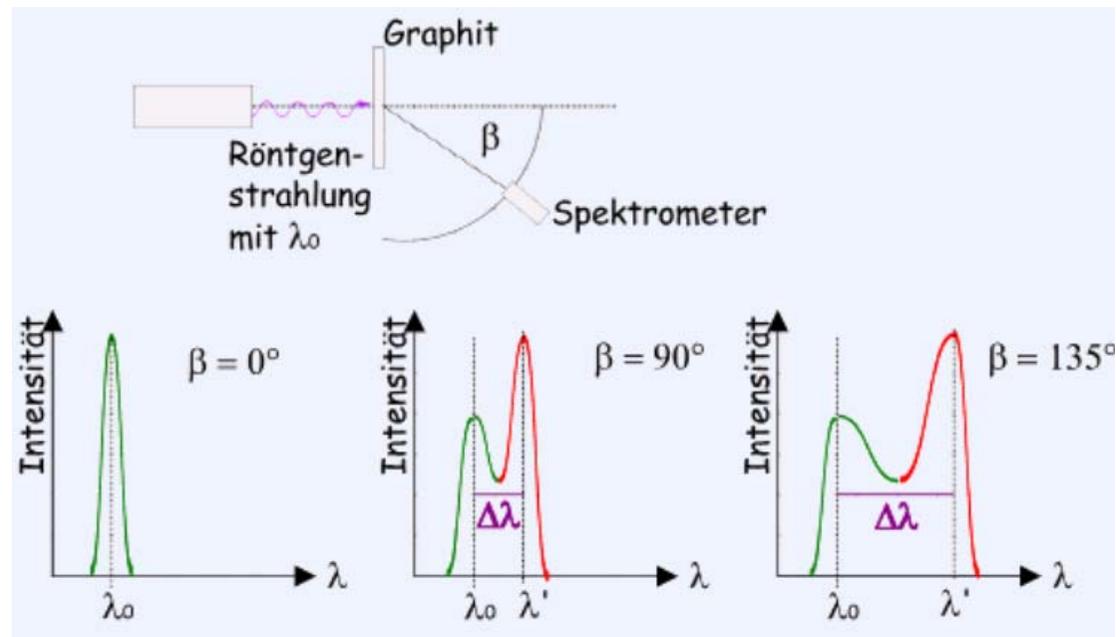
Kann man den Licht-„Teilchen“ auch einen Impuls zuordnen? Ja!

$$p = \frac{h\nu}{c} = \hbar k$$

Photonenimpuls

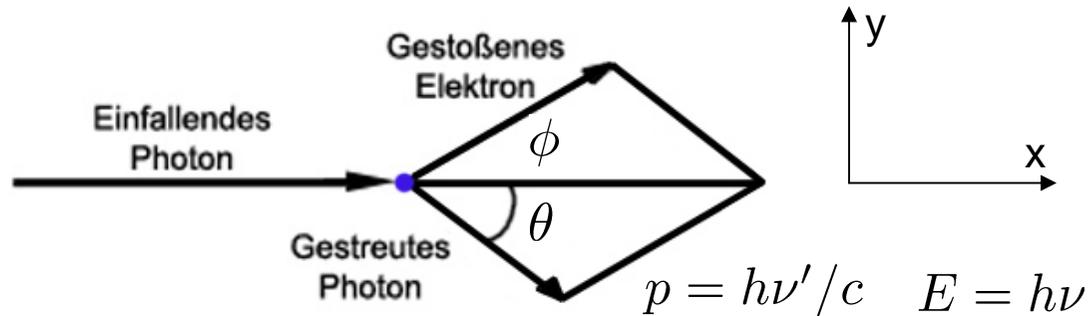
Beobachtung des Photonenimpulses bei der Comptonstreuung (Compton 1921) als Energieverschiebung des gestreuten Lichtes bei der Streuung an freien (schwach gebundenen) Elektronen.

Beobachtung von zwei Maxima bei der Streuung: resonanter Rayleigh-„peak“ und Compton-„peak“.



Herleitung der Comptonverschiebung

Streuung von Photonen als elastischer Zweikörper-Stoss:



Energieerhaltung:

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + mc^2$$

Impulserhaltung in y-Richtung:

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \cdot \sin \theta - mv \cdot \sin \phi$$

Impulserhaltung in x-Richtung:

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cdot \cos \theta - mv \cdot \cos \phi$$

mit $\Delta\nu = \nu - \nu'$ und $m = m_0 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$

folgt $h^2(\Delta\nu)^2 + 2m_0c^2h\Delta\nu = m_0^2c^4 \frac{v^2}{c^2 - v^2}$

Aus der Impulserhaltung folgt mit $1 = \cos^2 \phi + \sin^2 \phi$:

$$h^2 [(\Delta\nu)^2 + 2\nu(\nu - \Delta\nu)(1 - \cos \theta)] = m_0^2 c^4 \frac{v^2}{c^2 - v^2}$$

somit: $m_0 c^2 h \Delta\nu = h^2 \nu(\nu - \Delta\nu)(1 - \cos \theta)$

Nach Umrechnung in Wellenlängen: $|\Delta\lambda| = \left| \frac{c}{\nu} - \frac{c}{\nu - \Delta\nu} \right| = \frac{c\Delta\nu}{\nu(\nu - \Delta\nu)}$

folgt: $|\Delta\lambda| = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) = \lambda_c (1 - \cos \theta)$

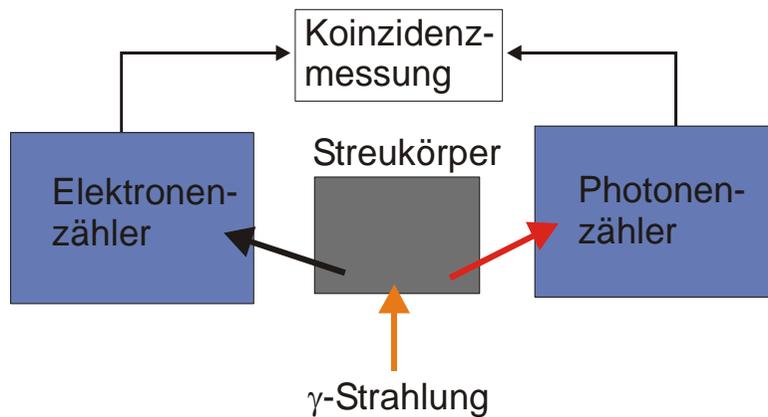
Comptonwellenlänge $\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$

Und für die Comptonenergie: $E_{Compton} = \frac{hc}{\lambda_c} = m_0 c^2 = 511 \text{ keV}$

↑
Ruheenergie des Elektrons

Einige Bemerkungen zur Comptonstreuung:

- 1) Es konnte gezeigt werden, dass bei der Comptonstreuung die freigeschlagenen Elektronen und die gestreuten Photonen in Koinzidenz auftreten (Experiment von Bothe und Geiger).



- 2) Die Comptonstreuung ist schwach bei stark gebundenen Elektronen (d.h. bei schweren Atomen).
- 3) Für mittelharte Röntgenstrahlen ist die Comptonstreuung der dominierende Effekt bei der Wechselwirkung mit Materie.
- 4) Einfallende und gestreute Strahlung bei der Comptonstreuung sind inkohärent (im Gegensatz zur kohärenten Rayleigh-Streuung).

1.1.4. Der Photonenrückstoss

Der Photonenrückstoss spielt beim Absorptions- und Emissionsvorgang eine entscheidende Rolle.

Atome haben charakteristische Emissions-, bzw. Absorptionsresonanzen, deren Breite Γ durch die Lebensdauer des angeregten Zustandes und andere Effekte (Stoss-, Dopplerverbreiterung) bestimmt ist.

Impulsübertrag durch Rückstoss:

$$v = \frac{\hbar\omega_0}{cm_a}$$

Somit Änderung der Resonanz um:

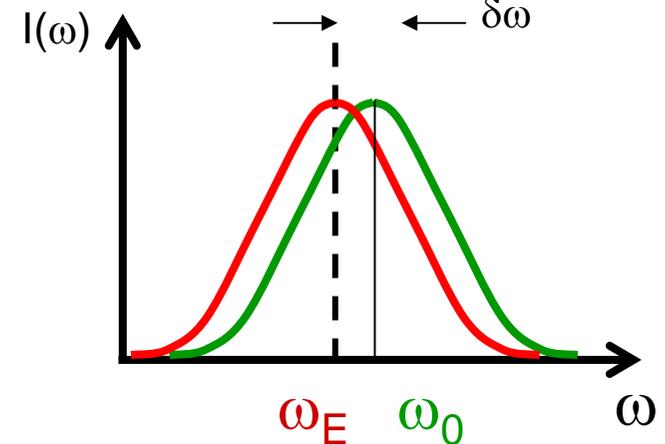
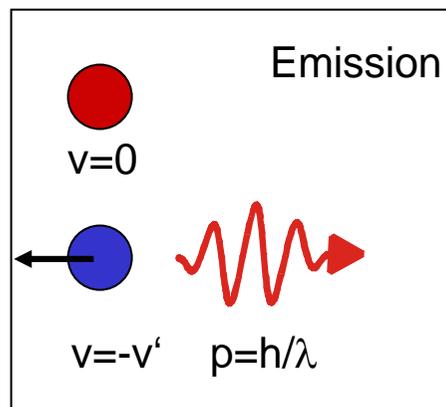
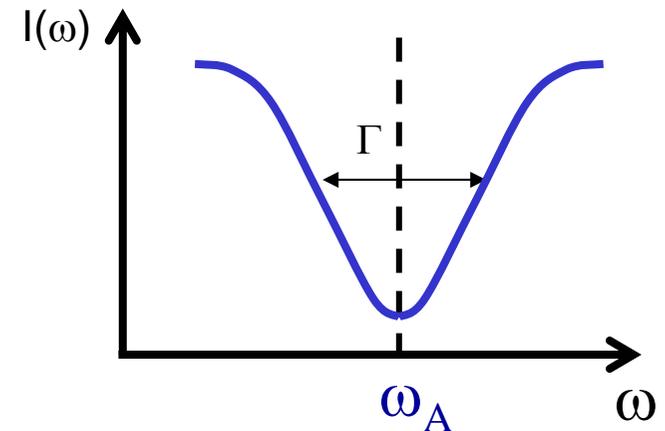
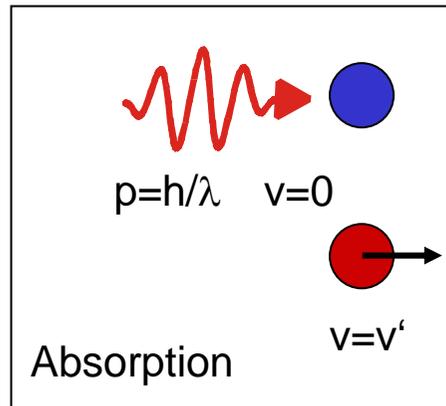
$$\delta\omega_A = E_a/\hbar = \frac{\hbar\omega_0^2}{2m_a c^2}$$

Ebenso bei der Emission:

$$\delta\omega_E = -E_a/\hbar$$

Also:

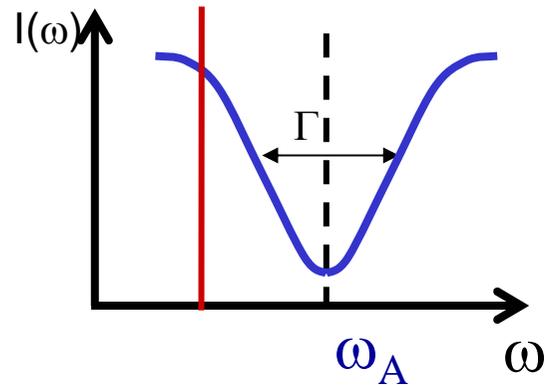
$$\delta\omega = 2 \frac{\hbar\omega^2}{2m_a c^2}$$



Der Photonenrückstoss wird beim **Laserkühlen** ausgenutzt.

