

Atomphysik und Einführung in die Ideen der Quantentheorie

Marc Eyer

8. Januar 2012

Bohrsches Atommodell

Gegen Ende des 19. Jahrhunderts gab es eine Fülle von Experimente und Daten zu Lichtspektren verschiedener Gase. Es war zu dieser Zeit bereit möglich, die Wellenlänge von Licht genau zu bestimmen. Im Jahr 1884 fand der Schweizer Gymnasiallehrer Johann Balmer im Spektrum des Wasserstoffatoms folgende Regelmässigkeit:

$$\lambda = 364.6\text{nm} \cdot \frac{m^2}{m^2 - 4} \quad (1)$$

Dabei nimmt m die Werte 3, 4, 5, ... an. Nach ihm wurde diese Serie der Wasserstofflinien später benannt (*Balmer-Serie*). Balmer vermutete, dass seine Formel nur ein Spezialfall einer allgemeineren Gleichung darstellte. Rydberg und Ritz erweiterten wenig später die Gleichung, so dass sie auch auf schwerere Atome anwendbar war.

Die Theoretiker hinkten zu diesem Zeitpunkt den Experimentalphysikern hinterher. Die Modelle waren noch nicht in der Lage zu erklären, warum Atome nur ganz bestimmte Energien aufnehmen und auch (in Form von elektromagnetischer Strahlung) wieder abgeben.

Nils Bohr, der zu dieser Zeit im Labor von Ernest Rutherford arbeitete, schlug ein Modell für das Wasserstoffatom vor, welches das Spektrum des Wasserstoffs erklären konnte. Nach diesem Modell bewegt sich das Elektron auf einer Kreis- oder Ellipsenbahn – gleich den Planeten um die Sonne – um den Atomkern. In seinem Modell ist das Atom stabil, wenn die Coulomb-Kraft als Zentripetalkraft das Elektron auf der Kreibahn hält. Elektrodynamische Probleme seines Modells, wonach das Elektron in den Kern stürzen müsste, weil eine Beschleunigte Ladung (Elektron auf Kreisbahn) dauernd Energie in Form von elektromagnetischer Strahlung abgeben und in den Kern stürzen würde, ignorierte er vorerst. Um auch noch die diskreten Energien des Wasserstoffspektrums zu erklären, formulierte er drei Postulate:

1. In einem Atom bewegt sich ein Elektron nach den Gesetzen der klassischen Mechanik auf diskreten Kreisbahnen mit den Energien E_n
2. Die Bewegung des Elektrons erfolgt strahlungslos. Beim Übergang des Elektrons von einem stationären Zustand E_a in einen stationären Zustand niedrigerer Energie E_e wird ein Photon mit der Frequenz f

$$f = \frac{E_a - E_e}{h} \quad (2)$$

ausgesendet. h ist dabei eine Konstante.

3. Der Drehimpuls des Elektrons $L = m \cdot v \cdot r$ in einem stationären Zustand nimmt nur die diskreten Werte

$$L = n \cdot \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (3)$$

an, wobei n eine natürliche Zahl ist.

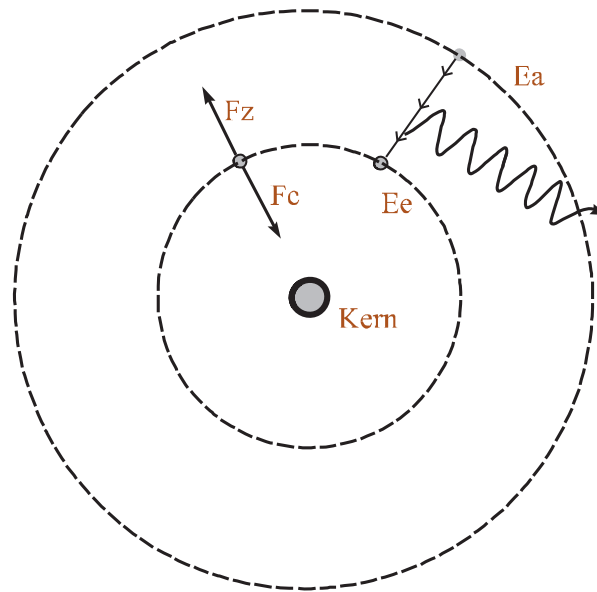


Abbildung 1: Bohrsches Atommodell

Wir wollen nun die Voraussagen untersuchen, die das Modell liefert.

Die *potentielle Energie* für eine Atom mit der Kernladungszahl Z , also der Kernladung Zq_e , wobei q_e die Elementarladung $1.6 \cdot 10^{-19}\text{C}$ ist, das ein Elektron mit der Ladung $-q_e$ besitzt, beträgt

$$E_{\text{pot}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r}. \quad (4)$$

Die *totale Energie* ist die Summe aus potentieller und kinetischer Energie:

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{kin}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r}. \quad (5)$$

Um die kinetische Energie zu erhalten, müssen wir die Bahngeschwindigkeit v des Elektrons kennen. Diese ergibt sich aus der Bedingung für eine stabile Kreisbewegung, wonach die Zentripetalkraft gleich der Zentralkraft (hier der Coulombe-Kraft) sein muss.

$$F_C = F_z \quad (6)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad (7)$$

m_e ist dabei die Elektronenmasse. Die kinetische Energie erhalten wir, wenn wir in der Gleichung (7) auf beiden Seiten mit r multiplizieren und durch 2 dividieren:

$$\frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \quad (8)$$

Die totale Energie ist damit

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \quad (9)$$

(Im Übrigen gilt für jedes in einem $1/r^2$ -Potential kreisende Teilchen, dass seine kinetische Energie der Hälfte der potentiellen Energie entspricht!)

Die totale Energie des Atoms hängt also vom Bahnradius r des Elektrons ab. Bohr kann mit diesen Überlegungen und seinem 2. Postulat die Frequenz angeben, mit der ein Atom eine elektromagnetische Welle aussendet.

$$f = \frac{E_a - E_e}{h} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{h} \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) \quad (10)$$

Allerdings ist damit noch nicht verständlich, warum die Atome ein *diskretes* Frequenzspektrum haben und kein *kontinuierliches*. Hier setzt das 3. Bohrsche Postulat an, das sagt, dass der Bahndrehimpuls L des Elektrons nur *diskrete* Werte annehmen kann. Um das zu zeigen lösen wir zuerst das 3. Bohrsche Postulat nach der Geschwindigkeit auf und quadrieren:

$$L = m_e v r = n \hbar \quad (11)$$

$$v^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{r^2 m_e^2} \quad (12)$$

v^2 erhält man auch aus der kinetischen Energie der Elektronen:

$$\frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} \quad (13)$$

$$v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r m_e} \quad (14)$$

Wir setzen die beiden Ausdrücke für v^2 einander gleich und lösen nach dem Radius r auf:

$$\frac{n^2 \hbar^2}{r^2 m_e^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r m_e} \quad (15)$$

