

# **LK Physik 13**

## **Quantenphysik**

Richard Reindl

2004

Die aktuellste Version des Skriptes findet man unter

<http://www.stbit.de>

Das Werk steht unter einer Creative Commons

- Namensnennung
- Nicht-kommerziell
- Weitergabe unter gleichen Bedingungen 3.0 Unported Lizenz

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/deed.de>



8. Oktober 2013

# 1 Materiewellen

## 1.1 Elektronenbeugung

1927 untersuchten **Davisson** und **Germer** sowie unabhängig davon **P.G. Thomson** das Verhalten von Elektronen, die auf ein Kristallgitter treffen. Thomson wandte dabei das Debye-Scherrer-Verfahren an, wie wir in unserem Versuch:

Elektronen durchlaufen eine Beschleunigungsspannung  $U$  und treten dann durch eine polykristalline Grafitfolie. Die an der Folie gestreuten Elektronen treffen auf einen kugelförmigen Leuchtschirm (Radius:  $a = 14,0 \text{ cm}$ ), dessen Mittelpunkt in der Grafitfolie liegt. Auf dem Schirm beobachtet man zwei Beugungskreise, die zu den Netzebenenabständen  $d_1 = 1,23 \text{ \AA}$  und  $d_2 = 2,13 \text{ \AA}$  ge-

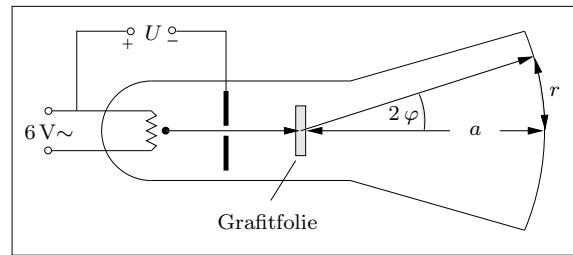


Abb.1.1.1 Versuch: Elektronenbeugung

hören. Die Radien dieser Kreise, auf dem kugelförmigen Schirm gemessen (Bogenlängen), seien  $r_1$  und  $r_2$ . Erstes Versuchsergebnis:

Elektronen zeigen Interferenzerscheinungen!!

Aus der Bragg'schen Beziehung

$$n \cdot \lambda = 2 d \sin \varphi \quad (1.1.1)$$

folgt mit  $2\varphi = \frac{r}{a}$  (wir beobachten in erster Ordnung, d.h.  $n = 1$ )

$$\lambda = 2 d \sin \frac{r}{2a} \quad (1.1.2)$$

Bei konstantem  $\lambda$  gehört zum größeren  $r$  das kleinere  $d$ , d.h.  $r_1 > r_2$ . Wir vergleichen die gemessenen  $\lambda$ -Werte mit der kinetischen Energie  $W_k$  und dem Impuls  $p$  der Elektronen:

$$W_k = \frac{m}{2} v^2 = e \cdot U \quad \implies \quad p = m \cdot v = \sqrt{2emU} \quad (1.1.3)$$

Das qualitative Versuchsergebnis

$$\text{größeres } U \quad \implies \quad \text{kleineres } r \quad \implies \quad \text{kleineres } \lambda$$

legt die Vermutung nahe, dass  $\lambda$  entweder zu  $W_k$  oder zu  $p$  proportional ist.

In der Tabelle auf der folgenden Seite sind die Messergebnisse für verschiedene Beschleunigungsspannungen zusammengestellt. Die  $\lambda$ -Werte für die beiden Radien  $r_1$  und  $r_2$  sollten gleich sein, wir wählen den Mittelwert  $\langle \lambda \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}$ .

Der letzten Zeile der Tabelle entnimmt man, dass

$$\lambda \cdot p = h = \text{konst.} \quad (1.1.4)$$

ist. Für die Konstante erhält man

$$h = \frac{6,70 + 6,63 + 6,63 + 6,69}{4} \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6,66 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.1.5)$$

## 1 Materiewellen

$U$	in	V	2000	3000	4000	5000
$r_1$	in	m	0,018	0,0145	0,0125	0,0115
$r_2$	in	m	0,032	0,026	0,0225	0,020
$\lambda_1$	in	$10^{-11}$ m	2,738	2,206	1,902	1,749
$\lambda_2$	in	$10^{-11}$ m	2,806	2,280	1,974	1,756
$\langle \lambda \rangle$	in	$10^{-11}$ m	2,772	2,243	1,938	1,753
$W_k$	in	$10^{-16}$ J	3,20	4,80	6,40	8,00
$p$	in	$10^{-23} \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$	2,416	2,959	3,416	3,820
$W_k \cdot \langle \lambda \rangle$	in	$10^{-26} \frac{\text{kg m}^3}{\text{s}^2}$	0,886	1,08	1,24	1,40
$p \cdot \langle \lambda \rangle$	in	$10^{-34} \frac{\text{kg m}^2}{\text{s}}$	6,70	6,63	6,63	6,69

Der genaue Wert für das **Plancksche Wirkungsquantum** oder die **Planckkonstante** ist

$$\boxed{h = 6,626\,075\,5 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 4,135\,669\,2 \cdot 10^{-21} \text{ MeV s}} \quad (1.1.6)$$

Weitere Versuche zeigen:

$$\boxed{\text{Jeder Körper mit dem Impuls } p \text{ zeigt Interferenzerscheinungen wie eine Welle mit der Wellenlänge } \lambda = \frac{h}{p}.} \quad (1.1.7)$$

Diese 1927 experimentell gefundene Tatsache wurde von **Louis de Broglie** schon 1924 theoretisch vorausgesagt. Mit der Abkürzung

$$\boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054\,572\,66 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 6,582\,122\,0 \cdot 10^{-22} \text{ MeV s}} \quad (1.1.8)$$

und der Wellenzahl

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.1.9)$$

folgt aus (1.1.4)

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar 2\pi k}{2\pi} = \hbar \cdot k \quad (1.1.10)$$

oder endgültig

$$\boxed{p = \frac{h}{\lambda} = \hbar \cdot k} \quad (1.1.11)$$

(de Broglie-Relation)

Mit der Gesamtenergie  $E$  lautet die Energie-Impuls-Relation für ein Teilchen der Masse  $m$

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 = p^2 c^2 + E_0^2 \quad (1.1.12)$$

oder

$$p^2 = \frac{1}{c^2} (E^2 - E_0^2) = \frac{1}{c^2} (E - E_0) (E + E_0) = \frac{1}{c^2} E_k \cdot (2E_0 + E_k) \quad (1.1.13)$$

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E_k \cdot (2E_0 + E_k)} \quad (1.1.14)$$

Für langsame Teilchen kann man  $E_k$  in der Summe gegen  $2E_0$  vernachlässigen und es gilt  $E_k \approx \frac{m}{2} v^2$ ; damit geht (1.1.14) in die klassische Formel über:

$$p \approx \frac{1}{c} \sqrt{2E_k E_0} \approx \frac{1}{c} \sqrt{m v^2 m c^2} = m v \quad (1.1.15)$$

Für die Wellenlänge eines Teilchens der kinetischen Energie  $E_k$  gilt dann

$$\boxed{\lambda = \frac{h c}{\sqrt{E_k \cdot (2E_0 + E_k)}}} \quad (1.1.16)$$

## 1.2 Die Wellenfunktion und ihre physikalische Bedeutung

Ein Doppelspaltversuch mit Elektronen bereitet wegen der Kleinheit der Wellenlängen ungeheure technische Schwierigkeiten. Gelöst wurden diese Schwierigkeiten 1961 von C. Jönsson an der Universität Tübingen, was eine weitere Bestätigung des Wellencharakters der Elektronen erbrachte. Durch das Auszählen der schwarzen Punkte auf dem Film kann die **Zählrate**

$$S = \frac{\text{Zahl der } e^-}{\text{Zeit}} \quad (1.2.1)$$

in Abhängigkeit vom Ort bestimmt werden. Die experimentell gefundene Zählrate entspricht genau der Intensitätsverteilung einer

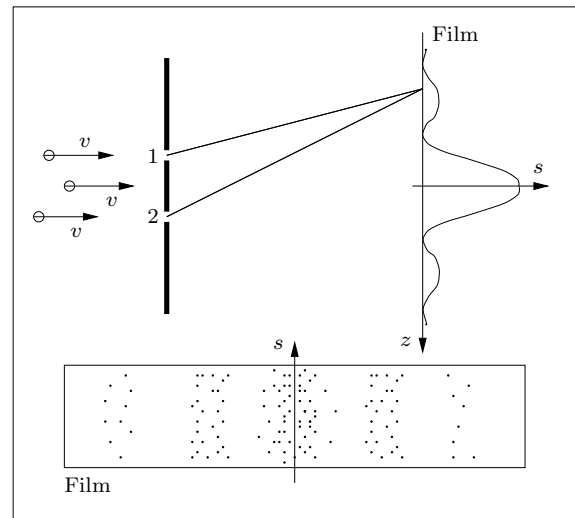


Abb.1.2.1 Doppelspalt mit  $e^-$

„klassischen“ Welle (z.B. Licht) mit der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (1.2.2)$$

Das Interferenzverhalten der Elektronen versucht man durch eine den Elektronen zugeordnete **Wellenfunktion**  $\psi(x, t)$  zu beschreiben. Da Elektronen im Allgemeinen „lokalisierbar“ sind, muss  $\psi(x, t)$  räumlich begrenzt sein. Dazu wird die Gleichung einer nach rechts fortschreitenden Welle ( $y = \sin(kx - \omega t)$ ) mit einer ortsabhängigen Amplitudenfunktion  $\varphi(x, t)$  multipliziert:

$$\psi(x, t) = \varphi(x, t) \cdot \sin(kx - \omega t) \quad (1.2.3)$$

(1.2.3) beschreibt ein sogenanntes **Wellenpaket** (siehe Abb. 1.2.2). Wenn das Beugungsbild beim Doppelspaltversuch durch Interferenz der Wellenpakete **verschiedener** Elektronen entstehen würde, dann müssten alle während der Kohärenzzeit  $\tau = \frac{\Delta x}{v}$  durch die Spalte tretenden Elektronen gleichphasig sein, da es sonst keine konstruktive Interferenz geben würde. Die Annahme der Gleichphasigkeit der Wellenfunktionen verschiedener Elektronen ist aber durch nichts zu begründen. Es lässt sich also folgende Hypothese aufstellen:

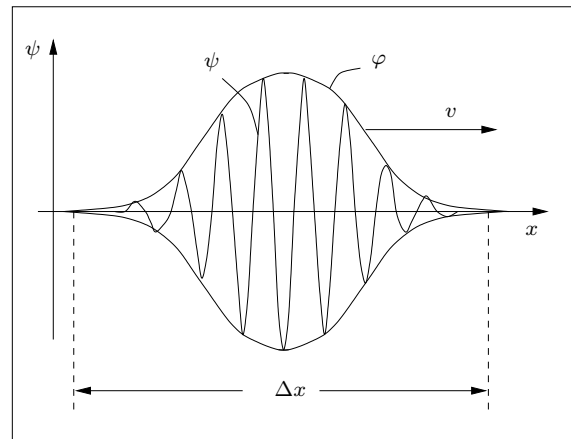


Abb.1.2.2 Wellenpaket

$$\text{Das Wellenpaket eines Elektrons teilt sich in zwei Teilpakete auf, die miteinander interferieren.} \quad (1.2.4)$$

Die Hypothese (1.2.4) lässt sich folgendermaßen überprüfen:

Ein sehr intensitätsarmer Elektronenstrahl wird durch den Doppelspalt geschickt. Die Intensität sei so gering, dass praktisch nie mehrere Elektronen gleichzeitig durch die Spalte treten. Mit  $S_1$  bzw.  $S_2$  bezeichnen wir die Zählraten, wenn **nur** Spalt ① bzw. **nur** Spalt ② geöffnet ist,  $S_{12}$  sei die Zählrate, wenn beide Spalte gleichzeitig geöffnet sind. Wenn unsere Hypothese (1.2.4)

falsch wäre, d.h. wenn das ganze Wellenpaket **eines** Elektrons nur durch **einen** Spalt treten

würde, dann könnte es bei unserem intensitätsarmen Strahl keine Interferenzen geben, da dann jedes **einzeln** durch **einen** Spalt gehende Elektron weder mit anderen Elektronen noch mit sich selbst interferieren könnte. Damit würden sich die Beugungsbilder der Einzelspalte überlagern zu  $S_{12} = S_1 + S_2$  (siehe Abb. 1.2.3).