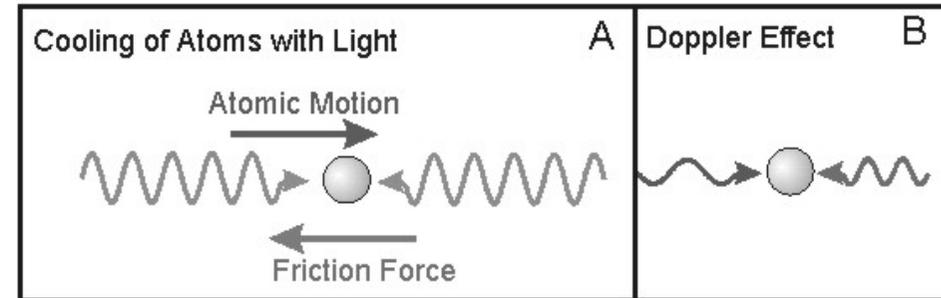
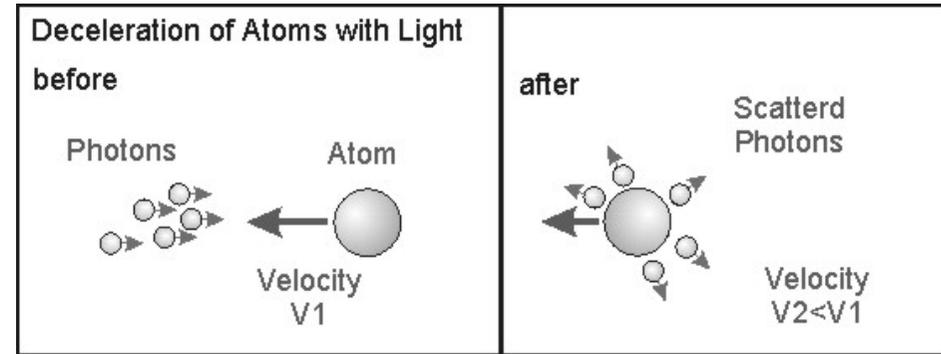
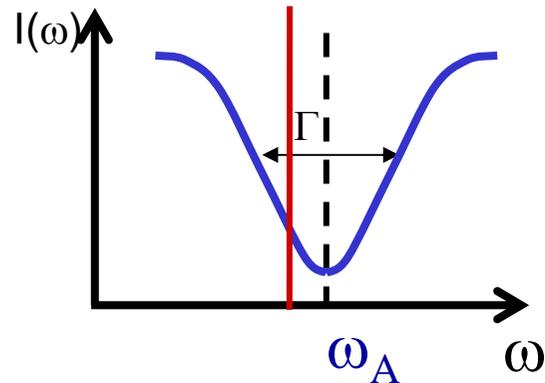
Anregung von Atomen mit rotverstimmt Licht (Anregungsfrequenz < Resonanzfrequenz)

Atom in Ruhe: keine Anregung



Atom mit Geschwindigkeitskomponente in Richtung des Anregungslichtes:

Anregung möglich wegen $\frac{\delta\nu_v}{\nu_0} = \frac{v}{c}$



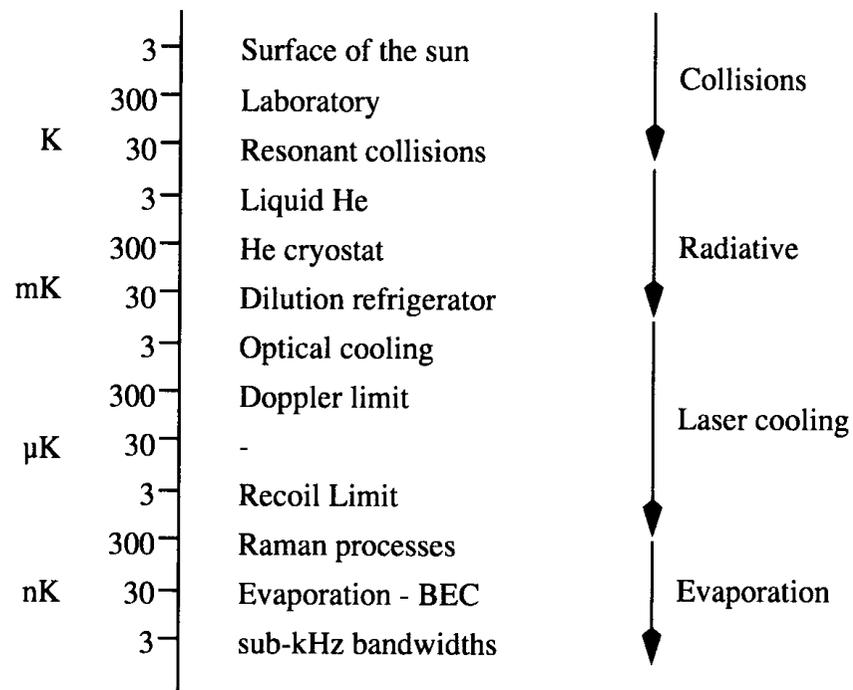
Grenze der Kühlung (Dopplerlimit):

$$k_B T_D = \frac{\hbar \Gamma}{2} \quad \leftarrow \text{nat. Linienbreite} \quad T_D \approx 300 \mu K$$

Beschleunigung: 1000 m/s in ms = $10^5 g$!

Mit Laserkühlmethoden lassen sich extrem niedrige Temperaturen erzeugen.

Grenzen des Laserkühlens:



Nobelpreis 1997 für laser cooling & trapping:



S. Chu, Stanford

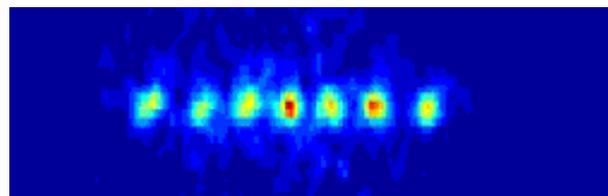


C. Cohen-Tannoudji,
Paris



W. D. Phillips,
Gaithersburg

Lasermanipulation von einzelnen Ionen
(R. Blatt, Uni. Innsbruck):



Zusammenfassung: Korpuskulare Eigenschaften des Photons

Beispiel für Natrium ($m=3,82 \times 10^{-23}$ g) und D-Line (589,3 nm)

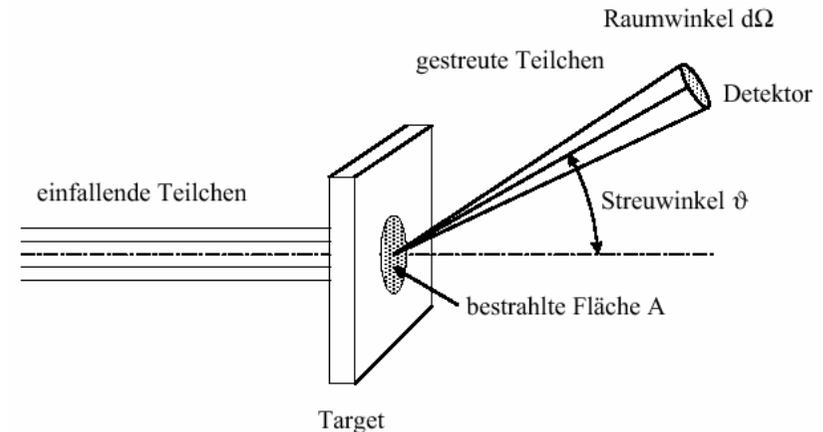
Energie	E	$h\nu$		$3,37 \times 10^{-19}$ Ws
Masse	M_{ph}	$h\nu/c^2$		$3,75 \times 10^{-33}$ g
Ruhemasse	$m_{\text{ph},0}$	0		
Impulsvektor	\mathbf{p}_{ph}	$\hbar \mathbf{k}$		
Impulsbetrag	$ \mathbf{p}_{\text{ph}} $	h/λ		$1,12 \times 10^{-22}$ g cm s ⁻¹
Eigendrehimpuls	$ \mathbf{s} $	$h/2\pi$		$1,05 \times 10^{-34}$ Js

1.2. Quanteneffekte von Materie

1.2.1. Das Bohr'sche Atommodell

Die Streuexperimente von E. Rutherford (1911) mit α -Teilchen an Au-Folie brachten das Thomsonsche Rosinenkuchenmodell zu Fall und sprachen für ein „Planetenmodell“ des Atoms. Rutherford konnte eine Streuformel für den Wirkungsquerschnitt σ in Abhängigkeit von dem Streuwinkel θ ableiten:

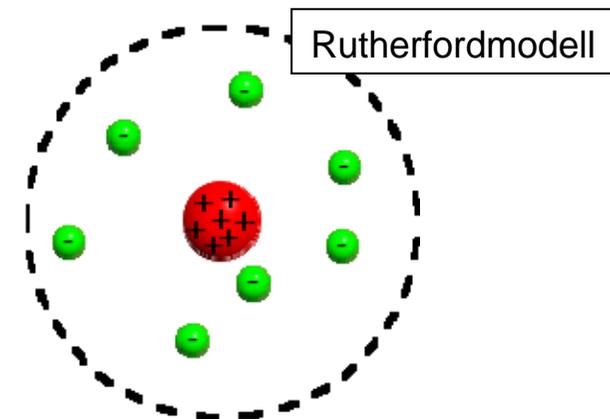
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$



➔ **Tafel**

Atome haben einen schweren positiv geladenen Kern mit einem Radius von etwa 10^{-15} m = 1 Femtometer [fm]. Negativ geladene Elektronen umkreisen diesen Kern.

	Elektron	Proton
Masse	$9,1 \times 10^{-31}$ kg	$1,67 \times 10^{-27}$ kg
Radius (klassischer)	3×10^{-15} m	$1,6 \times 10^{-18}$ m
Ladung	$-1,6 \times 10^{-19}$ C	$1,6 \times 10^{-19}$ C
Magn. Moment	$-9,3 \times 10^{-24}$ J/T	$1,4 \times 10^{-26}$ J/T



Rutherford über die experimentellen Ergebnisse der Weitwinkelstreuung:



"Es war bestimmt das unglaublichste Ergebnis, das mir je in meinem Leben widerfuhr. Es war fast so unglaublich, als wenn einer eine 15-Zoll-Granate auf ein Stück Seidenpapier abgefeuert hätte und diese zurückgekommen wäre und ihn getroffen hätte."