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{q_e^2 m_e} \cdot \frac{n^2}{Z} \quad (16)$$

$$= a_0 \cdot \frac{n^2}{Z} \quad (17)$$

Dabei ist a_0 die Zusammenfassung aller Konstanten und gleichsam der Wert für den Radius des Wasserstoff-Atoms ($Z = 1$) im Grundzustand ($n = 1$). a_0 heisst **Bohrscher Radius** und beträgt

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{q_e^2 m_e} \approx 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \quad (18)$$

Da die totale Energie vom Radius abhängt und dieser nur diskrete Werte annehmen kann, gilt dies auch für die Energie im Atom. Durch einsetzen des Radius in die Formel für die totale Energie erhält man:

$$E_{\text{tot}} = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq_e^2}{r} = -\frac{q_e^4 m_e}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (19)$$

oder wenn alle Konstanten in E_0 zusammengefasst werden

$$E_{\text{tot}} = E_0 \cdot \frac{Z^2}{n^2}. \quad (20)$$

E_0 ist gerade die Energie des Grundzustandes ($n = 1$) des Wasserstoffatoms ($Z = 1$) und beträgt

$$E_0 = -\frac{q_e^4 m_e}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \approx -13.6 \text{ eV}. \quad (21)$$

Übungen

1. Interpretieren Sie die Formel für den Radius der Elektronenbahnen

$$r = a_0 \cdot \frac{n^2}{Z} \quad (22)$$

Was bedeutet es insbesondere, dass Z im Nenner steht?

2. Leiten Sie eine Formel für die Frequenz der von einem Atom abgegebenen Strahlung her, bei der die Quantisierung sichtbar ist.
3. In der folgenden Abbildung sehen Sie das Therschema des Wasserstoffatoms.

- (a) Überprüfen Sie die Energieangaben der Energieniveaus $n = 1$ bis $n = 5$.
- (b) Berechnen Sie die Wellenlängen der Strahlung der Balmer-Serie! Hinweis: $\lambda = \frac{c}{f}$

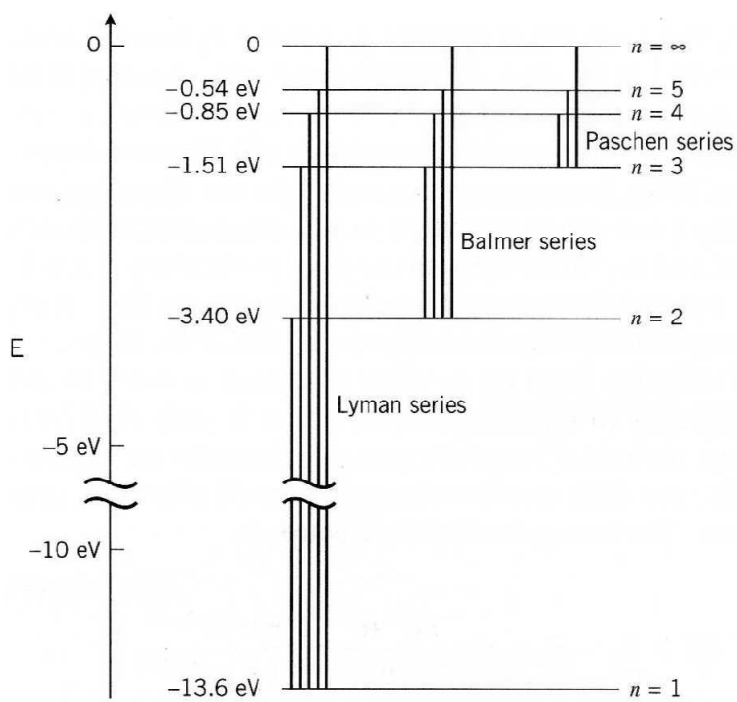


Abbildung 2: Thermschema des Wasserstoffatoms

Der photoelektrische Effekt (äusserer Photoeffekt)

- 1887: Entdeckung des photoelektrischen Effektes (kurz: Photoeffekt) durch Heinrich Hertz.
- 1900: Nähere Untersuchung durch Phillip Lenard
- 1905: Einstein verwendet Planks Idee der Energie-Quantisierung zur Erklärung des Photoeffektes, er prägt den Begriff des Photons (Nobelpreis 1921)

Versuchsaufbau:

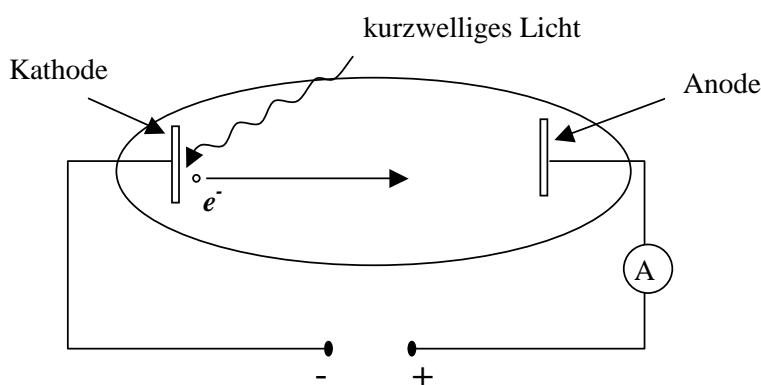


Abbildung 3: Schematischer Aufbau des Experimentes zum Photoeffekt.

Resultat:

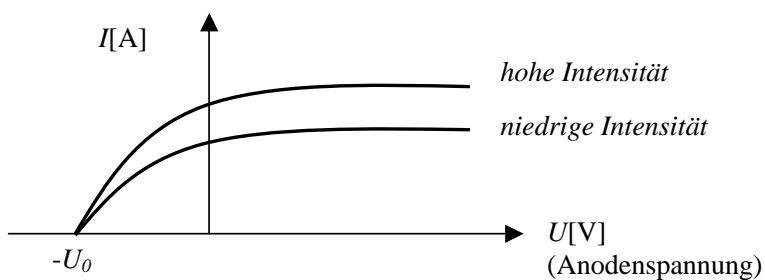


Abbildung 4: Schematischer Aufbau des Experimentes zum Photoeffekt.

- Ist die Anodenspannung hoch, gelangen alle bei einer gegebenen „Licht“-Intensität herausgeschlagenen Elektronen an die Anode.
- Weiteres Erhöhen der Anodenspannung führt zu keiner Zunahme des Stroms.
- Ist die Anodenspannung gegenüber der Kathodenspannung negativ, werden die Elektronen gebremst.