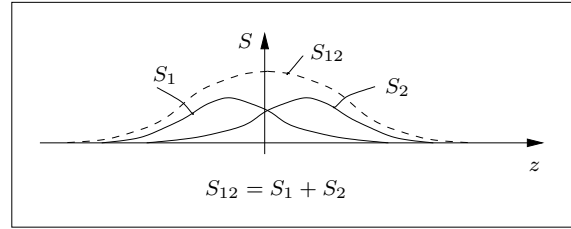


Abb.1.2.3 Nur jeweils ein Spalt offen

Das Experiment liefert aber auch bei einer sehr geringen Intensität des einfallenden Elektronenstrahls das gleiche Interferenzbild wie bei einer starken Intensität (siehe Abb. 1.2.4). Damit scheint unsere Hypothese (1.2.4) experimentell abgesichert zu sein. Zur Kontrolle wird noch folgender Versuch ausgeführt:

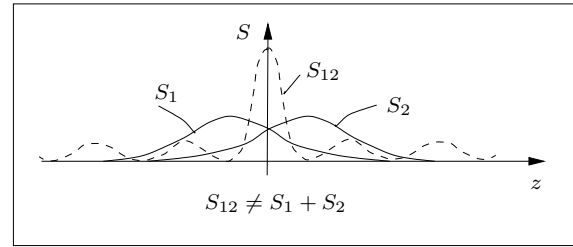


Abb.1.2.4 Beide Spalte offen

Direkt hinter den Einzelspalten werden Zähler angebracht, die einzelne Elektronen registrieren können. Entgegen unserer Hypothese (1.2.4) wird ein Elektron beim Durchgang durch den Doppelspalt immer nur von **einem** Zähler registriert!

Die volle Energie eines Elektrons geht nur durch **einen** Spalt!

 (1.2.5)

Um die einander widersprechenden, aber doch experimentell abgesicherten Tatsachen (1.2.4) und (1.2.5) miteinander in Einklang zu bringen, wurden die höchsten philosophischen Purzelbäume geschlagen. Der populärste dieser Purzelbäume, der auch heute noch durch viele Physikbücher geistert, ist der sogenannte „**Dualismus Welle-Teilchen**“. Dieser Dualismus besagt Folgendes:

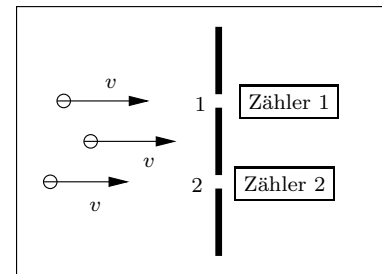


Abb.1.2.5 Beide Spalte offen

Elektronen und andere Mikroobjekte sind Gebilde, die in manchen Versuchen Teilchen- und in anderen Versuchen Wellencharakter zeigen (**Wellen-Teilchen-Dualismus**).

 (1.2.6)

Um diesen logisch unbefriedigenden Dualismus aus der Welt zu schaffen, müssen wir uns überlegen, welche Aufgabe einer physikalischen Theorie überhaupt zukommt:

Eine physikalische Theorie hat die Aufgabe, bei einer gegebenen Versuchsanordnung die **experimentell messbaren** physikalischen Größen vorherzusagen.

 (1.2.7)

Betrachten wir unseren Doppelspaltversuch:

Messbar sind nur die Auftrefforte der Elektronen in der Beobachtungsebene und diese Auftrefforte sind sogar statistisch verteilt. Wirklich messbar ist also nur die **Auftreffwahrscheinlichkeit** eines Elektrons an einem bestimmten Ort. Die Theorie hat die Aufgabe, diese Auftreffwahrscheinlichkeit zu berechnen, nichts sonst!

Aussagen wie „Das Elektron ist ein Teilchen“, „Das Elektron ist eine Welle“ oder „Das Elektron ist würfelförmig“ gehören in das Reich der Spekulationen, solange sie nicht direkt experimentell zugänglich sind. Experimentell zugänglich sind aber nur die Wirkungen der Elektronen auf geeignete Messapparaturen und nur diese Wirkungen können durch eine sinnvolle physikalische Theorie beschrieben werden.

**Literatur:** The Feynman Lectures on Physics, Bd. 3  
Berkeley Physics Course, Bd. 4

Kommen wir jetzt zu der Frage, wie man die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron an einem bestimmten Ort zu finden, berechnen kann.

Die Wahrscheinlichkeit  $dP$ , das Elektron im Intervall  $[x, x + dx]$  anzutreffen, ist sicher proportional zu  $dx$ , d.h.

$$dP = w(x, t) dx \tag{1.2.8}$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $w(x, t)$ . Die zentrale Frage ist jetzt, wie  $w(x, t)$  mit der Wellenfunktion  $\psi(x, t) = \varphi(x, t) \cdot \sin(kx - \omega t)$  zusammenhängt. Da  $w(x, t) \geq 0$  gilt und  $\psi(x, t)$  oszilliert und somit auch negative Werte annimmt, kann  $\psi$  nicht gleich  $w$  sein.

Diese Schwierigkeit wird überwunden, wenn man den Betrag

$$w(x, t) = |\psi| = |\varphi| \cdot |\sin(kx - \omega t)| \tag{1.2.9}$$

oder das Quadrat

$$w(x, t) = \psi^2 = \varphi^2 \cdot \sin^2(kx - \omega t) \tag{1.2.10}$$

der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert. (1.2.9) hat den Nachteil, dass viele nichtdifferenzierbare Stellen (Spitzen) vorhanden sind. Auch (1.2.10) hat noch einen Nachteil: Innerhalb des Wellenpakets der Breite  $\Delta x$  hat  $w(x, t)$  noch viele Nullstellen, was den experimentellen Tatsachen widerspricht (ein Elektron ist nicht „zerhackt“). Die ideale Form von

$w(x, t)$  wäre die von Abb.1.2.8. Die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  selbst muss aber den oszillierenden Term  $\sin(kx - \omega t)$  enthalten, um die experimentell beobachteten Interferenzen richtig zu beschreiben. Diese Schwierigkeit wird elegant überwunden, wenn man statt  $\sin(kx - \omega t)$  den komplexen Term

$$e^{i(kx - \omega t)} = \cos(kx - \omega t) + i \cdot \sin(kx - \omega t) \tag{1.2.11}$$

verwendet und die Wahrscheinlichkeitsdichte als das **Quadrat des Betrages** von  $\psi(x, t)$  definiert (**Max Born, 1926**):

$$w(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t) \cdot \psi^*(x, t) \tag{1.2.12}$$

mit

$$\psi(x, t) = \varphi(x, t) \cdot e^{i(kx - \omega t)} \tag{1.2.13}$$

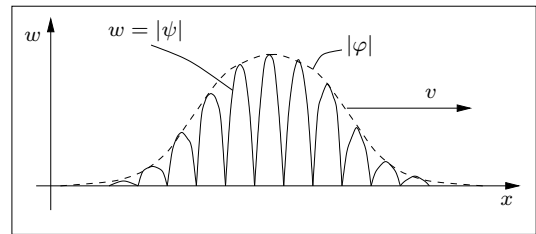


Abb.1.2.6  $w(x, t) = |\psi(x, t)|$

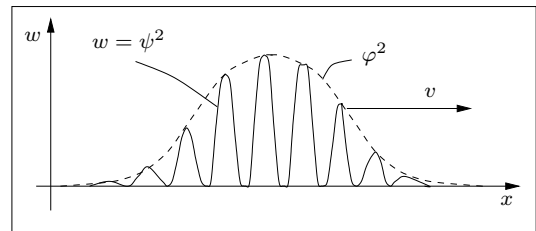


Abb.1.2.7  $w(x, t) = \psi(x, t)^2$

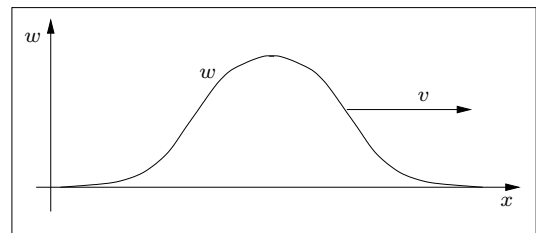


Abb.1.2.8 Das ideale  $w(x, t)$

## 1 Materiewellen

Wegen  $|e^{i\alpha}|^2 = 1$  gilt

$$\boxed{w(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x, t)|^2} \quad (1.2.14)$$

Die Betragsstriche bei  $\varphi$  lassen wir stehen, damit im Bedarfsfall  $\varphi$  auch komplex gewählt werden kann. Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zur Zeit  $t$  im Intervall  $[a, b]$  anzutreffen, ist

$$\boxed{P(a, b) = \int_a^b w(x, t) dx = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx} \quad (1.2.15)$$

Da sich das Teilchen irgendwo zwischen  $-\infty$  und  $+\infty$  befinden muss, ist

$$P(-\infty, +\infty) = 1 \quad (1.2.16)$$

Es gilt also die **Normierungsbedingung**

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} w(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1} \quad (1.2.17)$$

Für räumliche Probleme muss  $x$  in obigen Gleichungen durch den Ortsvektor  $\vec{r}$  und  $dx$  durch das Volumenelement  $dV$  ersetzt werden:

$$\boxed{P(V) = \int_V w(\vec{r}, t) dV = \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV} \quad (1.2.18)$$

ist somit die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Raumbereich  $V$  anzutreffen. Die Normierungsbedingung lautet dann

$$\boxed{\int_{\text{ganzer Raum}} w(\vec{r}, t) dV = \int_{\text{ganzer Raum}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1} \quad (1.2.19)$$

Damit die Wellenfunktion zur Beschreibung von Interferenzen geeignet ist, muss das **Superpositionsprinzip** gelten:

Sind die  $\psi_\nu$  gültige Wellenfunktionen eines physikalischen Systems, dann ist auch

$$\psi = \sum_{\nu=1}^n a_\nu \psi_\nu \quad (1.2.20)$$

eine Wellenfunktion des Systems. Die  $a_\nu$  müssen dabei so gewählt werden, dass  $\psi$  wieder normiert ist.