Für ein Klassisches Modell des Wasserstoffatoms erwartet man:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_0 r \omega^2$$

Coulombkraft \nearrow \nwarrow Zentripetalkraft

Gesamtenergie: $E_{ges} = \frac{1}{2} m_0 r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

$$= -\frac{1}{2(4\pi\epsilon_0)^{2/3}} (e^4 m_0 \omega^2)^{1/3}$$

Probleme:

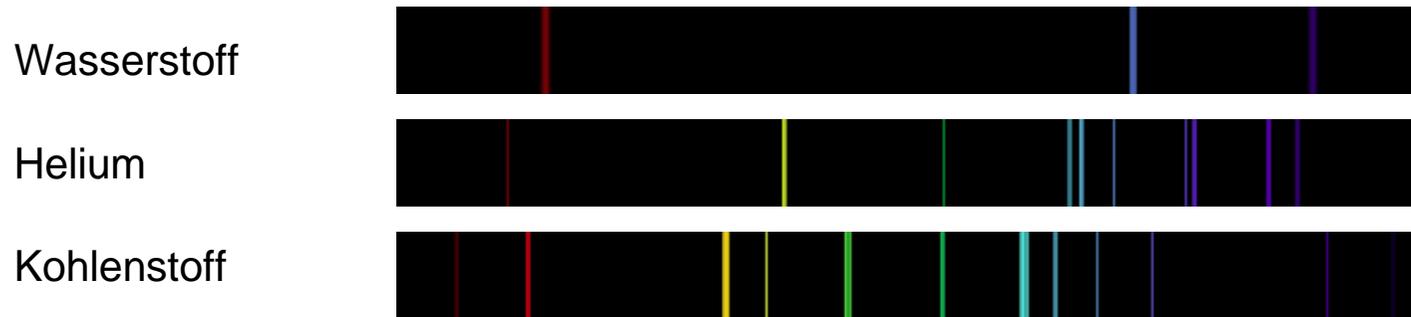
Es gibt keine bevorzugte minimale Energie, d.h. stabile Konfiguration.

Die Elektronen sind beschleunigte Ladungen \Rightarrow Abstrahlung von Energie \Rightarrow Instabilität

Das Spektrum sollte kontinuierlich sein mit $\omega/2\pi = \nu$ \nwarrow Umlauffrequenz

Dies trifft jedoch nicht zu!

Bekannter experimenteller Befund: Atomspektren bestehen aus charakteristischen diskreten Linien.



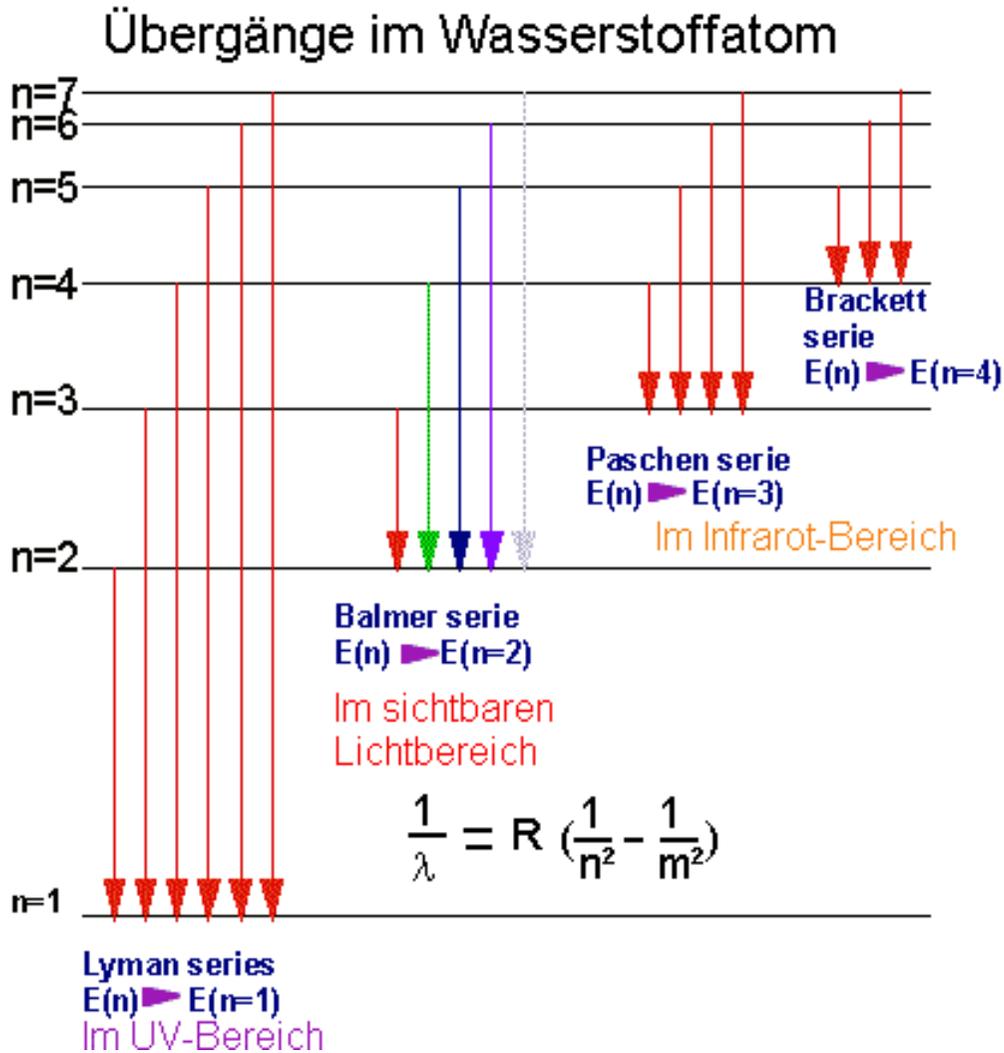
Für Wasserstoff gilt im Sichtbaren für die Position der Linien die empirische Balmer-Formel

$$\bar{\nu} = 1/\lambda = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n > 2$$

Definition: $\bar{\nu} = 1/\lambda$ ist die Wellenzahl $[\bar{\nu}] = \text{cm}^{-1}$

$$R_H = 109677,5810 \text{ cm}^{-1} \quad \text{Rydbergkonstante}$$

Andere Zusammenhänge wurden empirisch im Infraroten (Paschen, Brackett-Serie) und im Ultravioletten (Lyman-Serie) gefunden.



Die Serien folgen den Formeln:

$$\bar{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$n_1 = 1, 2, \dots$$

$$n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$$

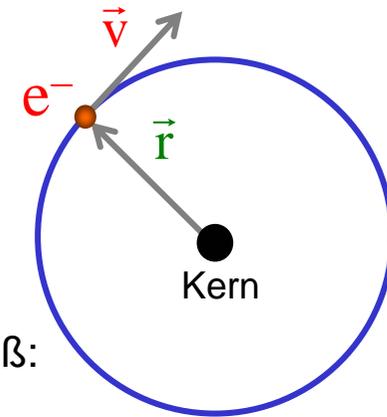
Bohrsche Postulate (1913)

1. Elektronen bewegen sich klassisch auf Kreisbahnen, aber nur bestimmte Bahnen mit Energien E_n sind erlaubt.
2. Die Bewegung erfolgt strahlungslos.
3. Energieabstrahlung erfolgt durch Sprünge zwischen Bahnen gemäß:

$$E_n - E_{n'} = h\nu$$

$$E_n = -R \frac{hc}{n^2}$$

n = Hauptquantenzahl



Bohrsches Korrespondenzprinzip: Die Gesetze der „quantisierten Atomphysik“ müssen für große Bahnen in die Gesetze der klassischen Physik übergehen.

Das Bohrsche Atommodell macht Aussagen über Zustände und nicht über Vorgänge!

Frequenz des emittierten Lichtes bei einem Sprung zwischen benachbarten Bahnen:

$$\nu = Rc \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx Rc \frac{2}{n^3}$$

Vergleich mit klassischer Gesamtenergie und Umlauffrequenz ω :

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^{2/3}} (e^4 m_0 \omega^2)^{1/3}$$

Es folgt:

$$R_\infty = \frac{m_0 e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

Rydbergkonstante

$$R_\infty = 109737,31568525(84) \text{ cm}^{-1}$$

Die Rydbergkonstante ist eine der am genauesten gemessenen Naturkonstanten!

Für den Radius der n-ten Bohrschen Bahn folgt:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{e^2 m_0}$$

Und für den Bahndrehimpuls:

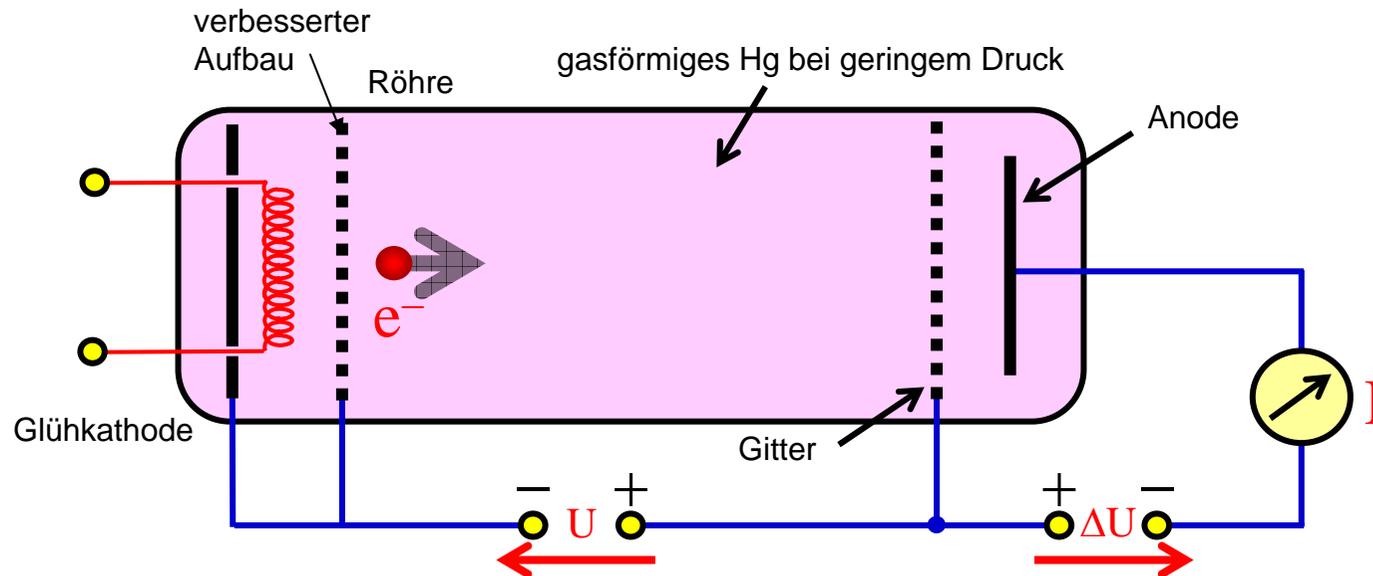
$$|\vec{l}|_n = m_0 r_n^2 \omega_n = n\hbar$$