- Ist die Bremsspannung und damit die benötigte Energie, welche die Elektronen haben müssen, um die Anode zu erreichen ($U \cdot q_e$) grösser als die maximale kinetische Energie der Elektronen ($\frac{mv^2}{2}$), dann kommen keine Elektronen bis zur Anode ($I = 0V$). Es gilt dann:

$$\frac{mv^2}{2} \text{ max} = U \cdot q_e \quad (23)$$

Überraschung aus klassischer Sicht:

- U_0 ist unabhängig von der Licht-Intensität J und damit ist auch $\frac{mv^2}{s} \text{ max}$ unabhängig von $J!!!$

$$J = \frac{P}{A} = \frac{W}{t \cdot A} \quad (24)$$

- Klassisch sollte die kontinuierlich auftreffende Energie bei grösser werdendem J (mehr Energie pro Zeit und Fläche) den Elektronen mehr kinetische Energie verleihen!?!)

Einsteins Erklärung:

- Die Energie kommt nicht kontinuierlich, sondern in Portionen (*Lichtquanten, Photonen*). Jedes Photon trägt eine Energie $E \propto f$ genauer:

$$E = h \cdot f \quad (25)$$

mit h der Plank'schen Konstanten und f der Frequenz.

- Es kommt also auf die Energie des *einzelnen Photons* an, ob ein Elektron herausgeschlagen wird:

$$\frac{mv^2}{2} = U_0 \cdot q_e = h \cdot f - W_A \quad (26)$$

wobei W_A die Austrittsarbeit ist, um ein Elektron herauszuschlagen.

- Die Austrittsarbeit ist materialabhängig.
- Die Frequenz, bei der die Elektronen gerade nicht austreten ($\frac{mv^2}{2} = 0$) nennt man *Grenzfrequenz* und die entsprechende Wellenlänge die *Grenzwellenlänge*.

$$h \cdot f = W_A \rightarrow f_G = \frac{W_A}{h} \rightarrow \lambda_G = \frac{c \cdot h}{W_A} \quad (27)$$

- Die Intensität ist gegeben durch die Anzahl auftreffender Photonen pro Zeit und Fläche:

$$J = \frac{n \cdot h \cdot f}{t \cdot A} = \frac{n \cdot h \cdot c}{\lambda \cdot t \cdot A} \quad (28)$$

mit n der Anzahl Photonen.

Übungen

1. Berechnen Sie die Energie (in eV) von Photonen der Wellenlängen 400 nm (violett) und 700 nm (rot). Diese stellen etwa die beiden Enden des sichtbaren Spektrums dar.
2. Die Energie des Sonnenlichts beträgt an der Oberfläche der Erde etwa $1400 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$. Berechnen Sie die Anzahl von Photonen, die in einer Sekunde auf eine Fläche von 1 cm^2 treffen. Gehen Sie davon aus, dass die durchschnittliche Photonen-Energie 2 eV beträgt. Dies entspricht einer Wellenlänge von etwa 600 nm.
3. Die Grenzwellenlänge für Kalium liegt bei 564 nm.
 - (a) Wie gross ist die Austrittsarbeit?
 - (b) Wie gross ist die maximale Bremsspannung für einfallendes Licht der Wellenlänge 400 nm?
4. Für den Bohr'schen Radius (kleinster Bahnradius des Wasserstoffelektrons) haben wir folgende Formel hergeleitet:

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e \cdot q_e^2} \quad (29)$$

Berechnen Sie seinen Betrag!

5. Berechne für das Wasserstoffatom
 - (a) die 7 ersten Energiestufen
 - (b) die Wellenlänge des ausgesandten Photons, wenn das Elektron von der vierten auf die dritte Stufe zurück springt.
6. Berechne für das Elektron der ersten Bahn des Wasserstoffatoms das Verhältnis seiner Umlaufgeschwindigkeit zur Lichtgeschwindigkeit.

Der Wellen–Teilchen–Dualismus

Eine Reihe von Experimenten (äusserer Photoeffekt, Comptenstreuung) zeigen um die Jahrhundertwende vom 19. ins 20. Jahrhundert, dass Licht unter bestimmten Bedingungen sich als Teilchen manifestiert. Einstein interpretierte den Photoeffekt so, dass er das Konzept der Lichtteilchen (*Photonen*) einführte und ihnen die Energie

$$E_p = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (30)$$

zuordnete.

Aus der speziellen Relativitätstheorie folgt ausserdem aus der Formel für die totale Energie eines Teilchens

$$E = \sqrt{(p \cdot c)^2 + (m_0 \cdot c^2)^2} \quad (31)$$

und für ein Lichtteilchen (dessen Ruhemasse m_0 bekanntlich null ist) die Energie:

$$E_p = p \cdot c \quad (32)$$

Was in dieser Formel der Impuls, der klassisch als $p = m \cdot v$ verstanden wird, für eine Bedeutung hat war vorher nicht ganz klar. Mit der Interpretation des Photoeffekts folgt aber nun:

$$E_p = \frac{h \cdot c}{\lambda} = p \cdot c \quad (33)$$

und damit

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (34)$$

Der Impuls p ist klassisch eine typische Grösse für ein Teilchen und die Wellenlänge λ eine typische Grösse für eine Welle. Licht scheint je nach Situation beide Eigenschaften zu haben.

Der Strahlungsdruck

Da Licht einen Impuls hat, erzeugt Licht auch einen Druck und wirkt mit einer bestimmten Kraft auf eine Oberfläche.

Der Druck D ist klassisch definiert als Kraft F pro Fläche A :

$$D = \frac{F}{A} \quad (35)$$

Die Kraft, die durch Photon bei deren Reflexion auf eine Oberfläche ausgeübt wird ist gleich deren Impulsänderung pro Zeit:

$$F = n \cdot \frac{\Delta p}{t} \quad (36)$$

mit n der Anzahl Photonen. Da die Photon bei senkrechtem Auftreffen auf die Oberfläche ihre Bewegungsrichtung gerade umdrehen, ist die Impulsänderung

$$\Delta p = 2 \cdot p = \frac{2h}{\lambda} \quad (37)$$

Der Strahlungsdruck D_r ist damit:

$$D_r = n \cdot \frac{F}{A} = n \cdot \frac{\Delta p}{t \cdot A} = n \cdot \frac{2h}{\lambda \cdot t \cdot A} \quad (38)$$

Bei einer gegebenen Strahlungsintensität J , wie beispielsweise die Strahlungsintensität der Sonne in der Entfernung der Erde (auch Solarkonstante genannt) kann der Strahlungsdruck auch als Funktion der Intensität angegeben werden. Die Intensität J ist die durch die Strahlung erzeugte Leistung pro Fläche und Zeit.

$$J = \frac{P}{A} = \frac{E}{t \cdot A} = n \cdot \frac{h \cdot c}{\lambda \cdot t \cdot A} \quad (39)$$