Wellenfunktionen können also, mit geeigneten Gewichtungsfaktoren  $a_\nu$ , zu neuen Wellenfunktionen addiert werden, **nicht** aber die Wahrscheinlichkeitsdichten:

$$w = |\psi|^2 = \left| \sum_{\nu=1}^n a_\nu \psi_\nu \right|^2 \neq \sum_{\nu=1}^n |a_\nu|^2 |\psi_\nu|^2 = \sum_{\nu=1}^n |a_\nu|^2 w_\nu \quad (1.2.21)$$



### 1.3 Wellenpakete als Überlagerung ebener Wellen

Das Ziel der **Quantenmechanik** (QM) ist es, eine möglichst einfache Differentialgleichung

$$F(\psi, \dot{\psi}, \ddot{\psi}, \dots, \psi', \psi'', \dots) = 0 \quad (1.3.1)$$

für die Wellenfunktion  $\psi$  zu finden, die das Verhalten der Mikroobjekte richtig beschreibt. Wegen des Superpositionsprinzips (siehe (1.2.20)) muss die Summe zweier Lösungen von (1.3.1) wieder eine Lösung ergeben. Das ist nur möglich, wenn (1.3.1) eine **lineare** Differentialgleichung ist, d.h. wenn  $\psi$  und die Ableitungen von  $\psi$  nur linear in die Gleichung eingehen:

$$F(\psi, \dot{\psi}, \dots) = a\psi + b_1\dot{\psi} + b_2\ddot{\psi} + \dots + c_1\psi' + c_2\psi'' + \dots = 0 \quad (1.3.2)$$

Als weitere Forderung stellen wir an (1.3.1), dass die einfachste Wellenfunktion, nämlich die einer **ebenen Welle**

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.3.3)$$

eine Lösung ist. Wegen der Linearität von (1.3.1) ist damit jede Überlagerung ebener Wellen

$$\psi(x, t) = \sum_{\nu=1}^n A_{\nu} \cdot e^{i(k_{\nu}x - \omega_{\nu}t)} \quad (1.3.4)$$

ebenfalls eine Lösung von (1.3.1). Es lässt sich exakt zeigen, dass auch die Überlagerung unendlich vieler ebener Wellen, deren Wellenzahlen  $k$  kontinuierlich verteilt sind, eine Lösung von (1.3.1) ist. Aus den diskreten Amplitudenwerten  $A_{\nu}$  in (1.3.4) wird dann die Funktion  $A(k)$  und das Summenzeichen geht in ein Integral über:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (1.3.5)$$

wobei  $\omega$  eine Funktion von  $k$  ist:

$$\omega = \omega(k) \quad (1.3.6)$$

In der sogenannten **Dispersionsrelation** (1.3.6) steckt die konkrete Physik der betrachteten Welle. Für elektromagnetische Wellen im Vakuum mit der Wellenlänge  $\lambda$  und der Frequenz  $f$  gilt z.B.

$$\lambda \cdot f = \frac{2\pi}{k} \cdot \frac{\omega}{2\pi} = c \quad \Longrightarrow \quad \omega = \omega(k) = c \cdot k \quad \text{mit konstantem } c \quad (1.3.7)$$

Bei Gültigkeit von (1.3.7) sagt man, es herrscht keine **Dispersion**. Alle Teilwellen eines Wellenpakets breiten sich mit der gleichen Geschwindigkeit aus, die Form des Wellenpakets bleibt also erhalten:

$$w(x, t) = w(x - ct, 0) \quad (1.3.8)$$

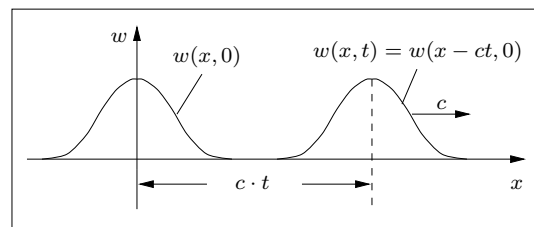


Abb.1.3.1 Keine Dispersion

## 1 Materiewellen

Leite zur Übung (1.3.8) aus (1.3.5) und (1.3.7) her!

In Materie ist die Lichtgeschwindigkeit von der Wellenlänge bzw. der Frequenz abhängig, d.h. die Teilwellen eines Wellenpakets (1.3.4) oder (1.3.5) laufen mit verschiedenen Geschwindigkeiten. Damit ändert sich die Form eines Wellenpakets mit der Zeit, das Wellenpaket **zerfließt**, es herrscht Dispersion.

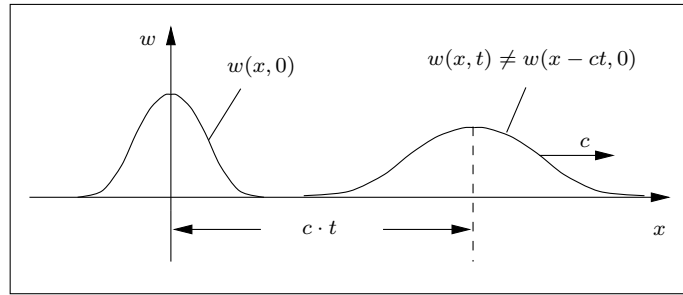


Abb.1.3.2 Mit Dispersion

Die Dispersionsrelation und das Zerfließen von Materiewellen behandeln wir im nächsten Kapitel.

Die **Dirac'sche Deltafunktion** ist durch folgende Eigenschaften definiert:

$$\delta(x) = 0 \quad \text{für } x \neq 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \cdot f(x) dx = f(x_0) \quad (1.3.9)$$

Mit der Deltafunktion kann die Überlagerung endlich vieler Wellen (1.3.4) auch als Integral (1.3.5) geschrieben werden, wenn man folgendes  $A(k)$  wählt und  $\omega_\nu = \omega(k_\nu)$  beachtet:

$$A(k) = \sum_{\nu=1}^n A_\nu \delta(k - k_\nu) \quad (1.3.10)$$

Eine Grenzwertdarstellung der Deltafunktion behandeln wir in den Aufgaben.

Als einfachstes Beispiel betrachten wir zunächst die Überlagerung von zwei ebenen Wellen mit den Amplituden  $A_1 = A_2 = 1$ :

$$\psi(x, t) = e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + e^{i(k_2 x - \omega_2 t)} \quad (1.3.11)$$

In den Aufgaben zu unseren mathematischen Hilfsmitteln haben wir die Formel

$$e^{ia} + e^{ib} = 2 \cdot \cos \frac{a-b}{2} \cdot e^{i \frac{a+b}{2}} \quad (1.3.12)$$

bewiesen. Damit folgt

$$\psi(x, t) = 2 \cdot \cos \frac{\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t}{2} \cdot e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (1.3.13)$$

mit

$$\Delta k = k_2 - k_1, \quad \Delta \omega = \omega_2 - \omega_1, \quad k_0 = \frac{k_1 + k_2}{2} \quad \text{und} \quad \omega_0 = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \quad (1.3.14)$$

In Abb.1.3.3 sind die Grafen des Realteils

$$\text{Re}(\psi(x, t)) = 2 \cdot \cos \frac{\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t}{2} \cdot \cos(k_0 x - \omega_0 t) \quad (1.3.15)$$

des Imaginärteils

$$\text{Im}(\psi(x, t)) = 2 \cdot \cos \frac{\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t}{2} \cdot \sin(k_0 x - \omega_0 t) \quad (1.3.16)$$

und der Einhüllenden  $\pm\varphi(x, t)$  mit

$$\varphi(x, t) = 2 \cdot \cos \frac{\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t}{2} \quad (1.3.17)$$

für  $k_1 = 3$ ,  $k_2 = 4$  und  $t = 0$  dargestellt, der rechte Teil der Abbildung zeigt die (in diesem Fall nicht normierbare) Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(x, t) = 4 \cdot \cos^2 \frac{\Delta k \cdot x - \Delta \omega \cdot t}{2} \quad (1.3.18)$$

ebenfalls zur Zeit Null. Die Breite  $\Delta x$  einer Schwebungsgruppe ist die halbe Wellenlänge der Einhüllenden, d.h.

$$\Delta x = \frac{1}{2} \cdot \frac{2\pi}{\frac{\Delta k}{2}} = \frac{2\pi}{\Delta k} \quad (1.3.19)$$

oder

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi} \quad (1.3.20)$$

Die Wellenlänge der eigentlichen Welle ist

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_0} \quad (1.3.21)$$

und damit ist die Zahl  $n$  von Wellenzügen innerhalb einer Schwebungsgruppe

$$n = \frac{\Delta x}{\lambda} = \frac{k_0}{\Delta k} \quad (1.3.22)$$

Je kleiner  $\Delta k$  ist, umso ausgeprägter ist die Schwebung, d.h. umso mehr Wellenzüge sind in einer Schwebungsgruppe. Die Welle selbst breitet sich mit der **Phasengeschwindigkeit**

$$\boxed{v_p = \frac{\omega_0}{k_0}} \quad (1.3.23)$$

aus, die Geschwindigkeit einer Schwebungsgruppe oder auch von  $w(x, t)$  ist die **Gruppengeschwindigkeit**

$$\boxed{v_g = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}} \quad (1.3.24)$$

Für eine „ordentliche Schwebung“ (viele Wellenzüge pro Gruppe) ist  $\Delta k$  klein, d.h.  $\omega(k)$  kann im Intervall  $[k_1, k_2]$  linear angenähert werden. Weil  $k_0$  wegen (1.3.14) der Mittelpunkt dieses Intervalls ist, gilt

$$\boxed{v_g \approx \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}} \quad (1.3.25)$$