Der Bahndrehimpuls ist ein Vielfaches von \hbar

Der Franck-Hertz Versuch

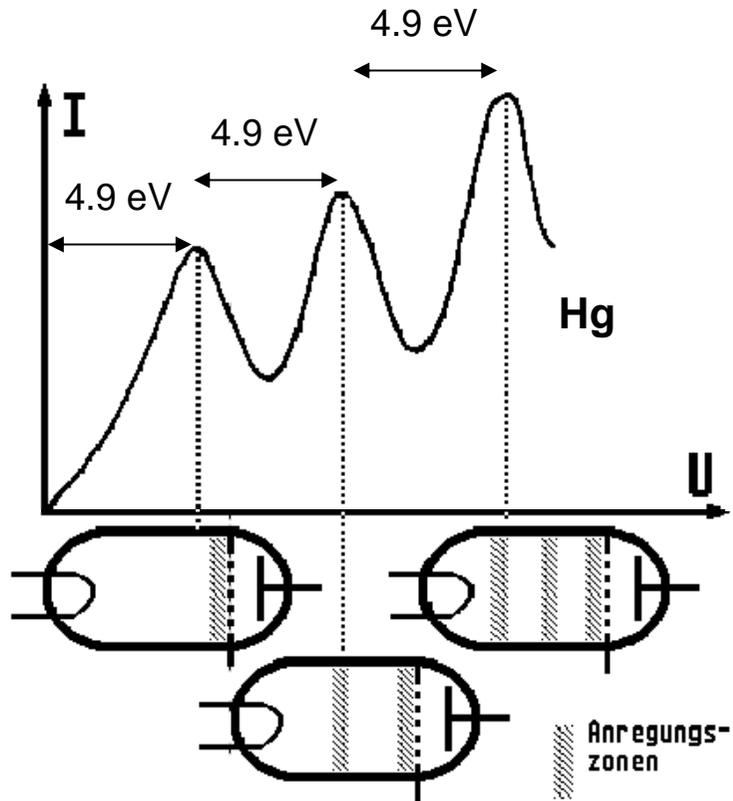
Der Franck-Hertz-Versuch (1914) ist ein grundlegender Versuch zum Nachweis der quantisierten Energieniveaus (Nobelpreis 1925). Er misst die Ionisation durch Elektronenstoß.

Versuchsaufbau:



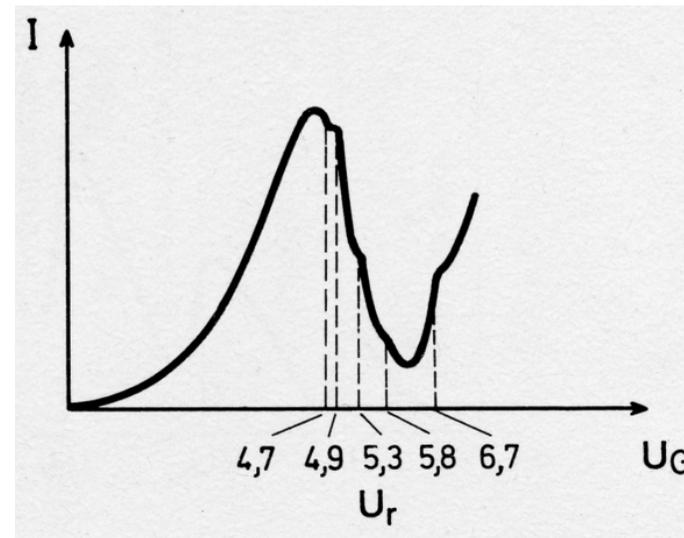
Versuchsablauf: Ab einer gewissen Spannung ($U > \Delta U$) treten Elektronen aus der Kathode und können die Anode erreichen. Ist die Beschleunigungsspannung U jedoch gross genug, so ionisieren die Elektronen die Atome. Die Elektronen verlieren Energie ($U - \delta E/e$) und können nicht mehr zur Anode gelangen. Der Anodenstrom nimmt dann sprunghaft ab.

Experimentelles Resultat des Franck-Hertz-Versuchs mit Raumladungszonen der positiven Ladung (Atomrumpfe):



Bei den charakteristischen Ionisationsspannungen von Vielfachen von 4.9 eV (bei Hg) kann gleichzeitig eine Emissionslinie im UV bei $4.9 \text{ eV} = 253,7 \text{ nm}$ beobachtet werden.

Verbesserte Versionen des Franck-Hertz-Versuchs können weitere Details der Energiestruktur auflösen.



1.2.3. Welleneigenschaften von Materie (a)

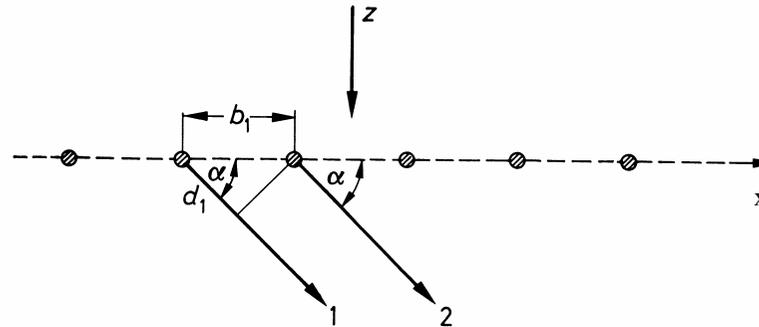
Röntgenbeugung: Laue- und Bragg-Beugung

Bergmann/Schaefer, „Optik“

Beugung ist als Effekt der Vielstrahlinterferenz in der Optik untersucht worden. Bei Röntgenstrahlen war man zunächst der Meinung, einen Teilchenstrom vor sich zu haben.

Laue untersuchte 1912 die Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen (Nobelpreis 1914):

1) Beugung an einem Strichgitter:



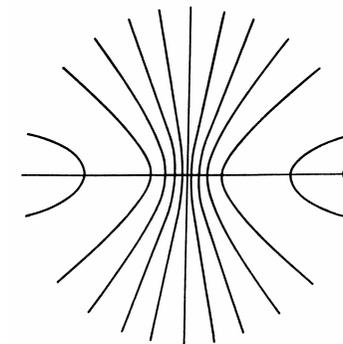
Bedingung für konstruktive Interferenz:

$$\cos \alpha = \frac{n_1 \lambda}{b_1}$$

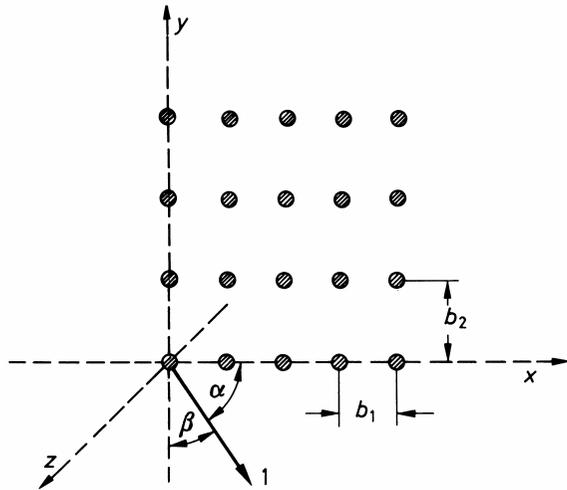
$$n_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

1. Laue-Bedingung

Diese Gleichung definiert geometrisch eine Schar von Kreis kegeln mit halbem Öffnungswinkel α um die x-Achse. Helle Punkte auf einer Photoplatte senkrecht zur z-Achse liegen dann auf Hyperbeln (Kegelschnitten).



2) Übergang zu zwei Dimensionen (Flächengitter) :



Bedingung für konstruktive Interferenz ist nun zusätzlich:

$$\cos \alpha = \frac{n_1 \lambda}{b_1}$$

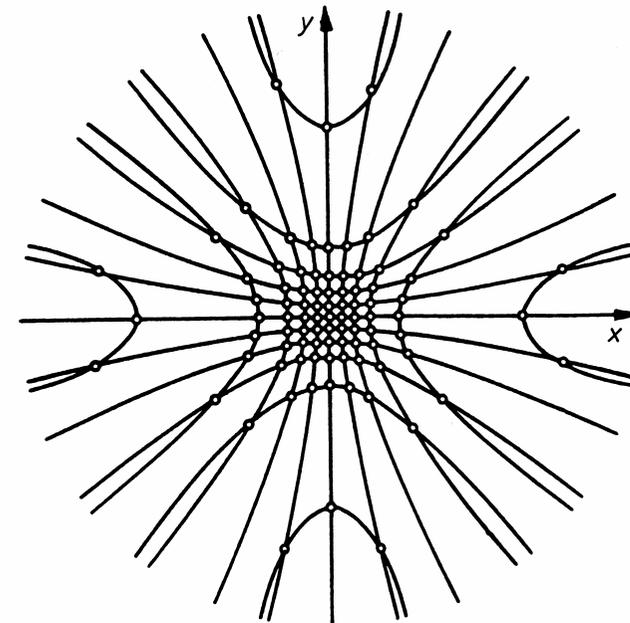
1. Laue-Bedingung

$$\cos \beta = \frac{n_2 \lambda}{b_2}$$

2. Laue-Bedingung

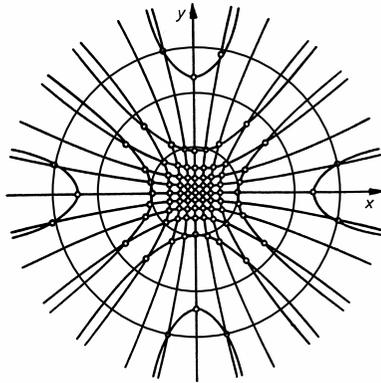
$$n_{1,2} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Helle Punkte auf einer Photoplatte senkrecht zur z-Achse sind nun durch Schnittpunkte der Hyperbeln bestimmt.



3) Übergang zu drei Dimensionen (Raumgitter):

Als eine Bedingung für konstruktive Interferenz tritt nun die dritte Laue-Bedingung hinzu:



$$\cos \gamma - 1 = \frac{n_3 \lambda}{b_3} \quad n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

3. Laue-Bedingung

Die 3. Laue-Bedingung definiert Kegel um die z-Achse, deren Schnitte mit der Detektorebene (Photoplatte) Kreise sind. Die Schnittpunkte der beiden Hyperbeln (1. und 2. Laue-Bedingung) liegen nicht mehr notwendig auf diesen Kreisen!