In der Intensität Ausgedrückt ist der Strahlungsdruck damit

$$D_r = n \cdot \frac{2h}{\lambda \cdot t \cdot A} = 2 \cdot \frac{J}{c} \quad (40)$$

Übungen

1. Berechnen sie die Kraft mit der die Sonne auf 1 m² Solarzellen eines Erdsatelliten drückt, wenn das Licht senkrecht auf das Solarpanel fällt.
2. Welche Leistung müsste ein Laser haben, um ein Metallplättchen der Masse 0.1 g und der Fläche 1 mm² gegen die Erdanziehung schweben zu lassen. (Strahlungs–Levitation).
3. In einer Produktbeschreibung zur „Lichtmühle“ steht, dass sich das Spielzeug wegen des Strahlungsdrucks in Rotation versetzt. Überprüfen Sie diese Aussage, indem Sie die Winkelbeschleunigung berechnen, wenn sie die „Lichtmühle“ mit einer 100 Watt Glühbirne beleuchten.

Materiewellen

1924 postulierte Louis De Broglie, dass dies nicht nur für die masselosen Photonen so sei, sondern auch für massebehaftete, das heisst für alle Teilchen! Der von Davison und Germer 1919 durchgeführte (und 1927 richtig erklärte) Versuch, bei welchem Elektronen an einem Gitter gebeugt werden und ein Interferenzmuster erzeugen, bestätigt De Broglies Annahmen.

Wie aber soll man sich ein Teilchen als Welle vorstellen. Eine Welle ist etwas ausgedehntes und ein Teilchen etwas lokalisiertes. Die beiden Anschauungen widersprechen sich. In der klassischen Physik bleibt hier ein Widerspruch. In der so genannten Quantentheorie bedient man sich der Mathematik, welche die Möglichkeit bietet sowohl dem Teilchenaspekt, wie auch dem Wellenaspekt gerecht zu werden.

In der Quantentheorie ordnet man jedem Objekt (wir sprechen nun besser nicht mehr von Teilchen, da es sich eben weder um Teilchen noch um Wellen handelt) eine *Wellenfunktion* Ψ zu, welches seinen Zustand beschreibt.

Als erstes Beispiel schauen wir uns eine etwas besondere Situation an, welche aber eine relativ anschauliche Wellenfunktion liefert: Die Wellenfunktion eines Elektrons, das in einen Kasten eingesperrt ist.

Das Elektron im Kasten

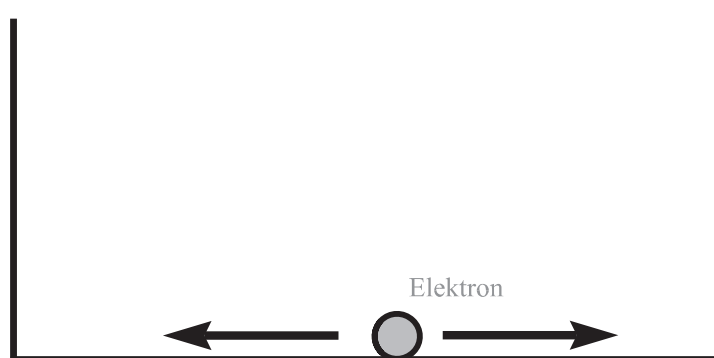


Abbildung 5: Das Elektron im Kasten

Will man dem Elektron eine Wellenfunktion zuordnen, muss man berücksichtigen, dass in diesem besonderen Fall Rahmenbedingungen gewisse Einschränkungen machen. So kann das Elektron zum Beispiel weder ausserhalb der Wand rechts noch ausserhalb der Wand links sich aufhalten. (Es ist ja im Kasten gefangen!)

Bereits in der klassischen Wellenlehre haben wir „eingeschlossene“ Wellen angetroffen; *Stehende Wellen* (z.B. auf einer Saite).

Wir können die Wellenfunktion des Elektrons im Kasten als stehende Welle auffassen mit den Randbedingungen $y(x = 0, t) = 0$ und $y(x = l, t) = 0$, wobei y die Auslenkungen der Welle zu einem bestimmten Zeitpunkt t und an einem bestimmten Ort x und l die Länge des Kastens bezeichnen.

Gemäss der klassischen Theorie für stehende Wellen sind bei diesen Randbedingungen nur die stehenden Wellen mit folgenden Wellenlängen möglich:

$$l = n \cdot \frac{\lambda}{2} \quad \text{bzw.} \quad \lambda = \frac{2l}{n} \quad (41)$$

Die maximalen Auslenkungen als Funktion des Ortes der möglichen stehenden Wellen sehen also wie folgt aus:

$$y_n(x) = A_n \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} \cdot x\right) = A_n \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{l} \cdot x\right) \quad (42)$$

Dem Elektron werden also folgende möglichen Wellenfunktionen zugeschrieben:

$$\Psi_n = A_n \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \quad (43)$$

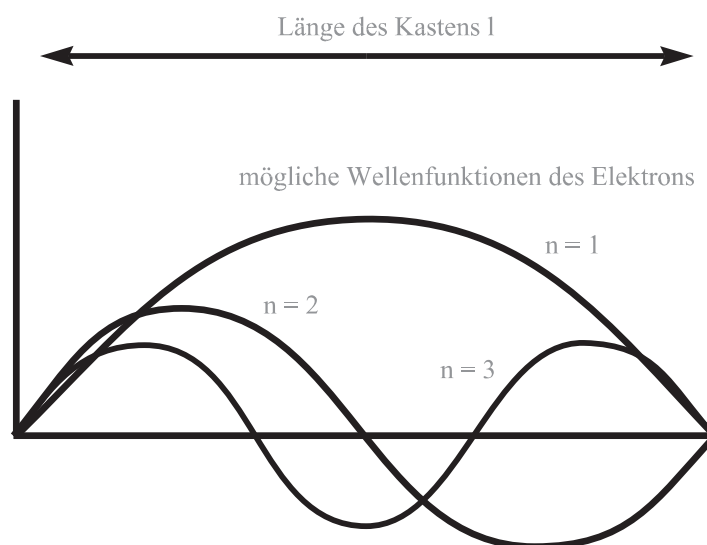


Abbildung 6: Mögliche Wellenfunktionen des Elektrons im Kasten

Was aber haben diese Wellenfunktionen für eine physikalische Bedeutung? Nun kommt einer der wesentlichen Aspekte der Quantentheorie, auf dessen Herleitung wir hier verzichten, da dieser der Intuition der damaligen Physiker entspringt und letztlich nur durch die experimentelle Bestätigung Rechtfertigung findet:

Wenn man nach dem Elektron als Teilchen fragt, so wird das Quadrat der Wellenfunktion Ψ^2 als Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons am jeweiligen Ort interpretiert.