# 1 Materiewellen

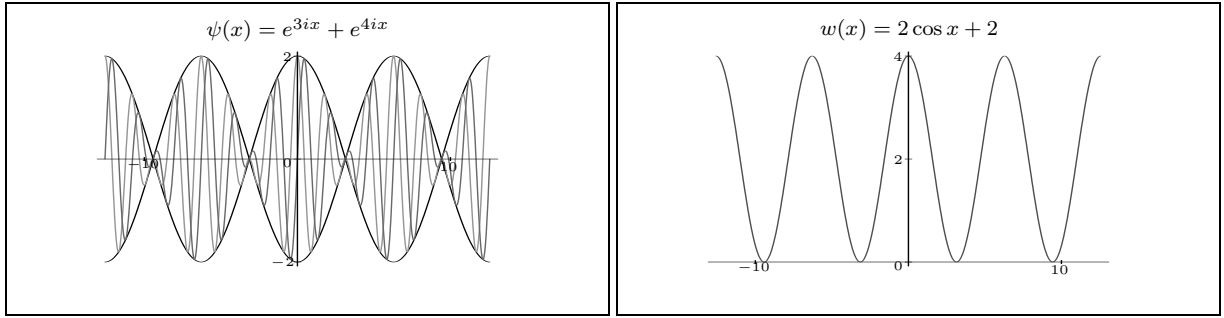


Abb.1.3.3

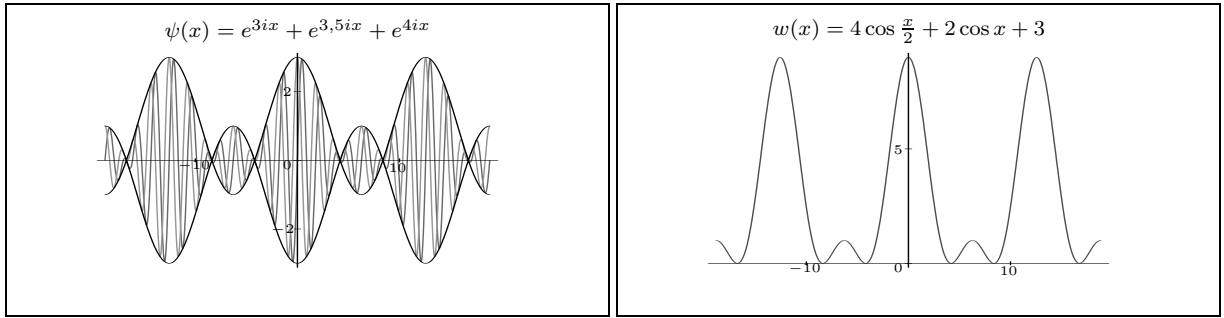


Abb.1.3.4

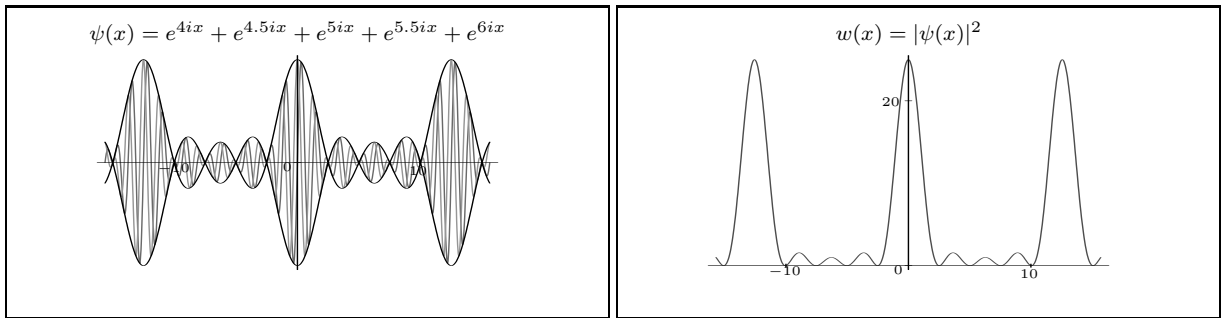


Abb.1.3.5

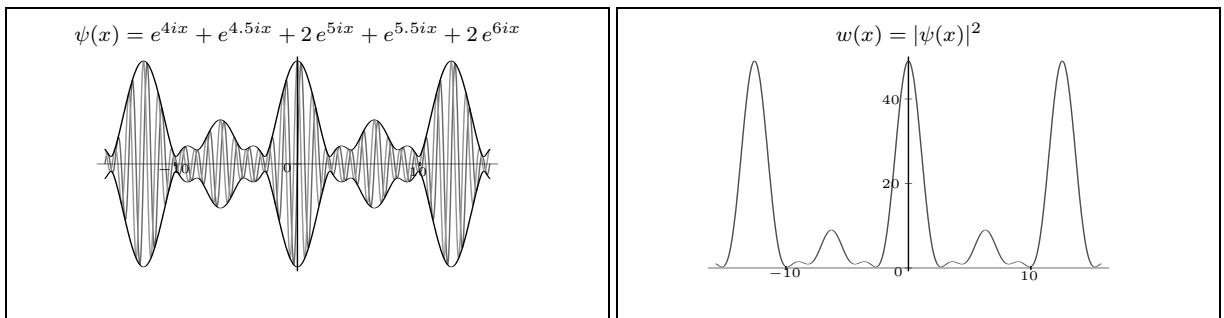


Abb.1.3.6

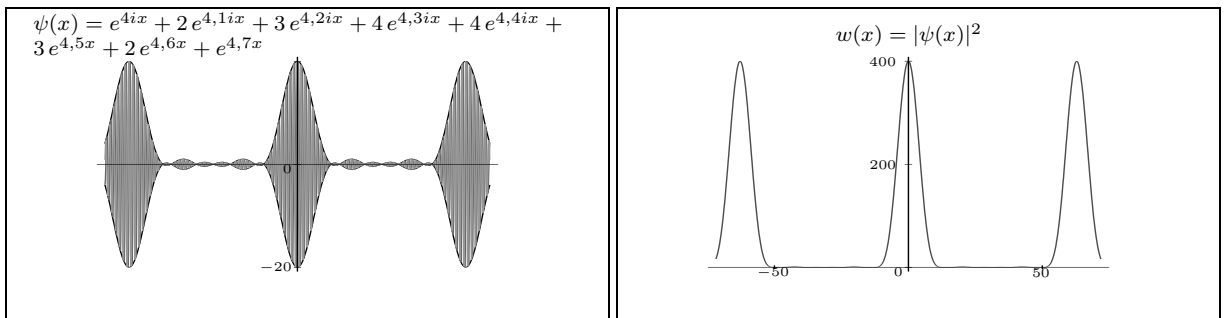


Abb.1.3.7

Den Abbildungen Abb.1.3.4 bis Abb.1.3.7 (mit MAPLE erstellt) entnimmt man, dass immer mehr kleine Schwebungsgruppen zwischen zwei großen Gruppen auftreten, wenn die Zahl der überlagerten Wellen zunimmt oder anders ausgedrückt: Je mehr Wellen überlagert werden, umso weiter rücken die Hauptschwebungsgruppen auseinander. Wir wollen jetzt untersuchen, wie die Überlagerung von unendlich vielen Wellen gleicher Amplitude  $A$  mit Wellenzahlen aus dem Intervall  $[k_1, k_2]$  aussieht, wobei wir uns auf die Zeit Null beschränken. Mit der Wellenzahlverteilung

$$A(k) = \begin{cases} A & \text{für } k_1 \leq k \leq k_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.3.26)$$

folgt aus (1.3.5)

$$\psi(x, 0) = A \cdot \int_{k_1}^{k_2} e^{ikx} dk = \frac{A}{ix} \cdot (e^{ik_2x} - e^{ik_1x}) \quad (1.3.27)$$

Mit der Formel

$$e^{ia} - e^{ib} = 2i \cdot \sin \frac{a-b}{2} \cdot e^{i \cdot \frac{a+b}{2}} \quad (1.3.28)$$

(Aufgaben zu den mathematischen Hilfsmitteln) folgt

$$\psi(x, 0) = \frac{2A}{x} \cdot \sin \frac{\Delta k \cdot x}{2} \cdot e^{ik_0x} \quad (1.3.29)$$

mit

$$\Delta k = k_2 - k_1 \quad \text{und} \quad k_0 = \frac{k_1 + k_2}{2} \quad (1.3.30)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte zur Zeit Null ist dann

$$w(x, 0) = \frac{4A^2}{x^2} \cdot \sin^2 \frac{\Delta k \cdot x}{2} \quad (1.3.31)$$

Als Breite  $\Delta x$  des Paketes definieren wir den Abstand der beiden Nullstellen des Hauptpaketes:

$$\Delta x = 2 \cdot \frac{2\pi}{\Delta k} \quad (1.3.32)$$

woraus

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta k = 4\pi} \quad (1.3.33)$$

folgt. Beispiele für die Grafen von  $\text{Re}(\psi(x, 0))$ ,  $\text{Im}(\psi(x, 0))$  und  $w(x, 0)$  findet man in Abb.1.3.8 und Abb.1.3.9.  $w(x, 0)$  ist nicht normiert, da es uns nur um die Form des Wellenpaketes geht. Wir kommen der idealen Form eines Wellenpaketes schon näher, aber es stört noch das Auftreten der immer kleiner werdenden Nebengruppen. Diese verdanken ihr Vorhandensein den scharfen Kanten in der Wellenzahlverteilung. Daher betrachten wir als nächstes Beispiel eine Gauß'sche Wellenzahlverteilung ohne Ecken und Kanten:

$$A(k) = A_0 \cdot e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \quad (1.3.34)$$

Die Überlagerung aller Teilwellen ergibt dann die Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = A_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \cdot e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (1.3.35)$$

# 1 Materiewellen

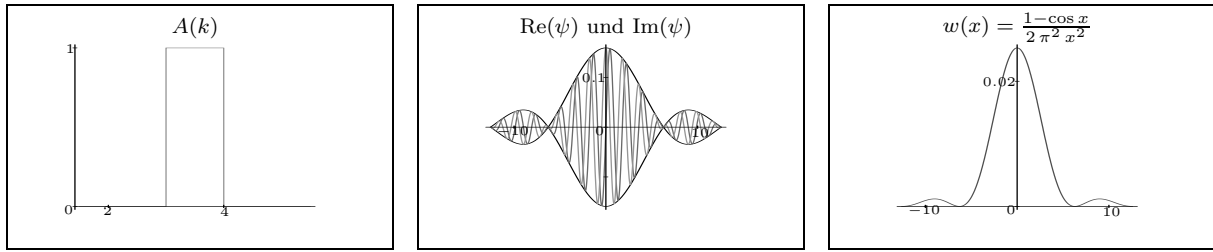


Abb.1.3.8

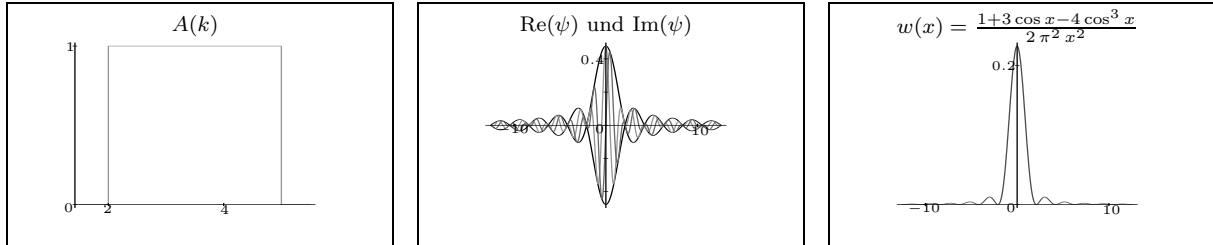


Abb.1.3.9

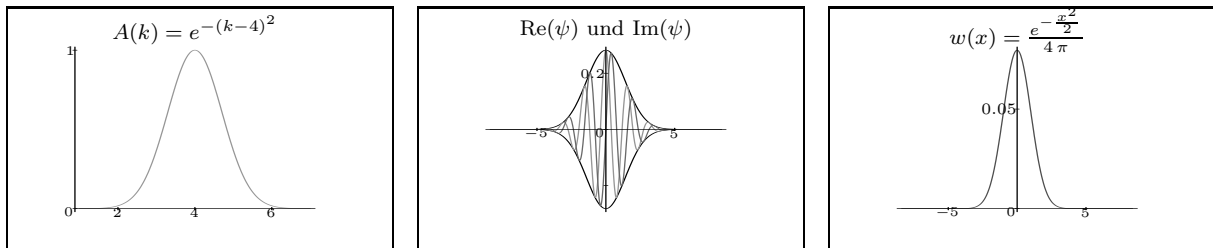


Abb.1.3.10

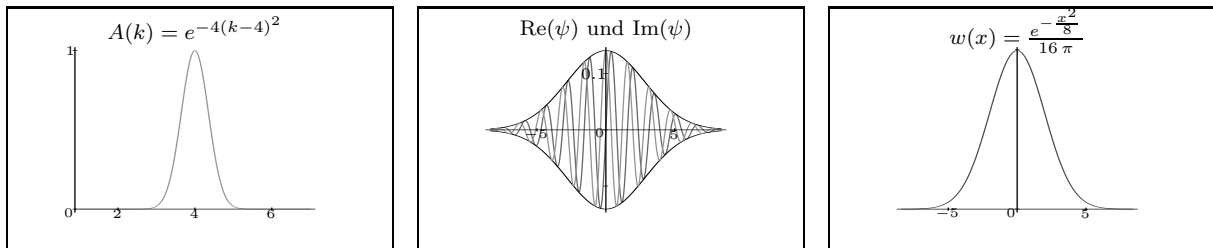


Abb.1.3.11

Für  $t = 0$  erhält man

$$\psi(x, 0) = A_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \cdot e^{i k x} dk \quad (1.3.36)$$