Mit: $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$ folgt:

$$\lambda = \frac{2n_3/b_3}{\frac{n_1^2}{b_1^2} + \frac{n_2^2}{b_2^2} + \frac{n_3^2}{b_3^2}}$$

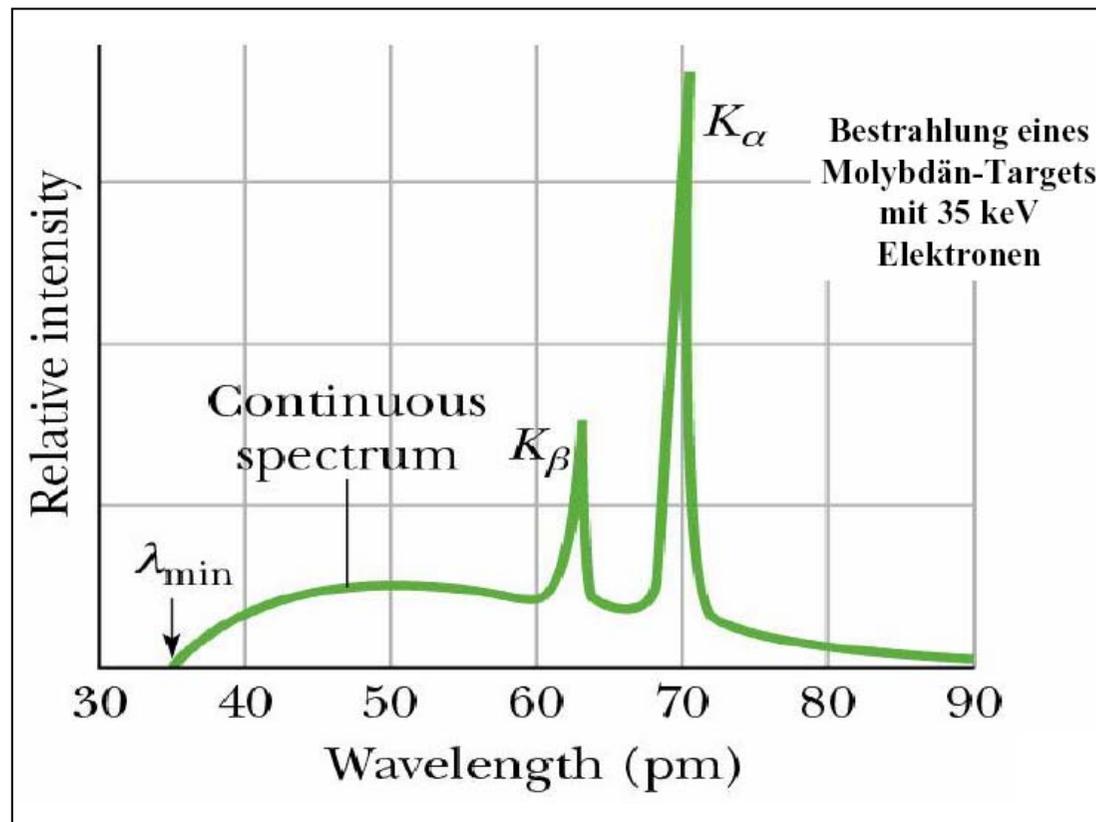
Bei einfallendem monochromatischem Licht ist diese Bedingung i.A. nicht erfüllt.
Bei einfallendem weißen Licht werden Punkte mit entsprechendem λ ausgewählt.

Die Bedingung für konstruktive Interferenz hängt von dem jeweiligen Raumgitter des spezifischen Kristalls ab.

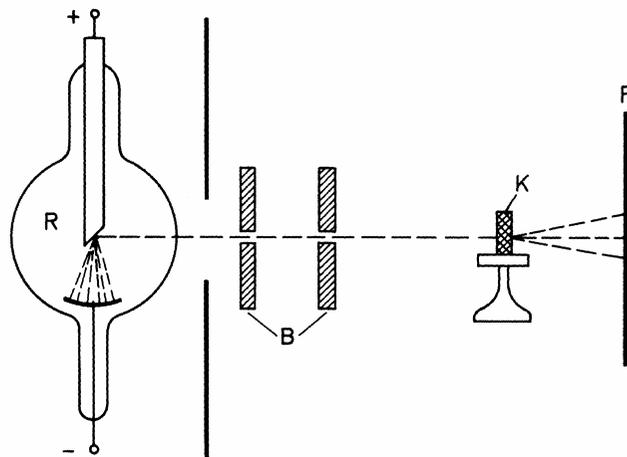
Zum Beispiel ist bei einem kubischen Gitter:

$$b_1 = b_2 = b_3 = b \rightarrow \lambda = \frac{2n_3 b}{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

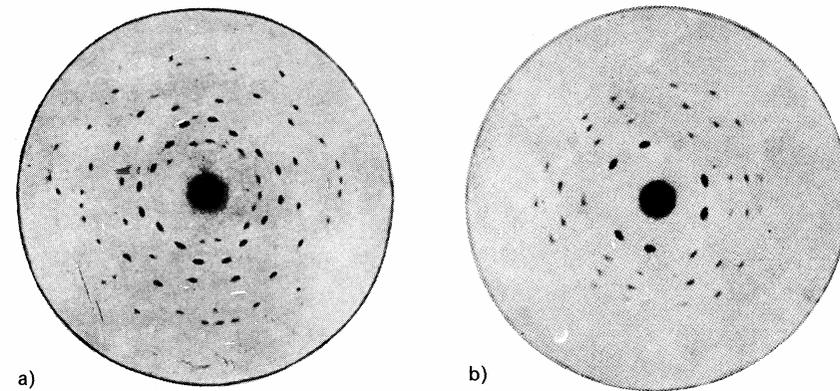
Laue führte Versuche mit einem kontinuierlichen Röntgenspektrum durch.



Typische Form eines Röntgenspektrums mit Kontinuum und charakteristischen Linien



Versuchsanordnung von Laue 1912
(Nobelpreis 1914)



Beugungsbilder von Zinkblende (ZnS) für
Zwei verschiedene Orientierungen.

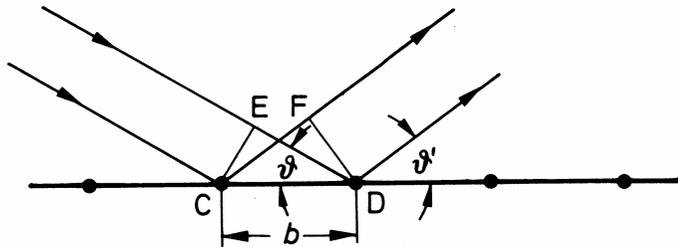


Max von Laue

- ➔ Nachweis der Wellennatur von Röntgenstrahlen
- ➔ Nachweis der Raumgitterstruktur von Kristallen
- ➔ Nachweis der Wärme als Gitterschwingung der Atome
(Unschärfe des Beugungsbildes bei Erwärmung)

Eine andere (äquivalente) Interpretation der Beugung von Röntgenstrahlen wurde von W. H. Bragg und W. L. Bragg (1913) gegeben:

Interpretation der Beugung als Reflexion an Netzebenen.

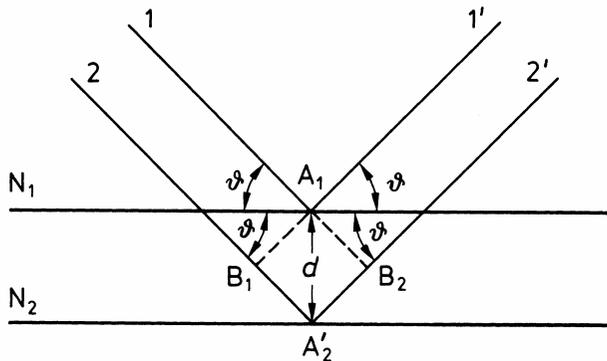


Beugung an einer Netzebene

Für konstruktive Interferenz muss gelten:

$$\Delta s = b \cos \theta - b \cos \theta'$$

Gangunterschied



Beugung an zwei Netzebenen

Bedingung für konstruktive Interferenz aller Netzebenen:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3...$$

Bragg-Bedingung

In der folgenden Abbildung sind Netzebenen in die Kristallstruktur (hier kubisches Gitter) eingezeichnet:

Offensichtlich ist der Netzebenenabstand:

$$d = b \cos \theta$$

Damit folgt mit der Bragg-Bedingung:

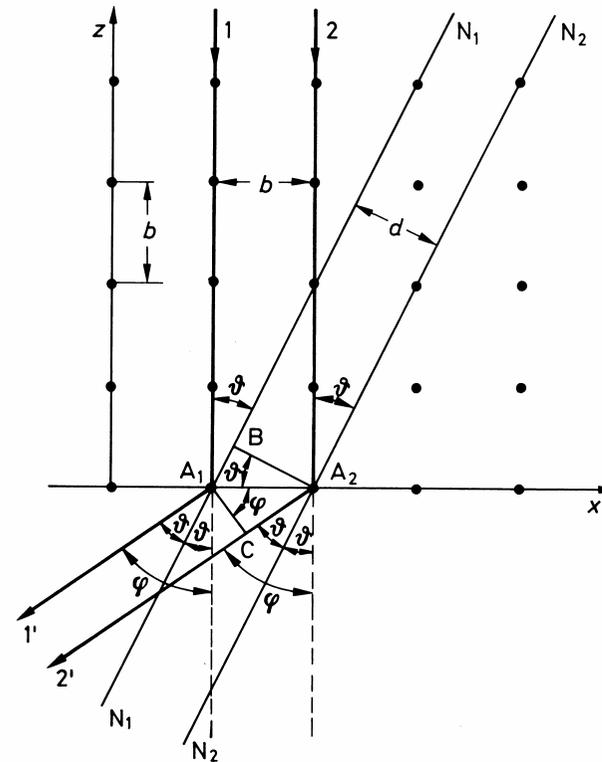
$$(2b \cos \theta) \sin \theta = n\lambda$$

und mit $\theta = \phi/2$

$$\begin{aligned} 2b \cos(\phi/2) \sin(\phi/2) &= n\lambda \\ &= b \sin \phi \end{aligned}$$

Dies ist äquivalent mit der 1. Laue-Bedingung.

Analog kann man die Äquivalenz mit den anderen Laue-Bedingungen zeigen und damit die Äquivalenz der Beschreibungen von Laue und Bragg.