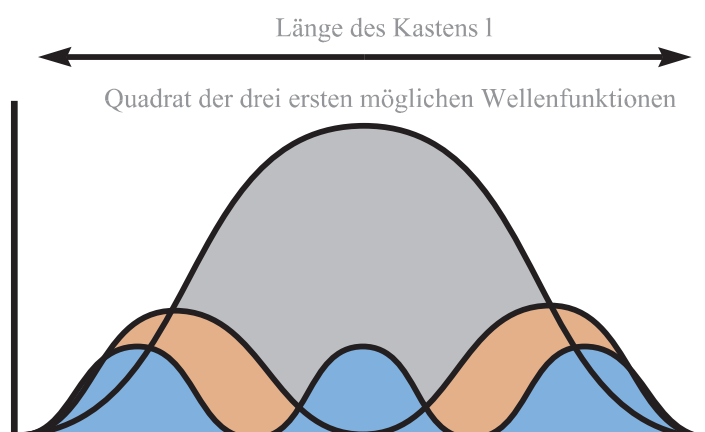


Abbildung 7: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons an den jeweiligen Orten in den drei ersten möglichen Zuständen

Durch die Beschreibung des „gefangenen Elektrons“ lässt nun auch verstehen, warum im Bohr'schen Atommodell das Elektron im Wasserstoff-Atom nur ganz bestimmte Energiezustände annehmen kann (3. Bohr'sches Postulat). Das Elektron ist eine *stehende Welle* um das Atom herum und kann nur ganz bestimmte Schwingungszustände einnehmen (vgl. Figur 8).

Die Energien, die zu den Schwingungszuständen gehören lassen sich über die DeBroglie Beziehung herleiten. Die kinetische Energie ist klassisch

$$E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad (44)$$

Der Impuls p ist aber gemäss DeBroglie mit der Wellenlänge wie folgt verknüpft:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (45)$$

Die Wellenlänge des Elektrons im Kasten hängt aber mit der Länge des Kastens zusammen.

$$l = \frac{n\lambda}{2} \quad (46)$$

Die kinetische Energie ist daher

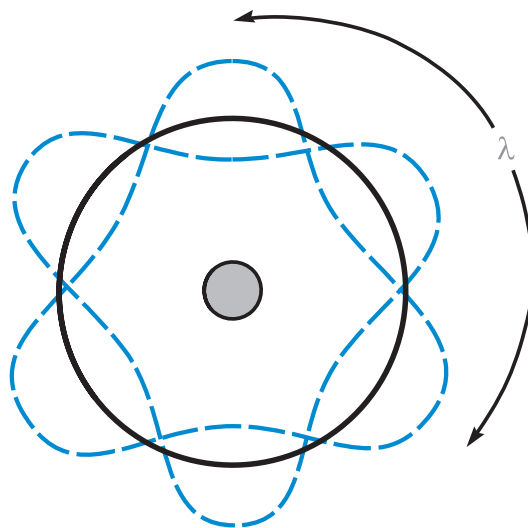


Abbildung 8: Das Elektron als stehende Welle um den Atomkern.

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{h^2 n^2}{2m(2l)^2}$$

$$E_{\text{kin}} = n^2 \frac{h^2}{8ml^2} \quad (47)$$

Wie bei Bohrschen Atommodell durch das 3. Postulat erzwungen, taucht auch hier die Energie gequantelt, d.h. in Vielfachen einer Grundenergie auf.

Das freie Elektron

Wie behelfen wir uns nun, wenn wir die Wellenfunktion eines freien Elektrons suchen. Das Problem, das wir nun haben ist, dass die Wellenfunktion beim freien Elektron nicht durch Randbedingungen eingeschränkt ist, d.h. unendlich viel Platz hat. Andererseits können wir ja das Elektron zu einem bestimmten Zeitpunkt an einem bestimmten Ort messen, dann ist die Wahrscheinlichkeit, es einen winzig kleinen Moment später anzutreffen nicht an allen Orten gleich. Wir suchen also etwas, das eine Welle ist und doch ziemlich scharf lokalisiert ist!

Das Wellenpaket

Wiederum orientieren wir uns an der klassischen Wellenlehre. Von dort her kennen wir was geschieht, wenn sich zwei Wellen mit fast gleicher Wellenlänge zu einem festgehaltenen Zeitpunkt $t = 0$ überlagern.

$$Y(x) = y_1(x) + y_2(x) = A \sin(k_1 \cdot x) + A \sin(k_2 \cdot x) = 2A \cdot \sin\left(\frac{(k_1 + k_2) \cdot x}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{(k_1 - k_2) \cdot x}{2}\right) \quad (48)$$

wobei $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ die Wellenzahl ist.

Es ergibt sich eine Funktion, die wir in der Schwingungslehre als *Schwebung* bezeichnet haben, allerdings ist hier die Schwebung jetzt „räumlich“. $\bar{k} = \frac{k_1 + k_2}{2}$ ist die Wellenzahl der neuen Welle und $\Delta k = \frac{k_1 - k_2}{2}$ die Wellenzahl der Modulation der Amplitude. Diese Art von Welle hat die Eigenschaft, dass sie an gewissen Stellen verschwindet und an anderen sich konzentriert.

Durch eine geeignete Überlagerung von Wellen lässt sich nun eine noch lokalisiertere (ja beliebig genau lokalisierte) Welle konstruieren, indem man unendlich viele Wellen innerhalb eines k -Intervalls superponiert. Wir wollen ein Wellenpaket erzeugen, indem wir kontinuierlich Wellen im Intervall $k_0 - \Delta k$ und $k_0 + \Delta k$ einander überlagern. Wiederum halten wir dabei die Zeit $t = 0$ fest (Standbild).

$$\Psi(x, t = 0) = A_0 \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \cos(kx) dk \quad (49)$$

Die Lösung des Integrals ergibt:

$$\Psi(x) = A_0 \frac{\sin(\Delta k \cdot x)}{x} \quad (50)$$

Ein solches Gebilde nennt man ein *Wellenpaket* (vgl. Figur 9). Das Wellenpaket eignet sich als Wellenfunktion eines Quantenobjektes. Die Wellenfunktion hat die Eigenschaft, dass wenn das Intervall Δk , über welches man integriert grösser wird, das Wellenpaket besser lokalisiert ist.