Ein Integral der Form

$$F(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} A(u) \cdot e^{i u x} du \quad (1.3.37)$$

nennt man die **inverse Fouriertransformierte** von  $A(u)$ . In einer mathematischen Formelsammlung (allerdings nicht in unserer Schulformelsammlung) findet man unter dem Kapitel „Fouriertransformation“

$$A(u) = e^{-\frac{u^2}{a^2}} \implies F(x) = \frac{|a|}{2\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{a^2}{4} x^2} \quad (1.3.38)$$

## 1 Materiewellen

Damit folgt aus (1.3.36) mit der Substitution  $u = k - k_0$  ( $du = dk$ )

$$\begin{aligned}
 \psi(x, 0) &= A_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{a^2}} \cdot e^{iux+ik_0x} dk = \\
 &= A_0 \cdot e^{ik_0x} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{a^2}} \cdot e^{iux} du = \\
 &= A_0 \cdot |a| \cdot \sqrt{\pi} \cdot e^{-\frac{a^2}{4}x^2} \cdot e^{ik_0x}
 \end{aligned} \tag{1.3.39}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte unseres Wellenpaketes ist dann

$$\boxed{w(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2 = A_0^2 a^2 \pi \cdot e^{-\frac{a^2}{2}x^2}} \tag{1.3.40}$$

d.h. wenn  $A(k)$  eine Gauß'sche Funktion ist, dann ist es auch  $w(x)$ . Als Breite einer Gaußfunktion definiert man üblicherweise die Breite in der  $\frac{1}{e}$ -fachen Höhe des Maximums:

$$A(k) = \frac{A(0)}{e} \quad \Longrightarrow \quad k = k_0 \pm |a| \tag{1.3.41}$$

$$w(x) = \frac{w(0)}{e} \quad \Longrightarrow \quad x = \frac{\sqrt{2}}{|a|} \tag{1.3.42}$$

$$\Delta k = 2|a| \quad \text{und} \quad \Delta x = \frac{2\sqrt{2}}{|a|} \tag{1.3.43}$$

Für das Produkt der Breiten erhalten wir

$$\boxed{\Delta k \cdot \Delta x = 4 \cdot \sqrt{2}} \tag{1.3.44}$$

Das Integral (1.3.35) kann für  $t \neq 0$  nur ausgewertet werden, wenn die Funktion  $\omega(k)$  bekannt ist. Wenn  $\Delta k$  klein ist, dann kann  $\omega(k)$  in dem Bereich, in dem  $A(k)$  wesentlich von Null verschieden ist, linear angenähert werden:

$$\omega(k) = \omega_0 + v_g(k - k_0) \tag{1.3.45}$$

mit  $\omega_0 = \omega(k_0)$  und

$$v_g = \omega'(k_0) = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \tag{1.3.46}$$

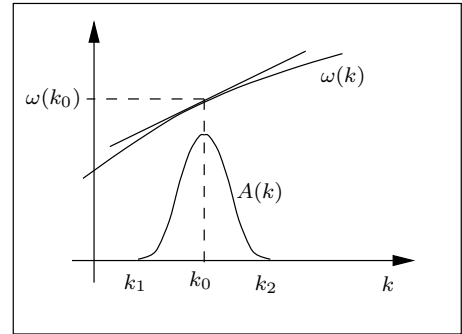


Abb.1.3.12 Lineare Näherung

Damit berechnet sich die Wellenfunktion (1.3.35) zu

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &= A_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \cdot e^{i(kx-\omega t)} dk = \\
 &= A_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \cdot e^{i(kx-\omega_0 t - v_g k t + v_g k_0 t)} dk = \\
 &= A_0 e^{i(k_0 v_g - \omega_0) t} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \cdot e^{i k(x - v_g t)} dk
 \end{aligned} \tag{1.3.47}$$

## 1 Materiewellen

Mit der Substitution  $u = k - k_0$  gilt  $du = dk$  und somit

$$\begin{aligned}
 \psi(x, t) &= A_0 e^{i(k_0 v_g - \omega_0) t} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{a^2}} \cdot e^{i(u+k_0)(x-v_g t)} du = \\
 &= A_0 e^{i(k_0 v_g - \omega_0) t} \cdot e^{i k_0 (x - v_g t)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{a^2}} \cdot e^{i u (x - v_g t)} du = \\
 &= A_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{a^2}} \cdot e^{i u (x - v_g t)} du
 \end{aligned} \tag{1.3.48}$$

Mit (1.3.37) und (1.3.38) folgt dann

$$\psi(x, t) = 2\pi \cdot A_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \cdot \frac{|a|}{2\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{a^2}{4}(x-v_g t)^2} \tag{1.3.49}$$

oder endgültig

$$\psi(x, t) = A_0 \cdot |a| \sqrt{\pi} \cdot e^{-\frac{a^2}{4}(x-v_g t)^2} \cdot e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \tag{1.3.50}$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(x, t) = A_0^2 \cdot a^2 \pi \cdot e^{-\frac{a^2}{2}(x-v_g t)^2} \tag{1.3.51}$$

(1.3.50) und (1.3.51) sind noch nicht normiert. Mit der Integralformel

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-b^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{|b|} \tag{1.3.52}$$

folgt aus (1.3.51)

$$\begin{aligned}
 N &:= \int_{-\infty}^{\infty} w(x, 0) dx = A_0^2 \cdot a^2 \pi \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{2} x^2} dx = \\
 &= A_0^2 \cdot a^2 \pi \cdot \frac{\sqrt{2\pi}}{|a|} = A_0^2 \cdot |a| \pi^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{2}
 \end{aligned} \tag{1.3.53}$$

Division von  $w$  durch  $N$  und von  $\psi$  durch  $\sqrt{N}$  liefert endgültig

$$\boxed{\psi(x, t) = \sqrt{\frac{|a|}{\sqrt{2\pi}}} \cdot e^{-\frac{a^2}{4}(x-v_g t)^2} \cdot e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}} \tag{1.3.54}$$

und

$$\boxed{w(x, t) = \frac{|a|}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{a^2}{2}(x-v_g t)^2} = w(x - v_g t, 0)} \tag{1.3.55}$$

Die Einhüllende von  $\psi$  und die Wahrscheinlichkeitsdichte  $w$  behalten also ihre Form und bewegen sich mit der Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  in Richtung der positiven  $x$ -Achse. Wenn wir statt der linearen die quadratische Näherung für  $\omega(k)$  verwendet hätten, würde auch die Formänderung des Wellenpakets (Zerfließen) richtig beschrieben.



## 1.4 Teilchen als Wellenpakete

In diesem Kapitel wollen wir versuchen, die Bewegung eines wechselwirkungsfreien materiellen Teilchens (z.B. eines Elektrons) quantenmechanisch richtig zu beschreiben. Das Teilchen habe den klassischen (d.h. nicht quantenmechanischen) Impuls  $p_0$  und die Masse  $m$ . Unsere bisherige Modellvorstellung sieht folgendermaßen aus:

- Dem Teilchen ist eine Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  zugeordnet, die als Überlagerung ebener Wellen geschrieben werden kann (Wellenpaket):

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (1.4.1)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens im Intervall  $[x_1, x_2]$  ist

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} w(x, t) dx \quad \text{mit} \quad w(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (1.4.2)$$

- Die Kreisfrequenz  $\omega$  der Wellenfunktion ist eine Funktion der Wellenzahl  $k$ , d.h.  $\omega = \omega(k)$  (Dispersionsrelation).
- Die klassische Geschwindigkeit  $v_0$  des Teilchens ist gleich der Gruppengeschwindigkeit des Wellenpakets;

$$v_0 = \frac{p_0}{m} = v_g = \omega'(k_0) = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (1.4.3)$$

$k_0$  entspricht dabei dem Maximum der Wellenzahlverteilung  $A(k)$ .

- Es gilt die de Broglie-Relation

$$p_0 = \hbar k_0 = \frac{h}{\lambda_0} \quad (1.4.4)$$

Was wir noch nicht kennen, ist die Gleichung der Funktion  $\omega(k)$ . Zu ihrer Berechnung verwenden wir (1.4.3) und (1.4.4):

$$v_0 = \omega'(k_0) = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar}{m} \cdot k_0 \quad (1.4.5)$$

Da diese Beziehung für jedes  $k_0$  gelten muss, folgt

$$\omega'(k) = \frac{\hbar}{m} \cdot k \quad (1.4.6)$$

und damit

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} + C \quad (1.4.7)$$

Die kinetische Energie des Teilchens ist

$$W = \frac{m}{2} v_0^2 = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \stackrel{(1.4.7)}{=} \hbar \omega(k_0) - \hbar C \quad (1.4.8)$$

Da  $\omega \geq 0$  gilt, ist die Wertemenge von  $W$  nach (1.4.8) gleich  $[-\hbar C, +\infty]$ . Da die tatsächliche Wertemenge von  $W$   $[0, +\infty]$  ist, muss  $C = 0$  sein. Die Dispersionsrelation für ein wechselwirkungsfreies, nichtrelativistisches Teilchen lautet also

$$\boxed{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}} \quad (1.4.9)$$

Aus (1.4.8) folgt dann die **Planck-Relation**

$$\boxed{W = \hbar \omega(k_0) = \hbar \omega_0 = h f_0} \quad (1.4.10)$$

Für ein relativistisches Teilchen beginnen wir mit der Energie-Impuls-Relation, wobei  $E$  die relativistische Gesamtenergie des Teilchens bezeichnet:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 = \hbar^2 k^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (1.4.11)$$

Differenzieren nach  $\omega$  ergibt mit

$$\frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} = \frac{1}{v} \quad (1.4.12)$$

und  $E = \gamma m c^2$ ,  $p = \gamma m v$ ,  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$  unter Verwendung der Kettenregel

$$2E \frac{dE}{d\omega} = 2\hbar^2 c^2 k \cdot \frac{dk}{d\omega} = 2\hbar^2 c^2 k \cdot \frac{1}{v} \quad (1.4.13)$$

$$2\gamma m c^2 \frac{dE}{d\omega} = 2\hbar^2 c^2 k \cdot \frac{1}{v} \quad (1.4.14)$$

$$\frac{dE}{d\omega} = \frac{\hbar^2 k}{\gamma m v} = \frac{\hbar p}{p} = \hbar \quad (1.4.15)$$

$$E = \hbar \omega + C \quad (1.4.16)$$

Setzt man (1.4.16) in (1.4.11) ein, dann erhält man

$$\left(\omega + \frac{C}{\hbar}\right)^2 = k^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \quad (1.4.17)$$