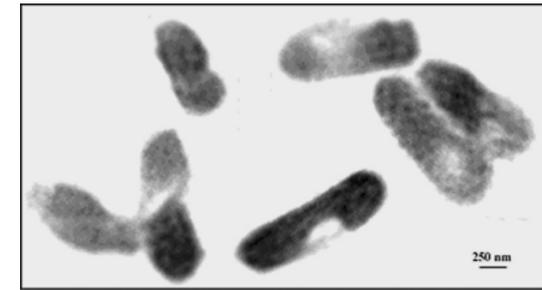
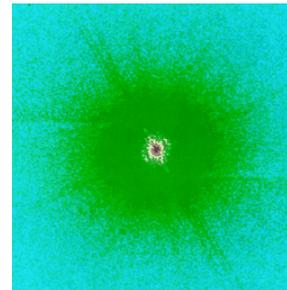


Zwei Anwendungsmöglichkeiten:

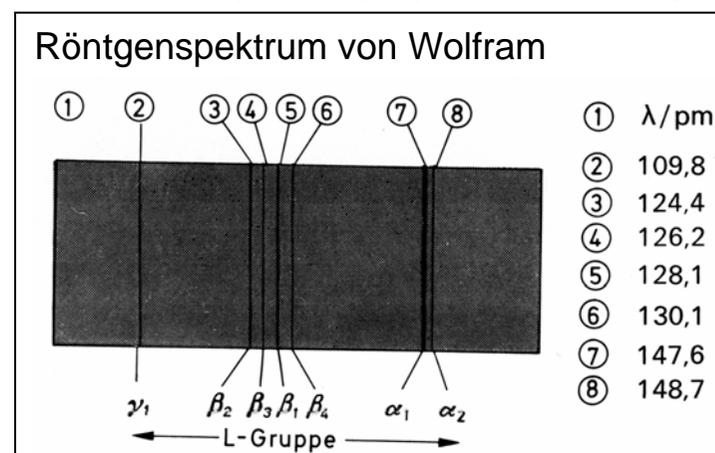
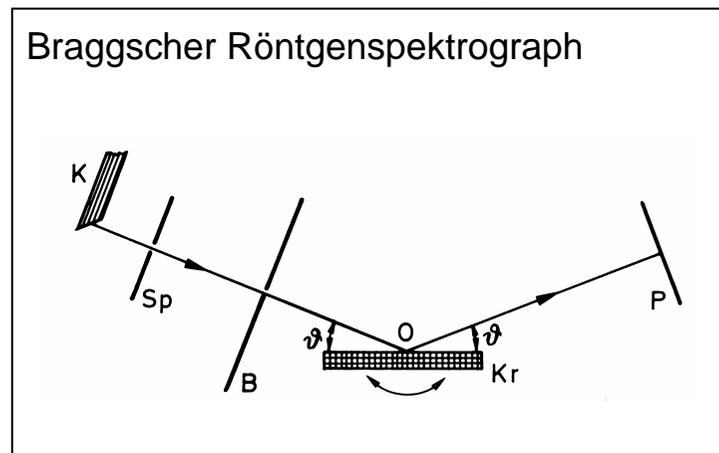
1) Untersuchung der Kristallstruktur mit monochromatischer Röntgenstrahlung und Analyse der Winkelabhängigkeit (Röntgenstrukturanalyse)
Nobelpreis 1988 für J. Deisenhofer, R. Huber, H. Michel „for the determination of the three-dimensional structure of a photosynthetic reaction center“



Bsp.: Beugungsbild und rekonstruiertes Bild von ecoli [Miao et al, PNAS 700, 110 (2002)]

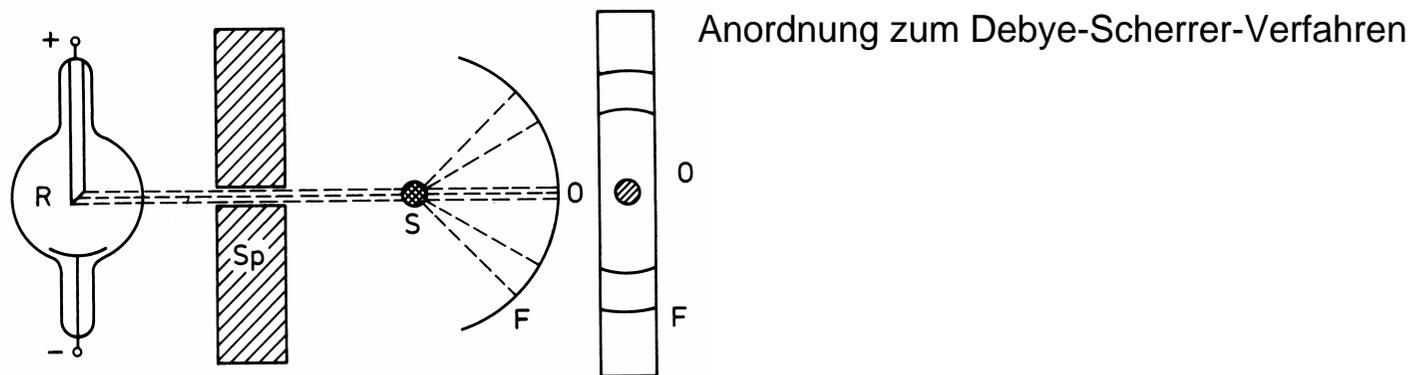


2) Mit bestimmtem Netzebenenabstand (bestimmter Kristall) und Winkel Anwendung als Monochromator in Analogie zum Prismen- oder Gitterspektrographen in der Optik.



Eine andere Methode ist das Kristallpulververfahren von Debye-Scherrer, bei dem ein Pulver des Kristalls (und damit alle möglichen Orientierungen vom Kristall auf einmal) mit monochromatischer Röntgenstrahlung bestrahlt wird.

Dabei wird das Pulver zu einem Zylinderstäbchen gepresst und konzentrisch von einem Schirm umgeben. Man erkennt dann konzentrische Kreissegmente.



Beugungsbild von Ni-Pulver

1.2.3. Welleneigenschaften von Materie (b) Elektronenbeugung

Licht zeigt korpuskulare Eigenschaften.

Zeigt Materie Welleneigenschaften? Antwort von de Broglie: Ja!



Postulat von de Broglie (1924): „Materiewellen“

Licht → $p = h/\lambda$

Materie → $\lambda = h/p$

$$\lambda = h / \sqrt{2mE_{kin}}$$

De Broglie-Wellenlänge

Zum Beispiel für die Beschleunigung von elektrischen geladenen Teilchen in Spannung U :

$$\lambda = h / \sqrt{2meU}$$

De-Broglie-Wellenlängen.

U in V	Elektronen		Protonen	
	v/c	λ in nm	v/c	λ in nm**
0,01	$2,0 \cdot 10^{-4}$	$1,2 \cdot 10^1$	$4,6 \cdot 10^{-6}$	$2,9 \cdot 10^{-1}$
0,1	$6,3 \cdot 10^{-4}$	3,9	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$9,1 \cdot 10^{-2}$
1	$2,0 \cdot 10^{-3}$	1,2	$4,6 \cdot 10^{-5}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$
10	$6,3 \cdot 10^{-3}$	$3,9 \cdot 10^{-1}$	$1,4 \cdot 10^{-4}$	$9,1 \cdot 10^{-3}$
100	$2,0 \cdot 10^{-2}$	$1,2 \cdot 10^{-1}$	$4,6 \cdot 10^{-4}$	$2,9 \cdot 10^{-3}$
1000	$6,3 \cdot 10^{-2}$	$3,9 \cdot 10^{-2}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$
10000	0,19*	$1,2 \cdot 10^{-2}$	$4,6 \cdot 10^{-3}$	$2,9 \cdot 10^{-4}$
100000	0,55*	$3,7 \cdot 10^{-3}$ *	$1,4 \cdot 10^{-2}$	$9,1 \cdot 10^{-5}$
1000000	0,94*	$8,7 \cdot 10^{-4}$ *	$4,6 \cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-5}$
10000000	0,999*	$1,2 \cdot 10^{-4}$ *	$1,4 \cdot 10^{-1}$	$9,0 \cdot 10^{-6}$ *

* relativistisch korrigiert

Folgerung für das Bohrsche Atommodell:

Das Elektron ist eine stationäre Elektronenwelle (nichts bewegt sich, daher keine Energieabstrahlung!).

Damit sich die umlaufende Welle nicht selbst auslöscht, muss konstruktive Interferenz nach einem Umlauf vorherrschen, d.h.:

$$2\pi r_B = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

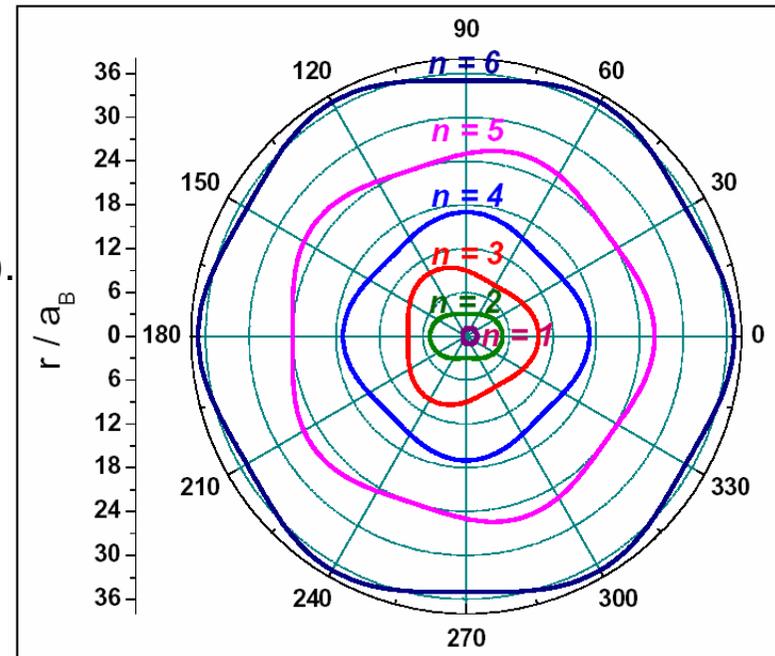
↑
Bohrradius

$$pr_B = l = n\hbar$$

↑
Drehimpuls

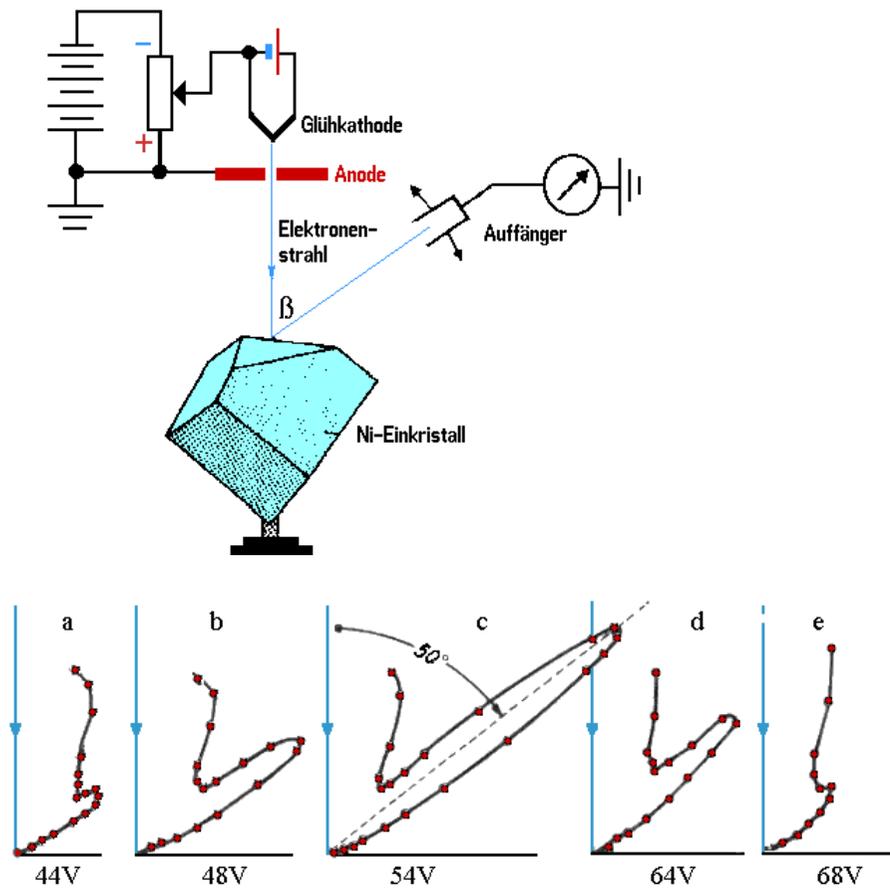
Quantisierung des Drehimpuls

➡ Motivation für eine Wellentheorie der Quantenmechanik ➡ Schrödingergleichung



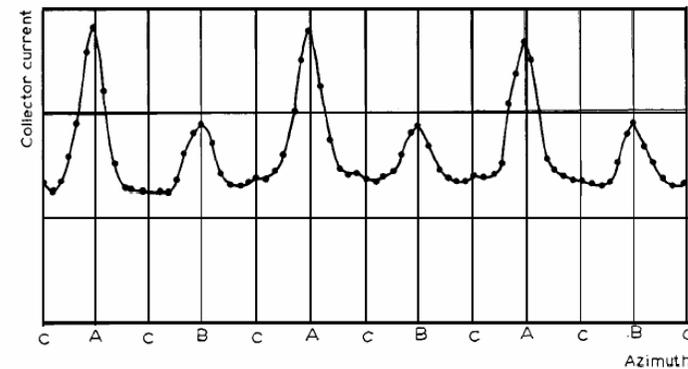
Die Welleneigenschaften der Materie können ebenso wie die der Röntgenstrahlung durch Beugung an Kristallen nachgewiesen werden (Da die Wellenlänge der de Broglie-Wellenlänge sehr klein ist, muss man kleine „Beugungsspalte“ benutzen!)