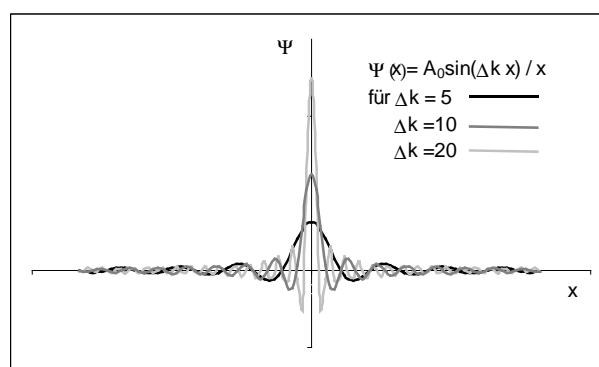


Abbildung 9: Integral monochromatischer Wellen im Intervall $k_0 - \Delta k$ und $k_0 + \Delta k$ zum Zeitpunkt $t = 0$ mit gleichen Amplituden. Für $x \rightarrow \pm\infty$ verschwinden die Auslenkungen.

Interessieren wir uns für die Teilchen-Eigenschaft des Quantenobjektes, so gibt uns das Quadrat der Wellenfunktion Ψ^2 die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Aufenthaltsorts des Teilchens an (vgl. Figur 10).

$$\Psi^2(x) = A_0^2 \frac{\sin^2(\Delta k \cdot x)}{x^2} \quad (51)$$

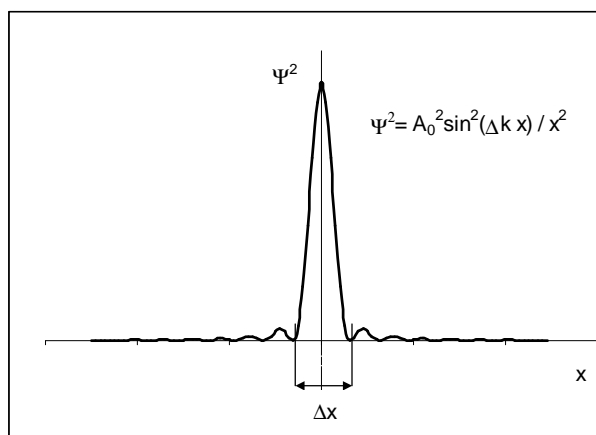


Abbildung 10: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Elektrons ist gegeben durch das Quadrat des Wellenpakets Ψ^2

Heisenberg'sche Unschärferelation

Wie wir oben gesehen haben können wir die Wellenfunktion eines freien Quantenobjektes besser lokalisieren, wenn wir mehr Wellen, oder besser, Wellen über ein grösseres k -Intervall Δk , aufintegrieren. Wir definieren für die *Ortsschärfe* die Grösse Δx als das Ortsintervall zwischen den beiden ersten Nullstellen neben dem Hauptmaximum der Welle (vgl. Figur 10). Von der „Mitte“ der Funktion ψ^2 ausgehend wird diese das erste mal an den Stellen null, wo $\sin^2(\Delta k \cdot x) = 0$ wird und das ist bei $\sin^2(\pm\pi)$ der Fall und das ist, weil an diesen Stellen $\Delta k \cdot (-x) = -\pi$ und $\Delta k \cdot (x) = +\pi$ gibt. Für die beiden Null-Stellen links und rechts der Mitte gilt also

$$\Delta k \cdot (x) - \Delta k \cdot (-x) = \Delta k \cdot \Delta x = \pi - (-\pi) = 2\pi \quad (52)$$

Wir wollen das Δk wieder in uns geläufigeren Grössen darstellen:

$$\Delta k = \frac{2\pi}{\Delta \lambda} \quad (53)$$

und da $p = \frac{h}{\lambda}$ und $\lambda = \frac{h}{p}$, ist

$$\Delta k = \frac{2\pi}{\Delta\lambda} = \frac{2\pi}{h} \cdot \Delta p \quad (54)$$

Die Beziehung (52) kann man also auch schreiben als:

$$\frac{2\pi}{h} \cdot \Delta p \cdot \Delta x = 2\pi \quad (55)$$

oder

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h \quad (56)$$

Das bedeutet, dass ein Quantenobjekt nie gleichzeitig einen eindeutig bestimmten Ort *und* einen eindeutig bestimmten Impuls haben kann. Um eine Orts-Unschärfe $\Delta x = 0$ zu erhalten muss das Integral über ein Intervall von $\Delta k = \infty$ ausgeführt werden, was bedeutet, dass auch die Impuls-Unschärfe unendlich gross wird $\Delta p = \infty$! In der Quantenmechanik nennt man den Ort und den Impuls zueinander *komplementäre Grössen*.

Die hier hergeleitete Beziehung zwischen Impuls- und Ortsunschärfe stimmt quantitativ nicht genau mit der korrekten Beziehung überein, wie sie Heisenberg angegeben hat. Wir haben hier diese Abweichung zugunsten einer nachvollziehbaren Herleitung (die nicht ganz korrekt ist) in Kauf genommen. Die exakte Beziehung zwischen der Impulsunschärfe Δp und der Ortsunschärfe Δx beträgt

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2} \quad (57)$$

In der Quantentheorie tauchen weitere komplementäre Grössen auf, so ist auch die gleichzeitige genaue Angabe von Energie und Zeit nicht möglich. Es gilt

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (58)$$

Konsequenzen der Heisenberg'schen Unschärferelation

Kehren wir zurück zu der Situation des Elektrons, das im Atom (Wasserstoffatom) gefangen ist. Man spricht von einem *gebundenen Zustand* des Elektrons. Die Antwort auf die Frage, warum es

eine kleinste Elektronenbahn gibt, konnte, wie wir bereits früher diskutiert haben, mit der klassischen Physik nicht erklärt werden. Die Heisenberg'sche Unschärferelation gibt hier eine Antwort auf die Frage.

Die Energie des Elektrons besteht klassisch aus seiner kinetischen E_{kin} und seiner potentiellen Energie E_{pot} .

$$E_{\text{klass}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} \quad (59)$$

Drücken wir in der kinetischen Energie $E_{\text{kin}} = \frac{m_0 \cdot v^2}{2}$ die Geschwindigkeit durch den klassischen Impuls $p = m_0 \cdot v$ bzw. $v = \frac{p}{m_0}$ aus und nehmen wir für die Potentielle Energie das Coulomb-Potential $E_{\text{pot}} = \frac{-q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ so ergibt sich für die gesamte Energie explizit

$$E = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (60)$$

wobei r der Abstand des Elektrons vom Kern ist.