Zur Probe differenzieren wir (1.4.17) nach  $k$ :

$$2 \left(\omega + \frac{C}{\hbar}\right) \cdot \frac{d\omega}{dk} = 2k c^2 \quad (1.4.18)$$

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{k c^2}{\omega + \frac{C}{\hbar}} = \frac{\hbar k c^2}{\hbar \omega + C} = \frac{p c^2}{E} = \frac{\gamma m v c^2}{\gamma m c^2} = v \quad (1.4.19)$$

Die Beziehung  $v = \frac{d\omega}{dk}$  gilt also unabhängig von der Wahl der Konstanten  $C$ . Wir wählen natürlich den einfachsten Wert  $C = 0$ . Damit gilt auch im relativistischen Fall die Planck-Relation

$$\boxed{E = \hbar \omega} \quad (1.4.20)$$

und die Dispersionsrelation (1.4.17) lautet für ein relativistisches Teilchen

$$\boxed{\omega^2 = k^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}} \quad (1.4.21)$$

Es sei hier noch einmal mit aller Deutlichkeit darauf hingewiesen, dass nichts mit der Frequenz  $f = \frac{\omega}{2\pi}$  schwingt und  $\omega$  somit nicht gemessen werden kann.  $\omega$  ist eine reine Rechengröße, die zur Berechnung der messbaren Aufenthaltswahrscheinlichkeiten verwendet wird. So ist es auch kein Dilemma, dass sich das klassische und das relativistische  $\omega$  auch für kleine Geschwindigkeiten beträchtlich voneinander unterscheiden (siehe Aufgaben).

Im vorhergehenden Kapitel haben wir Wellenpakete aus ebenen Wellen aufgebaut, ohne einen konkreten physikalischen Hintergrund dafür zu haben. Jetzt kennen wir die Dispersionsrelation eines freien Teilchens und können uns, mit kräftiger Unterstützung eines Computeralgebrasytems (MAPLE), an die Konstruktion der Wellenfunktion eines (nichtrelativistischen) Teilchens

## 1 Materiewellen

mit der Masse  $m$  und der Geschwindigkeit  $v = v_g$  heranmachen. Wir gehen von einer Gauß'schen Wellenzahlverteilung

$$A(k) = A_0 \cdot e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \quad (1.4.22)$$

aus. Mit (1.4.1) und (1.4.9) erhalten wir

$$\psi(x, t) = A_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \cdot e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk \quad (1.4.23)$$

Nach einigem guten Zureden (siehe MAPLE-Worksheet) erhalten wir vom CAS folgende Ergebnisse:

$$\psi(x, t) = \varphi(x, t) \cdot e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (1.4.24)$$

mit

$$\varphi(x, t) = \text{konst.} \cdot \frac{e^{\frac{i a^2 (x-vt)^2}{4(bt-i)}}}{\sqrt{1 + ibt}} \quad (1.4.25)$$

und die normierte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(x, t) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{e^{-\frac{a^2 (x-vt)^2}{2(1+b^2 t^2)}}}{\sqrt{1 + b^2 t^2}} \quad (1.4.26)$$

mit

$$\omega_0 = \frac{W}{\hbar} = \frac{m v^2}{2\hbar} \quad \text{und} \quad b = \frac{\hbar a^2}{2m} \quad (1.4.27)$$

$\varphi(x, t)$  ist nicht reell, d.h.  $\psi(x, t)$  ist keine ebene Welle mit ortsabhängiger Amplitude. Vielmehr hängt sogar die Wellenlänge des Paketes vom Ort ab. Das hat aber alles keine Bedeutung, da nur  $w(x, t)$  gemessen werden kann. Zur grafischen Darstellung der Wellenfunktion kann man noch folgende Schreibweise wählen:

$$\psi(x, t) = \sqrt{w(x, t)} \cdot \xi(x, t) \quad (1.4.28)$$

Da  $|\psi| = \sqrt{w}$  gilt, ist  $|\xi(x, t)| = 1$ , d.h.  $\xi(x, t)$  ist eine Welle mit der Amplitude 1 und  $\sqrt{w(x, t)}$  ist die Einhüllende. In Abb.1.4.1 sind die Realteile von  $\psi$  und  $\xi$  zu zwei verschiedenen Zeiten gezeichnet.

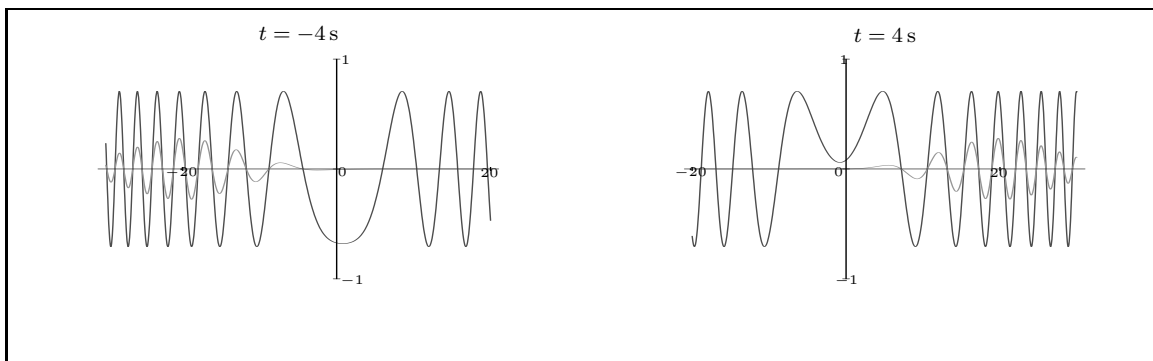


Abb.1.4.1  $\psi(x, t)$  und  $\xi(x, t)$

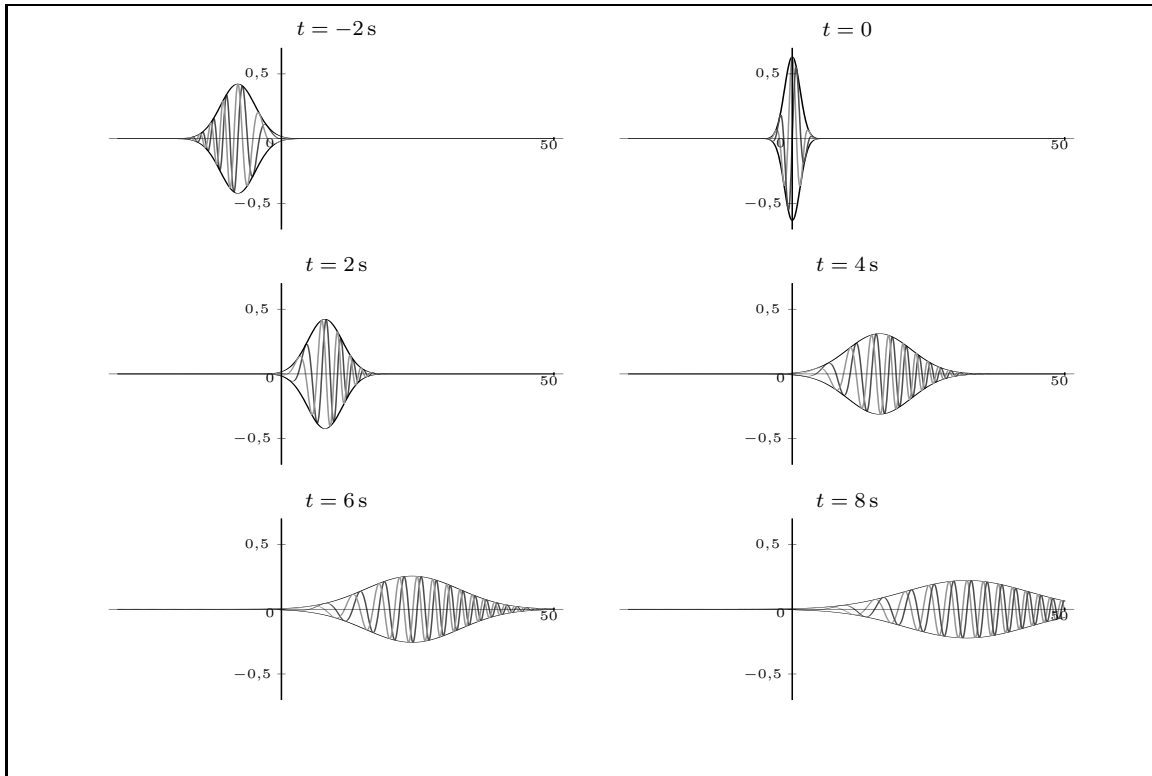


Abb.1.4.2  $Re(\psi)$ ,  $Im(\psi)$  und die Einhüllenden  $\pm\sqrt{w}$

Abb.1.4.2 zeigt die zeitliche Entwicklung eines Wellnpaketes für  $a = 1$ ,  $b = 1$  und  $v = 4$ . Mit MAPLE kann man viele dieser Bilder berechnen und dann mit dem Befehl `animate` als eindrucksvollen Film ablaufen lassen. Es ist deutlich das „Zerfließen“ des Wellnpaketes zu erkennen! Aber aufgepasst:

**Nicht das Teilchen selbst wird immer breiter, sondern nur unsere Kenntnis vom Aufenthaltsort des Teilchens!**

Man beachte die zeitliche Symmetrie der Bilder zum Zeitnullpunkt! Man muss das ganze Geschehen wie folgt interpretieren: Zur Zeit Null wird der Aufenthaltsort des Teilchens gemessen. Das Ergebnis der Messung ist die Funktion  $w(x, 0)$ , deren Breite die Genauigkeit der Ortsmessung widerspiegelt. Da  $w(x, t)$  für  $t \neq 0$  breiter ist als  $w(x, 0)$ , kann die Geschwindigkeit des Teilchens zum Zeitpunkt der Ortsmessung nicht genau bekannt sein. Genauer hierzu in den Aufgaben und im nächsten Kapitel.