Ein sehr wichtiger Versuch ist der Versuch von Davisson und Germer (1926) zum Nachweis der Elektronenbeugung.



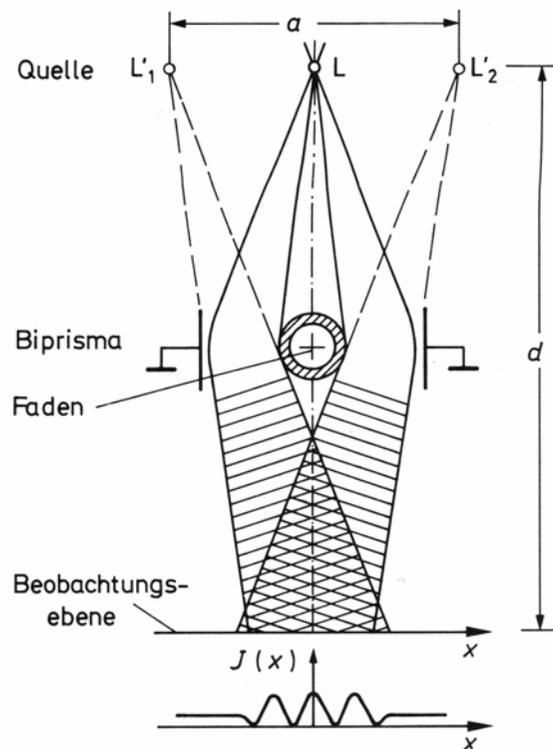
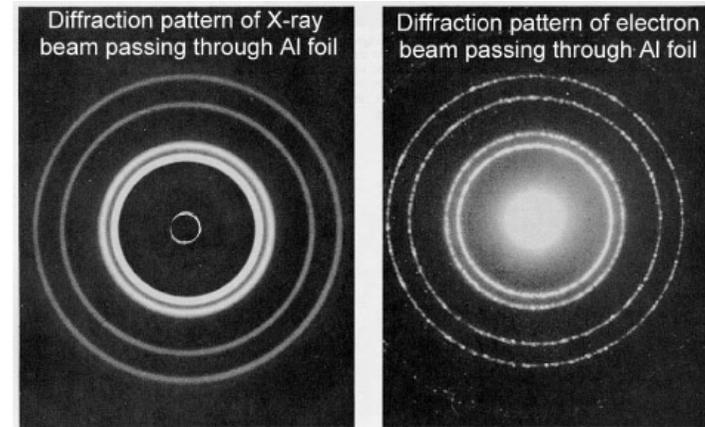
Wellenlängenabhängigkeit der Beugung

- „Einstellung“ der de Broglie-Wellenlänge durch die Beschleunigungsspannung
- Nachweis der dreizähligen Symmetrie

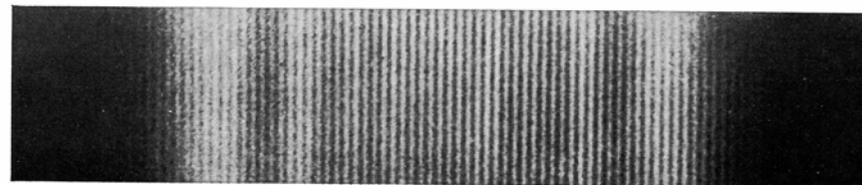


Abhängigkeit vom Beugungswinkel

Es besteht eine vollständige Analogie der Beugung von Licht und der Materiewellenbeugung, siehe zum Beispiel das Beugungsbild von Röntgenstrahlen (links) oder von Elektronenstrahlen (rechts) durch Aluminium-Folie.



Somit können optische Experimente mit Materiewellen durchgeführt werden. Das Experiment von Möllenstedt (links) realisiert z.B. ein Biprisma.



Beugungsbild hinter dem Möllenstedtschen Biprisma

Kleine Historie der Materiewellenoptik:

- 1921-1926 experimenteller Nachweis der Elektronenbeugung (Davisson & Germer)
- 1953 erstes Elektronenstrahlinterferometer mit analogem Aufbau zum Mach-Zehnder-Interferometer
- 1960 Elektronenstrahlinterferometer an künstlich erzeugten Spalten (Jönsson)
- 1974 Interferenz von Neutronen an einem Silizium-Einkristall (Rauch, Treimer, Bonse)
- 1991 Interferenz von ganzen Helium- und Natrium-Atomen (Carnal & Mlynek, Keith et al.)
- ab 1999 Molekülinterferometer mit C60- und C70-Atomen (Arndt & Zeilinger)

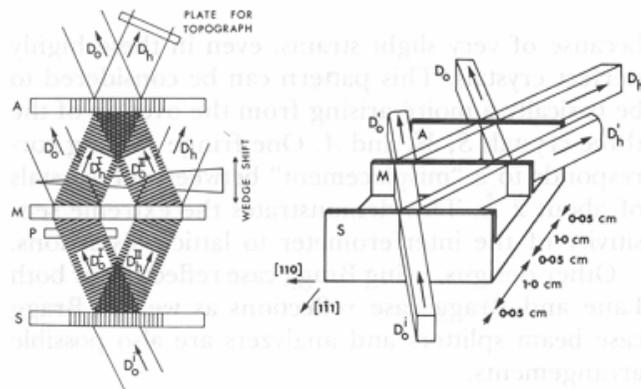


Fig. 1. Right: shape and dimensions of the single-crystal block cut as an interferometer for copper $K\alpha$ radiation and the silicon 220 reflection. S beam splitter crystal, M transmission mirrors, A analyzer crystal. Left: schematic diagram showing beam paths. D_0^i incident beam.

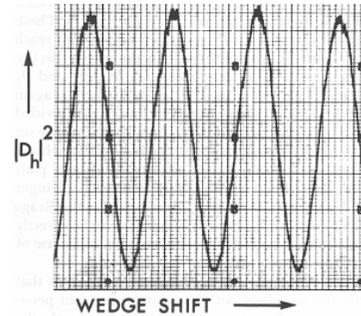
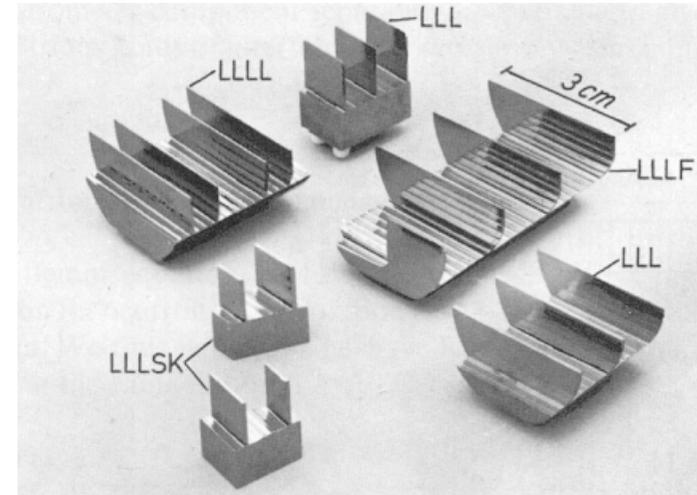
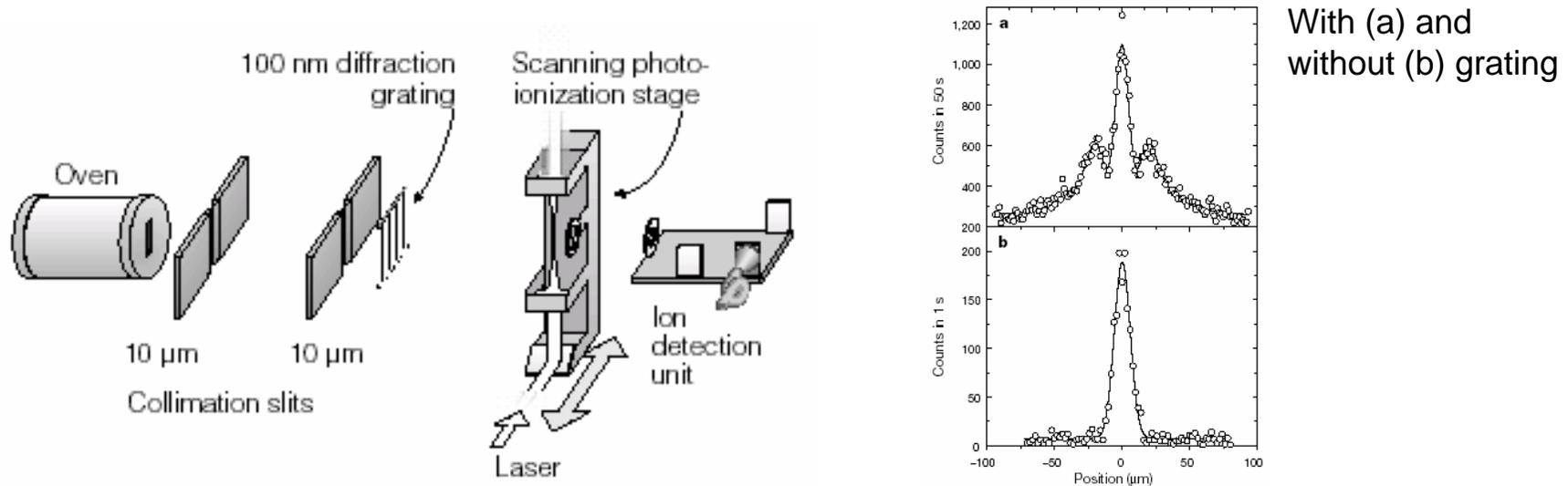


Fig. 2. Intensity variation $|D_h|^2$ when the wedge is shifted as shown in Fig. 1.