In der klassischen Mechanik wird das Elektron, gleich einem Planeten auf einer stabilen Umlaufbahn, als Teilchen betrachtet, bei dem seine Zentrifugalkraft \vec{F}_z gleich der Coulomb-Kraft $-\vec{F}_C$ ist und die Beträge der Kräfte

$$F_z = -F_C \quad (61)$$

bzw.

$$\frac{m_0 v^2}{r} = -\frac{-q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (62)$$

oder

$$\frac{p^2}{m_0 r} = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (63)$$

Die kinetische Energie kann also auch geschrieben werden als:

$$E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{E_{\text{pot}}}{2} \quad (64)$$

Damit ist die totale Energie des Elektrons:

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = -\frac{1}{2} \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (65)$$

Lassen wir in dieser Gleichung r gegen Null gehen, geht die Energie gegen $-\infty$. Die Energie wird also immer mehr abgesenkt und es gibt keinen kleinsten Bahnradius. Betrachten wir nun diese Energie von einer „naiven“ Quantenmechanik aus, so würde „Bahn“ bedeuten, dass wir das Elektron auf einer Distanz von der Grösse r konzentriert haben. Die Ortsunschärfe Δx wäre also von der Grössenordnung r . Damit ist jedoch eine Impulsunschärfe Δp von der Grösse $\frac{h}{\Delta x} = \frac{h}{r}$ gegeben. Der minimale Impuls hängt also mit r zusammen. Setzen wir diesen minimalen Impuls

$$p \approx \frac{h}{r} \quad (66)$$

in Gleichung (60) ein, so erhalten wir eine Gleichung für die Energie, bei der das Minimum nicht mehr bei $r = 0$ liegt (vgl. Abbildung 11)!

$$E = \frac{1}{2m_0} \frac{h^2}{r^2} - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (67)$$

Würde nämlich r gegen Null gehen, so steigt der Term für die kinetische Energie sehr stark an! Durch Null setzen der ersten Ableitung nach r erhält man das Minimum der Energie bei:

$$r = \frac{h^2 \cdot 4\pi\epsilon_0}{m_0 q_e^2} \quad (68)$$

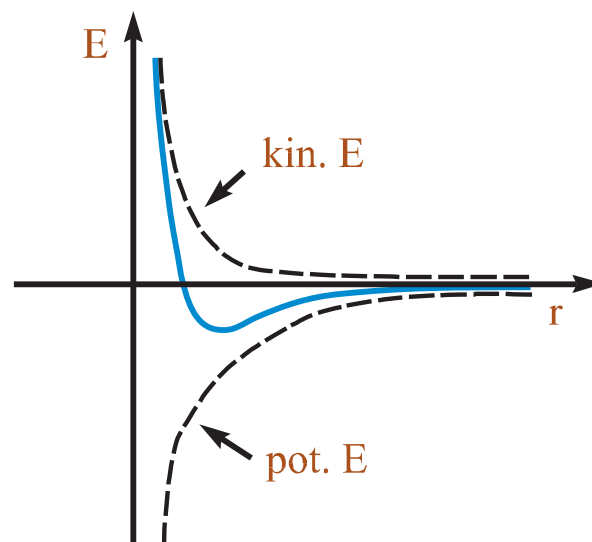


Abbildung 11: Potential in der Umgebung des des Atomkerns

Die dazu gehörige Energie ergibt sich, wenn wir dieses r in (67) einsetzen:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{q_e^2 m_0}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2} \quad (69)$$

Eine wichtige Konsequenz aus der Heisenbergschen Unschärferelation ist offenbar die Existenz einer minimalen Energie, der Nullpunktsenergie. Das haben wir auch schon bei der Energiebetrachtung beim Elektron im eindimensionalen Kasten festgestellt! (Vgl. Gleichung (47)). Diese wird umso grösser, je kleiner der Raum ist, auf welchen das System eingeschränkt ist. Dies bedeutet z.B., dass es die absolute Nullpunktstemperatur 0 Kelvin nicht gibt, weil diese die absolute Teilchen-Ruhe an einem ganz bestimmten Ort voraussetzt.

Weil die Unschärferelation keine Gleichung ist, lassen sich damit keine exakten Angaben machen, sondern nur Grenzen festlegen. Zum Beispiel *Die Lokalisation kann nicht besser sein als ...* oder *Der Impuls kann nicht genauer angegeben werden als $p \pm \Delta p$* . Auch wenn die Grössen in der Physik damit im Prinzip nicht mehr scharf definiert sind, so lassen sich doch Mittelwerte oder besser so genannte *Erwartungswerte* exakt angeben. Wie diese berechnet werden können lernen wir im nächsten Kapitel.

Werden Gasatome angeregt, können sie also bei geeigneter Energie angeregt werden. Dabei gelangt ein Elektron auf ein höheres Energie-Niveau. Wie lange ein einzelnes angeregtes Atom in diesem *angeregten Zustand* verharrt ist im Prinzip zufällig und nicht vorauszusagen. (Analog ist es beim Zerfall eines instabilen Atomkerns). Manchmal fällt das Elektron nach 10^{-10} s, manchmal erst nach 10^{-6} s wieder in den Grundzustand. Beobachtet man allerdings die *Lebensdauer* eines ganz bestimmten angeregten Zustandes eines Atoms kann statistisch eine Häufung der Lebensdauer um einen Mittelwert festgestellt werden. Man spricht von der *mittleren Lebensdauer des angeregten Zustands*. Diese mittlere Lebensdauer ist auch eine Grössenordnung für die Unbestimmtheit der Zeit Δt , wann ein angeregter Zustand zerfällt. Da die Zeitunschärfe mit der Energieunschärfe zusammenhängt, ist die Energie der ausgesendeten Photonen beim Zerfall des angeregten Zustandes unscharf. Da der angeregte Zustand nie eine unendlich grosse Lebensdauer hat, hat das ausgesendete Licht prinzipiell eine unscharfe Energie und damit eine Streubreite in der Frequenz, bzw. der Wellenlänge! Man spricht von der *natürlichen Linienbreite* eines ausgesendeten Lichtimpulses. Typische Werte für die mittlere Lebensdauer von angeregten Zuständen liegen in der Grössenordnung von 10^{-8} s. Es ist heute aber auch möglich, mittlere Lebensdauern von angeregten Zuständen von einigen 10 Sekunden zu erzeugen.

Es ist einfach die Linienbreite abzuschätzen. Die Unschärferelation gibt den Zusammenhang zwischen Energieunschärfe und Zeitunschärfe:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (70)$$

Da die Frequenz f proportional zur Energie eines Photons ist, ist auch die Änderung der Frequenz Δf proportional zur Änderung der Energie ΔE . Es folgt mit $\Delta E = h \cdot \Delta f$ und $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

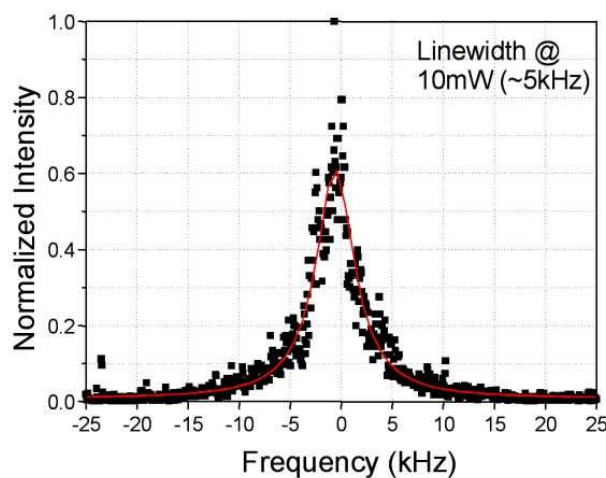


Abbildung 12: Linienbreite eines Lichtimpulses

$$h \cdot \Delta f \cdot \Delta t \geq \frac{h}{4\pi} \quad (71)$$

und

$$\Delta f \geq \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{\Delta t}. \quad (72)$$