## 1.5 Die Unbestimmtheitsrelationen

Die Bewegung eines Teilchens der Masse  $m$  mit der Geschwindigkeit  $v_0$  wird beschrieben durch die Wahrscheinlichkeitsdichte (1.4.26)

$$w(x, t) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{e^{-\frac{a^2(x-v_0t)^2}{2(1+b^2t^2)}}}{\sqrt{1+b^2t^2}} \quad (1.5.1)$$

mit der Wellenzahlverteilung

$$A(k) = A_0 \cdot e^{-\frac{(k-k_0)^2}{a^2}} \quad (1.5.2)$$

der Gruppengeschwindigkeit

$$v_0 = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (1.5.3)$$

## 1 Materiewellen

und der Konstanten

$$b = \frac{a^2 v_0}{2 k_0} = \frac{a^2 \hbar}{2 m} \quad (1.5.4)$$

Wir wählen eine Zeit  $t$ , zu der die Breite  $\Delta x$  des Wellenpaketes (beim  $\frac{1}{e}$ -fachen des Maximalwertes) groß ist gegen seine Breite  $\Delta x_0$  zur Zeit Null. Aus

$$\Delta x = \frac{2\sqrt{2(1+b^2 t^2)}}{a} \quad (1.5.5)$$

(Nachweis!) folgt

$$\Delta x_0 \ll \Delta x \iff t \gg \frac{1}{b} \quad (1.5.6)$$

Wenn das Teilchen exakt die Geschwindigkeit  $v_0$  hätte, wäre es zur Zeit  $t$  am Ort  $x_0 = v_0 \cdot t$  (bis auf eine Ungenauigkeit in der Größenordnung der Anfangsbreite, die wir vernachlässigen). Ist die Geschwindigkeit des Teilchens aber  $v = v_0 + \Delta v$ , dann befindet es sich zur Zeit  $t$  am Ort  $x = v \cdot t = x_0 + \Delta v \cdot t$ . Die Wahrscheinlichkeit  $W_p$  dafür, dass das Teilchen zur Zeit Null einen Impuls aus dem Intervall  $[p, p + \delta p]$  hat ist gleich der Wahrscheinlichkeit, dass seine Geschwindigkeit aus

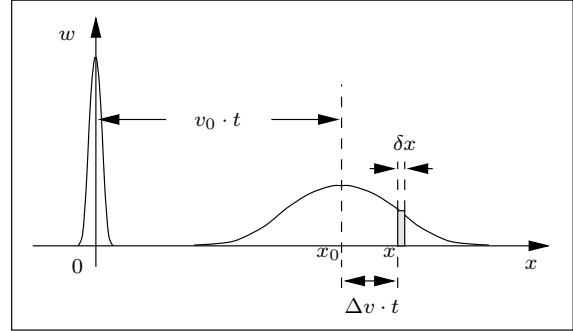


Abb.1.5.1 Bewegung eines Wellenpakets

dem Intervall  $[v, v + \delta v]$  mit  $\delta v = \frac{\delta p}{m}$  ist. Diese Wahrscheinlichkeit ist aber gleich der Wahrscheinlichkeit  $W_x$ , das Teilchen zur Zeit  $t$  im Ortsintervall  $[x, x + \delta x]$  mit

$$\delta x = (v + \delta v) \cdot t - v \cdot t = \delta v \cdot t = \delta p \cdot \frac{t}{m} \quad (1.5.7)$$

zu finden. Bezeichnen wir mit  $w_p$  die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Impuls, dann gilt

$$W_p = w_p(p) \cdot \delta p = W_x = w(x, t) \cdot \delta x = w(x, t) \cdot \delta p \cdot \frac{t}{m} \quad (1.5.8)$$

Wegen (1.5.6) gilt

$$1 + b^2 t^2 \approx b^2 t^2 \quad (1.5.9)$$

Mit guter Näherung folgt dann aus (1.5.8) und (1.5.1) unter Berücksichtigung von

$$x - v_0 \cdot t = x_0 + \Delta v \cdot t - x_0 = \Delta v \cdot t \quad (1.5.10)$$

$$w_p(p) = w(x, t) \cdot \frac{t}{m} = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{e^{-\frac{a^2 \Delta v^2 t^2}{2 b^2 t^2}}}{b t} \cdot \frac{t}{m} = \quad (1.5.11)$$

$$= \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{e^{-\frac{a^2 \Delta p^2}{2 b^2 m^2}}}{b m} \stackrel{(1.5.4)}{=} \frac{\sqrt{2}}{\hbar a \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{2 \Delta p^2}{\hbar^2 a^2}}$$

$$\boxed{w_p(p) = \frac{\sqrt{2}}{\hbar a \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{2(p-p_0)^2}{\hbar^2 a^2}}} \quad (1.5.12)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass die Wellenzahl aus dem Intervall  $[k, k + \delta k]$  stammt, ist

$$W_k = w_k(k) \cdot \delta k = w_p(p) \cdot \delta p = w_p(\hbar k) \cdot \hbar \delta k \quad (1.5.13)$$

Damit folgt

$$w_k(k) = \frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{2(k-k_0)^2}{a^2}} \quad (1.5.14)$$

Ein Vergleich mit (1.5.2) zeigt, dass

$$w_k(k) = |A(k)|^2 \quad (1.5.15)$$

gilt, wenn  $A_0$  geeignet gewählt wird. Die Betragsstriche schreiben wir vorsichtshalber, weil  $A(k)$  auch komplex sein könnte. (1.5.12) zeigt, dass nicht nur der Ort des Teilchens, sondern auch sein Impuls eine Größe ist, die durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte beschrieben wird. Die  $\frac{1}{e}$ -Breite der Impulsverteilung ist

$$\Delta p = \hbar a \sqrt{2} \quad (1.5.16)$$

Für die Breite der Ortsverteilung folgt für  $t \gg \frac{1}{v}$  aus (1.5.5) und (1.5.16)

$$\Delta x(t) = \frac{\hbar a \sqrt{2}}{m} \cdot t = \frac{\Delta p}{m} \cdot t = \Delta v \cdot t \quad (1.5.17)$$

$\Delta v$  ist somit die Geschwindigkeit, mit der das Wellenpaket immer breiter wird. Abb.1.4.2 bzw. Gleichung (1.5.5) entnimmt man, dass das Wellenpaket zur Zeit Null die geringste Breite hat. Diese Tatsache muss man so interpretieren:

Zur Zeit  $t = 0$  wird der Ort und der Impuls des Teilchens gemessen. Die Unbestimmtheiten der Messung sind  $\Delta x$  und  $\Delta p$ . Zu allen anderen Zeiten (sowohl  $t > 0$  als auch  $t < 0$ ) ist die Unbestimmtheit des Aufenthaltsortes wegen der Unbestimmtheit des Impulses größer als zur Zeit Null.

(1.5.5) entnimmt man die Ortsunschärfe zur Zeit Null:

$$\Delta x = \Delta x(0) = \frac{2\sqrt{2}}{a} \quad (1.5.18)$$

Aus (1.5.16) und (1.5.18) folgt für die Unschärfen zur Zeit der Messung

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = 4\hbar} \quad (1.5.19)$$

(für  $\frac{1}{e}$ -Breiten)

(1.5.19) ist unsere erste Fassung der berühmten **Unschärferelation** für Ort und Impuls, die **Werner Heisenberg** im Jahre 1927 als erster entdeckte. Heisenberg verwendete aber nicht die  $\frac{1}{e}$ -Breiten der Wahrscheinlichkeitsdichten, sondern die Standardabweichungen von den Mittelwerten von Ort und Impuls (Überprüfe die folgenden Gleichungen!):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w(x,0) \cdot x \, dx = 0 \quad (1.5.20)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w_p(p) \cdot p \, dp = p_0 \quad (1.5.21)$$

$$\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w(x,0) \cdot x^2 \, dx = \frac{1}{a^2} \quad (1.5.22)$$

$$\sigma_p^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} w_p(p) \cdot (p - p_0)^2 \, dx = \frac{1}{4} a^2 \hbar^2 \quad (1.5.23)$$

Damit lautet die Unschärferelation

$$\sigma_x \cdot \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \quad (1.5.24)$$

(für Standardabweichungen)

(1.5.19) und (1.5.24) haben wir für ein Gauß'sches Wellenpaket abgeleitet. Heisenberg zeigte, dass allgemein

$$\sigma_x \cdot \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.5.25)$$

gilt. Das Gleichheitszeichen gilt nur für ein Gauß'sches Paket. Im dreidimensionalen Fall gilt:

$$\sigma_x \cdot \sigma_{px} \geq \frac{\hbar}{2} \quad \sigma_y \cdot \sigma_{py} \geq \frac{\hbar}{2} \quad \sigma_z \cdot \sigma_{pz} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.5.26)$$

Diese Gleichungen müssen wie folgt interpretiert werden:

Misst man bei einer Vielzahl von identisch präparierten Teilchen **gleichzeitig** den Ort und den Impuls, dann gelten für die Standardabweichungen der Messwerte die Ungleichungen (1.5.26).

Abb.1.5.2 zeigt den Zusammenhang zwischen der Standardabweichung  $\sigma_p$  und einer möglichen Definition der Breite  $\Delta p$  der Wahrscheinlichkeitsdichte  $w_p(p)$  (Analoges gilt für  $\sigma_x$  und  $\Delta x$ ). Für ein Gauß'sches Wellenpaket findet man das Teilchen mit den folgenden Wahrscheinlichkeiten in den entsprechenden Intervallen (die gleichen Wahrscheinlichkeiten gelten für die entsprechenden  $x$ -Intervalle):

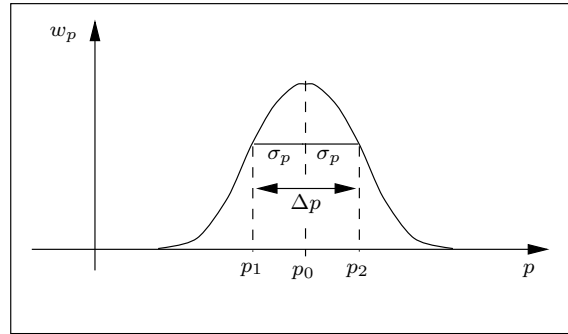


Abb.1.5.2 Breite und Standardabweichung

$$\begin{aligned} P[p_0 - \sigma_p, p_0 + \sigma_p] &= 68,3 \% \\ P[p_0 - 2\sigma_p, p_0 + 2\sigma_p] &= 95,4 \% \\ P[p_0 - 3\sigma_p, p_0 + 3\sigma_p] &= 99,7 \% \end{aligned} \quad (1.5.27)$$

$$\begin{aligned} \Delta x = 2\sigma_x \quad \wedge \quad \Delta p = 2\sigma_p &\implies \Delta x \cdot \Delta p \geq 2\hbar \approx 0,32 h \quad (68,3 \%) \\ \Delta x = 4\sigma_x \quad \wedge \quad \Delta p = 4\sigma_p &\implies \Delta x \cdot \Delta p \geq 8\hbar \approx 1,27 h \quad (95,4 \%) \\ \Delta x = 6\sigma_x \quad \wedge \quad \Delta p = 6\sigma_p &\implies \Delta x \cdot \Delta p \geq 18\hbar \approx 2,86 h \quad (99,7 \%) \end{aligned} \quad (1.5.28)$$

Wenn es nur auf Größenordnungen ankommt, schreibt man (1.5.28) meist in der einfachen Form

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim h \quad (1.5.29)$$

Neben der Unschärferelation für Ort und Impuls gibt es eine analoge Beziehung für die Unschärfen von Energie und Zeit. Da die exakte Herleitung dieser Beziehung über die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Größen Energie und Zeit nicht ganz einfach ist, beschränken wir uns auf eine Plausibilitätsbetrachtung. Als sinnvolle Breite der Energieverteilung eines Gauß'schen Wellenpaketes bietet sich (siehe Abb.1.5.2)

$$\Delta E = 2 \cdot \sigma_E = E_2 - E_1 = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{p_1^2}{2m} \quad (1.5.30)$$

an. Mit  $p_1 = p_0 - \sigma_p$  und  $p_2 = p_0 + \sigma_p$  folgt daraus

$$\sigma_E = \frac{(p_0 + \sigma_p)^2 - (p_0 - \sigma_p)^2}{4m} = \frac{p_0 \sigma_p}{m} \quad (1.5.31)$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Zeitintervall  $[t, t + dt]$  am Ort  $x = 0$  zu finden, ist  $w_t(t) \cdot dt$ . Das Wellenpaket bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit  $v_0 = \frac{p_0}{m}$  über den Beobachter am Ort  $x = 0$  hinweg. Als Breite der Zeitverteilung bietet sich daher

$$\Delta t = 2 \cdot \sigma_t = \frac{\Delta x}{v_0} = \frac{2 \sigma_x}{v_0} \quad (1.5.32)$$

an. Damit gilt

$$\sigma_E \cdot \sigma_t = \frac{p_0 \sigma_p}{m} \cdot \frac{\sigma_x}{v_0} = \sigma_x \cdot \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.5.33)$$

oder zusammengefasst

$$\boxed{\sigma_E \cdot \sigma_t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (1.5.34)$$

Analog zu (1.5.29) erhält man

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim h} \quad (1.5.35)$$

Diese Gleichung muss folgendermaßen interpretiert werden:

Werden bei einer Vielzahl von identisch präparierten physikalischen Zuständen Energiemessungen der mittleren Zeitdauer  $\Delta t$  ausgeführt und bezeichnet  $\Delta E$  die Unschärfe der Messwerte, dann gilt (1.5.35).