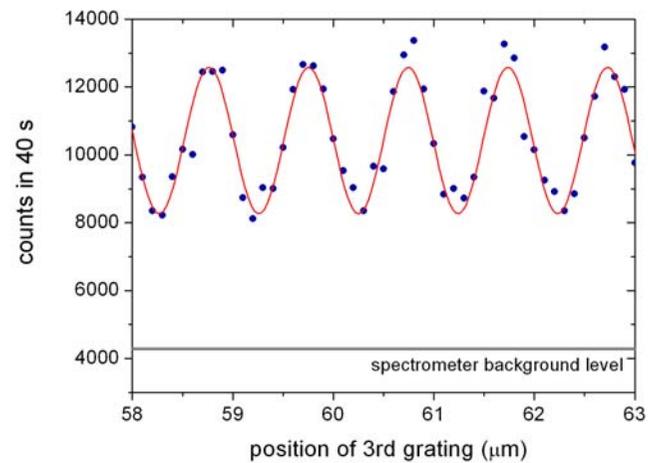
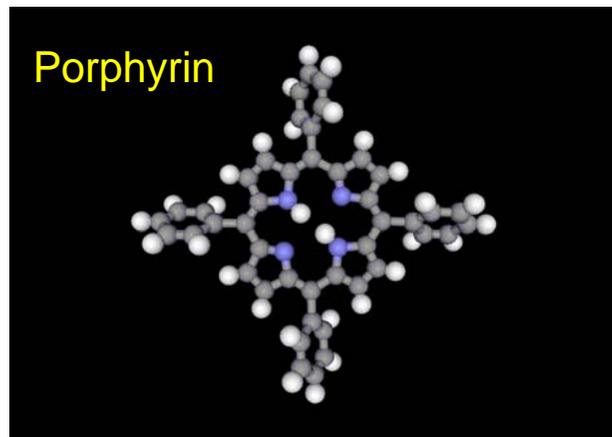


Verschiedene Neutroneninterferometer

Es besteht keine prinzipielle Grenze der Beobachtung von Materiewelleninterferenz



Interferenz von C₆₀ Molekülen, M. Arndt et al., NATURE 401, 680 (1999)



Interferenz von Biomolekülen, M. Arndt et al.

1.2.3. Welleneigenschaften von Materie (c)

Elektronenoptik

Bei den Experimenten von Davisson und Germer gab es eine systematische Abweichung von den theoretischen Werten. Diese kann auf die zusätzlichen elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Kernen zurückgeführt werden.

Man führt eine zusätzliche potentielle Energie ein: $eU = \frac{1}{2}m_e v^2 + E_{pot}$
↑
Beschleunigungs-
spannung

somit:

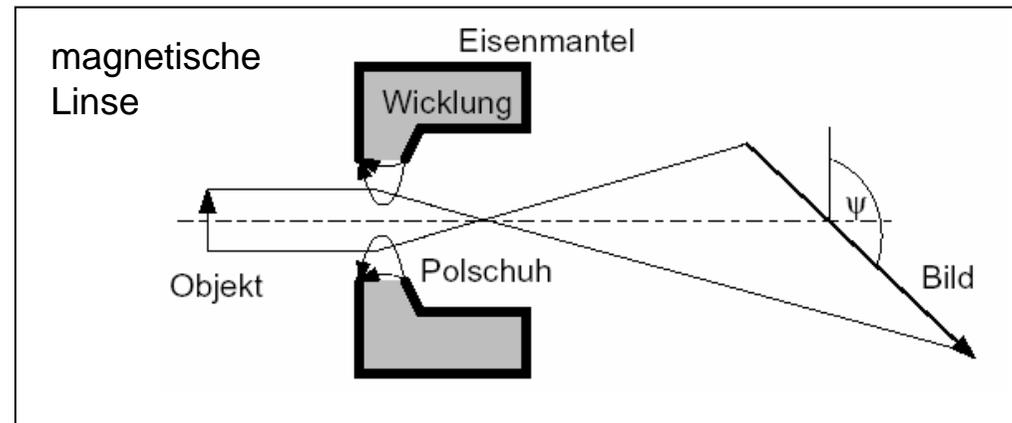
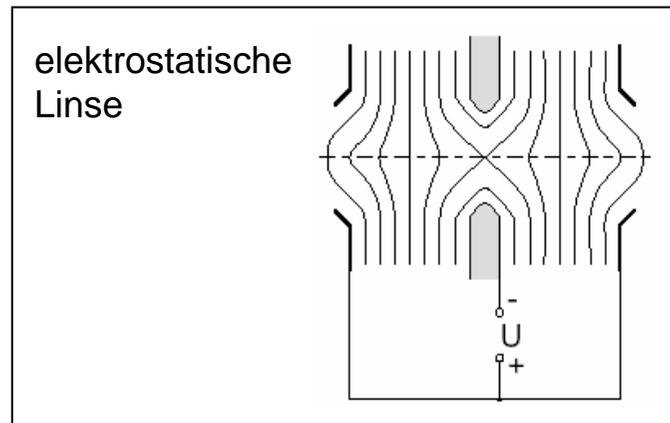
$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2m_e(eU - E_{pot})}}$$

In Analogie zur Optik kann man eine elektronenoptische Brechzahl n_{ne} einführen

$$n_{ne} = \frac{\lambda_{dB,vac}}{\lambda_{dB,mat}} = \sqrt{1 - \frac{E_{pot}}{eU}}$$

Ein erstes Mikroskop, das die kleine Wellenlänge und damit die potentiell bessere Auflösung von Elektronenwellen nutzt, wurde 1932 von Knoll und Ruska (Nobelpreis 1932) aufgebaut. ➡ Elektronenmikroskop

Um Linsen für ein solches Mikroskop zu realisieren kann die Ablenkung in elektrischen (elektrische Linsen) oder in magnetischen (magnetische Linsen) Feldern genutzt werden.



Elektronen mit einer Energie von 100 keV könnten nach dem Rayleigh Kriterium 0,07 Å auflösen.

$$d_{min} = 0.61 \frac{\lambda}{\sin \alpha} \leftarrow \text{Numerische Apertur}$$

10⁵-fache Verbesserung gegenüber optischen Mikroskopen im Sichtbaren Spektrum!

aber: Größere Abbildungsfehler der Elektronenoptik ➡ kleinere Apertur

➡ reale Verbesserung der Auflösung besser als 3 Größenordnungen!

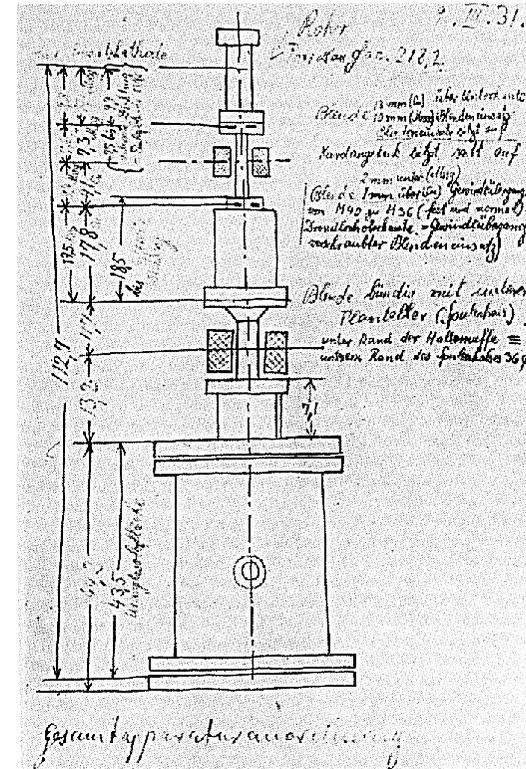
Es existieren verschieden Arten von Elektronenmikroskopen:

Transmissionsmikroskope (TEM = transmission electron microscope):

- Erfordern dünne Schichten als Proben und/oder sehr hohe Energien

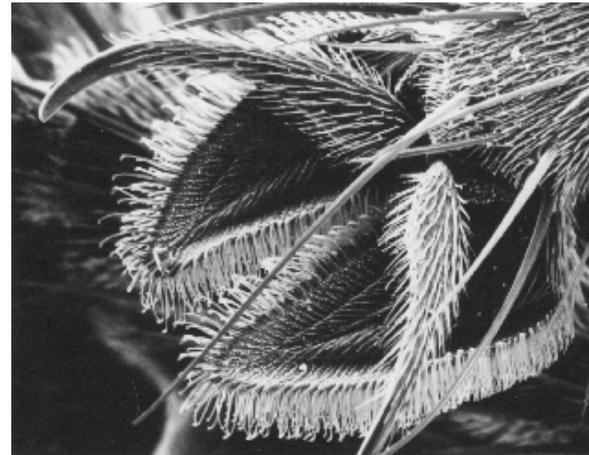
Rastersondenmikroskope (SEM = scanning electron microscope):

- Bildgebung durch Abstrahlung einer Probe mit einem fokussierten Elektronenstrahl
- Detektion von rückgestreuten und Sekundärelektronen
- Vorteil neben der hohen Auflösung ist die große Tiefenschärfe (Abbildung von rauhen oder zerklüfteten Oberflächen)
- Elektronendiffusion beschränkt die Auflösung auf etwa 20 nm
- Serielle Belichtung von Photolacken mit dem SEM-Strahl (**Ebeam lithography**)

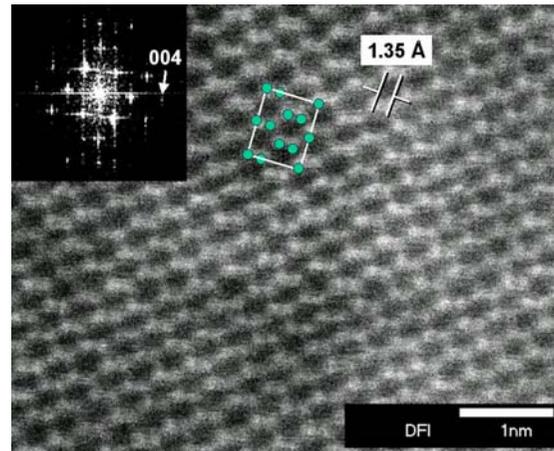
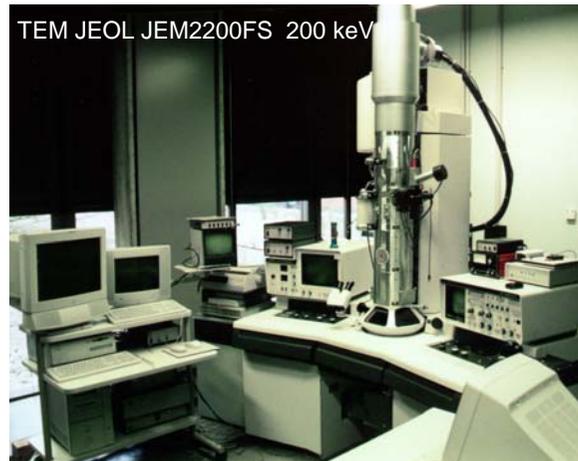


Skizze eines ersten Elektronen Mikroskops [aus E. Ruska, Nobel Lecture]

Kommerzielle Elektronenmikroskope (der HU, Prof. Neumann):



SEM-Bild von der
Klaue einer
Stubenfliege



TEM-Bild eines
Si Kristalls