Etwas umständlicher ist es, wenn wir die Linienbreite in Wellenlängen angeben wollen. Die Energie ist proportional zum Kehrwert der Wellenlänge $E = \frac{hc}{\lambda}$, die Änderung der Wellenlänge hängt damit auf kompliziertere Weise mit der Änderung der Energie zusammen. Um die Änderung von λ als Funktion der Änderung der Energie zu finden bilden wir die Ableitung der Energie nach λ :

$$\frac{dE}{d\lambda} = -\frac{hc}{\lambda^2} \quad (73)$$

Damit können wir den Betrag von $\Delta\lambda$ näherungsweise angeben als

$$\Delta\lambda \approx \frac{\Delta E \lambda^2}{hc} \quad (74)$$

und wenn wir für ΔE schliesslich die Unschärferelation (58) anwenden, ergibt sich

$$\Delta\lambda \approx \frac{\lambda^2}{4\pi c \Delta t} \quad (75)$$

Übungen

1. Berechnen Sie die Nullpunktsenergie für ein Teilchen, der Masse m , das sich in einem eindimensionalen Volumen der Länge l befindet.

2. Wie gross ist das Verhältnis der Impulsunschärfe Δp zum Impuls p bei einem Wellenpaket, dessen Ortsunschärfe der DeBroglie-Wellenlänge des Teilchens entspricht.
3. Schätzen Sie die mittlere Lebensdauer des angeregten Zustandes ab, aus welchem die Photonen der in Abbildung 12 dargestellten Spektrallinie stammen.
4. Der erste angeregte Zustand des Wasserstoff-Atoms habe eine mittlere Lebensdauer von $10^{-9}s$.
 - (a) Wie gross ist die Streuung in der Energie der Photonen (die so genannte *Linienbreite*) die beim Zerfall emittiert werden?
 - (b) Wie gross ist die Linienbreite in Wellenlänge ausgedrückt?

Erwartungswert physikalischer Grössen

Im Kapitel über das Elektron im eindimensionalen Kasten haben wir bereits gesehen, dass einem Quantenobjekt eine Wellenfunktion Ψ zugeordnet wird, deren Quadrat Ψ^2 als Aufenthaltswahrscheinlichkeit interpretiert wird. Wir wollen nun diese Wellenfunktion quantitativ auswerten und zum Beispiel danach fragen, welche Werte gewisse physikalische Grössen, die das Quantenobjekt charakterisieren, denn nun annehmen. Wir kommen dazu zu dem einfachsten Modell, dem Teilchen im eindimensionalen Kasten zurück. Seine Wellenfunktion lautet

$$\Psi_n = A_n \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right). \quad (76)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Quantenobjekts ist beschrieben durch

$$\Psi_n^2 = A_n^2 \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right). \quad (77)$$

Damit man aufgrund dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung Aussagen über die Wahrscheinlichkeit machen kann, das Teilchen an einem bestimmten Ort anzutreffen, muss die Funktion zuerst *normiert* werden. Das bedeutet, dass die Amplitude A der Funktion bestimmt werden muss. Dies können wir tun, durch dass wir die Tatsache nutzen, dass die Summe aller Wahrscheinlichkeiten an den verschiedenen Orten 1 ergeben muss (das Teilchen muss ja irgendwo sein!). Es gilt also, dass das Integral über Ψ^2 gleich 1 sein muss:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^2 dx = 1 \quad (78)$$

Angewendet auf unser Beispiel gilt es also, aus dieser Bedingung A zu bestimmen. Dazu lösen wir das folgende Integral:

$$\int_0^l A^2 \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = 1 \quad (79)$$

Wir ändern dazu am Besten die Variable und setzen

$$\theta = \frac{n\pi x}{l}. \quad (80)$$

Dann ist

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{n\pi}{l} \quad (81)$$

und

$$dx = d\theta \cdot \frac{l}{n\pi}. \quad (82)$$

Wir ersetzen dx mit diesem Ausdruck. Für die Integrationsgrenzen setzen wir in Formel (80) $x = 0$ bzw. $x = l$. Wir erhalten damit

$$\frac{A^2 l}{n\pi} \int_0^\pi \sin^2(\theta) d\theta = 1 \quad (83)$$

Dieses Standard-Integral lässt sich mit Hilfe der Formelsammlung lösen.

$$\int_0^{n\pi} \sin^2(\theta) d\theta = \left[\frac{\theta}{2} - \frac{\sin(2\theta)}{4} \right]_0^{n\pi} = \frac{n\pi}{2} \quad (84)$$

Also lautet die Normierungsbedingung

$$\frac{A^2 l}{n\pi} \cdot \frac{n\pi}{2} = 1. \quad (85)$$

Damit ist schliesslich

$$A = \sqrt{\frac{2}{l}} \quad (86)$$

Die normierte Wellenfunktion für das Teilchen im eindimensionalen Kasten lautet damit

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right). \quad (87)$$

Jetzt kann damit die Wahrscheinlichkeit P , das Teilchen in einem bestimmten Teil des Kastens anzutreffen, ausgerechnet werden, indem Ψ^2 über den gewünschten Bereich integriert wird. Dies soll im Rahmen von Übungen geschehen. Um nun eine Aussage über den *durchschnittlichen Aufenthaltsort* den so genannten *Erwartungswert des Ortes* $\langle x \rangle$ für das Teilchen zu berechnen,

muss jeder Ort x mit seiner Wahrscheinlichkeit Ψ^2 multipliziert und alle diese Produkte aufsummiert werden. Das ergibt folgendes Integral:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \Psi_n^2 dx \quad (88)$$

Übungen

1. Berechnen Sie den Erwartungswert für den Ort für das Elektron im eindimensionalen Kasten der Länge l für $n = 1$.
2. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit P das Elektron im eindimensionalen Kasten im Grundzustand im Bereich $0 < x < \frac{l}{4}$ zu finden.
3. Zeigen Sie, dass für sehr grosse n die relative Differenz der Energieniveaus beim eindimensionalen Kasten in guter Näherung durch

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} \quad (89)$$

gegeben ist. Welche Bedeutung hat dieses Resultat für die Quantentheorie ganz allgemein?