Eine Energiemessung der Dauer  $\Delta t$  ist also notwendigerweise mit dem Fehler

$$\Delta E \approx \frac{h}{\Delta t} \quad (1.5.36)$$

behaftet. Mit der gleichen Energieunschärfe ist ein physikalischer Zustand behaftet, der nur für eine gewisse Zeit  $\Delta t$  („Lebensdauer“) existiert. Wir werden in einem späteren Kapitel mit (1.5.36) die Frequenzbreite von Spektrallinien berechnen, die eng mit der Energieunschärfe von atomaren Zuständen zusammenhängt.

Die Unschärfebeziehung (1.5.36) zwingt uns auch dazu, den Energiesatz neu zu überdenken:

Verletzungen des Energiesatzes um  $\delta E$  sind für Zeitdauern  $\Delta t$  mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit möglich, wenn  $\delta E$  kleiner oder ungefähr gleich der quantenmechanischen Energieunschärfe  $\Delta E$  ist:

$$\delta E \lesssim \Delta E \approx \frac{h}{\Delta t} \quad (1.5.37)$$

So können z.B. aus dem Nichts für kurze Zeiten  $\Delta t$  Teilchen der Gesamtenergie  $m c^2 \lesssim \frac{h}{\Delta t}$  entstehen (**virtuelle Teilchen**). Mit einer entsprechend geringeren Wahrscheinlichkeit können auch Teilchen mit einer größeren Energie entstehen. Das Vakuum ist also kein strukturloses Gebilde, sondern von virtuellen Teilchen durchsetzt (**Vakuumfluktuationen**), die mit real existierenden Teilchen in Wechselwirkung treten. Die Einflüsse dieser Wechselwirkungen sind durchaus messbar und müssen berücksichtigt werden, wenn Energiewerte von quantenmechanischen Zuständen mit hoher Genauigkeit berechnet werden. Es sei noch bemerkt, dass die virtuellen Teilchen nicht wirklich existieren, sondern nur dem Versuch entspringen, sich gewisse Terme in den Gleichungen der Quantenfeldtheorie vorzustellen!



Bei der Entstehung virtueller Teilchen müssen gewisse Regeln (Erhaltungssätze) eingehalten werden. So können wegen der Ladungserhaltung z.B. keine isolierten geladenen Teilchen wie Elektronen oder Protonen entstehen. Geladene Teilchen entstehen nur mit dem entsprechenden **Antiteilchen**, das genau die negative Ladung des Teilchens trägt. So kann z.B. ein Proton-Antiproton-Paar für die Zeitdauer

$$\Delta t \lesssim \frac{h}{\delta E} = \frac{h}{2 m c^2} \approx 2 \cdot 10^{-24} \text{ s}$$

entstehen.

Der **Drehimpuls**  $\vec{L}$  eines Teilchens mit dem Impuls  $\vec{p}$  und der Masse  $m$  bezüglich eines Punktes  $O$  ist definiert durch

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m \cdot \vec{r} \times \vec{v} \quad (1.5.38)$$

Für den Betrag des Drehimpulses erhält man

$$L = |\vec{L}| = m v r \sin \alpha \quad (1.5.39)$$

Der Drehimpuls ist deshalb eine wichtige Größe in der Physik, weil für ihn wie für den Impuls und die Energie ein Erhaltungssatz gilt.

Der Drehimpuls eines Teilchens, das mit der Geschwindigkeit  $v$  eine Kreisbahn mit Radius  $r$  beschreibt, ist wegen  $\sin \alpha = 1$  ( $\vec{v} \perp \vec{r}$ )

$$L = m v r = p r \quad (1.5.40)$$

Da es in der Quantenmechanik wegen der Unschärferelationen keine exakt definierte Teilchenbahn gibt, ist das Folgende nur eine Plausibilitätsbetrachtung. Ist  $\Delta \varphi$  die Änderung des Mittelpunktswinkels, dann gehört dazu die Bogenlänge

$$\Delta x = r \cdot \Delta \varphi$$

auf der Kreisbahn. Aus (1.5.29) folgt dann

$$\Delta x \cdot \Delta p = \Delta \varphi \cdot r \cdot \Delta p = \Delta \varphi \cdot \Delta L \gtrsim h \quad (1.5.41)$$

oder

$$\boxed{\Delta \varphi \cdot \Delta L \gtrsim h} \quad (1.5.42)$$

Die größtmögliche Winkelunschärfe auf der Kreisbahn ist  $\Delta \varphi = 2 \pi$ , woraus die kleinstmögliche Drehimpulsunschärfe

$$\Delta L_{\min} \approx \frac{h}{2 \pi} = \hbar \quad (1.5.43)$$

folgt.  $\hbar$  verwendet man deshalb als Drehimpulseinheit in der Quantenmechanik.

Viele Elementarteilchen haben neben dem **Bahndrehimpuls**  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  noch einen **Eigendrehimpuls** oder **Spin** bezüglich ihres Schwerpunktes (wie ein um seine Achse rotierender Ball). Die Spins der Elementarteilchen sind ganzzahlige Vielfache von  $\frac{\hbar}{2}$ . Ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (wie z.B. das Elektron) hat den Eigendrehimpuls  $\frac{\hbar}{2}$ .

Es sei bemerkt, dass die exakte Behandlung des Drehimpulses in der Quantenmechanik eine komplizierte Sache ist, die unsere Möglichkeiten weit übersteigt.

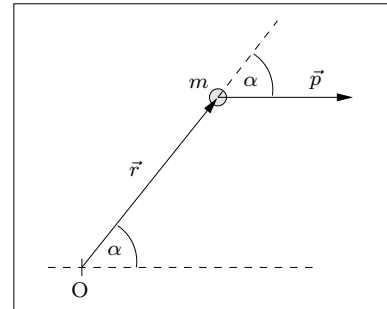


Abb.1.5.3 Drehimpulsdefinition

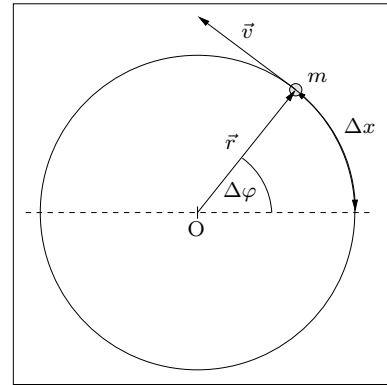


Abb.1.5.4 Kreisbewegung

## 2 Stationäre Zustände

### 2.1 Die Schrödingergleichung

In Kapitel 1 haben wir die Bewegung von **freien** Teilchen behandelt. Auf ein freies Teilchen wirkt keine Kraft, d.h. seine potentielle Energie ist konstant; das freie Teilchen bewegt sich in einem konstanten Potential. Damit man auch Teilchen in einem nicht-konstanten Potential beschreiben kann, muss die schon in (1.3.1) und (1.3.2) angekündigte Grundgleichung der Quantenmechanik gefunden werden. Für ein freies Teilchen muss nach (1.3.3) eine ebene Welle

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{i(kx - \omega t)} \quad (2.1.1)$$

eine Lösung der gesuchten Gleichung sein. Differenzieren von (2.1.1) nach  $x$  und  $t$  liefert

$$\dot{\psi}(x, t) = -i\omega A e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \psi(x, t) \quad (2.1.2)$$

$$\psi'(x, t) = ik A e^{i(kx - \omega t)} = ik \psi(x, t) \quad (2.1.3)$$

$$\psi''(x, t) = -k^2 A e^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \psi(x, t) \quad (2.1.4)$$

Mit der Planck-Relation

$$W = \hbar\omega \quad (2.1.5)$$

folgt aus (2.1.2)

$$\dot{\psi}(x, t) = -i \cdot \frac{W}{\hbar} \cdot \psi(x, t) \quad (2.1.6)$$

oder nach Multiplikation mit  $i\hbar$

$$i\hbar \dot{\psi}(x, t) = W \cdot \psi(x, t) \quad (2.1.7)$$

Die Gleichungen (2.1.4), (2.1.5) und (2.1.7) gelten für ein freies Teilchen. **Erwin Schrödinger** (1887-1961, Nobelpreis 1933 gemeinsam mit **Dirac**) forderte, dass diese Gleichungen auch bei Anwesenheit eines beliebigen Potentials erfüllt sein sollen. Aus (2.1.5) wird dann mit der potentiellen Energie  $V(x)$

$$\hbar\omega = W = \frac{m}{2} v^2 + V(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x) \quad (2.1.8)$$

(2.1.8) ist die nichtrelativistische Dispersionsrelation bei Anwesenheit eines Potentials. Einsetzen von (2.1.8) in (2.1.7) liefert

$$i\hbar \dot{\psi}(x, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot k^2 \psi(x, t) + V(x) \cdot \psi(x, t) \quad (2.1.9)$$

Mit (2.1.4) folgt schließlich die **zeitabhängige, eindimensionale Schrödingergleichung** (1926)

$$\boxed{i\hbar \dot{\psi}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \psi''(x, t) + V(x) \cdot \psi(x, t)} \quad (2.1.10)$$

## 2 Stationäre Zustände

Mit (2.1.10) haben wir eine Gleichung konstruiert, die für  $V(x) = 0$  die ebene Welle (2.1.1) als Lösung besitzt. Da (2.1.10) linear ist, ist auch jede Überlagerung ebener Wellen und somit jedes Wellenpaket

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (2.1.11)$$

eine Lösung der Schrödingergleichung mit  $V(x) = 0$ .

Unser Weg von (2.1.1) zu (2.1.10) ist keinesfalls zwingend! Es können sogar unendlich viele lineare Differentialgleichungen aufgestellt werden, die (2.1.1) als Lösung besitzen (siehe Aufgaben).

Ihre Rechtfertigung erhält die Schrödingergleichung nur dadurch, dass sie im nichtrelativistischen Fall alle bekannten Versuchsergebnisse richtig beschreibt!

Die Beschreibung zeitabhängiger quantenmechanischer Erscheinungen ist, außer beim freien Teilchen, recht kompliziert und wird meist numerisch in Angriff genommen. Wir wenden uns jetzt dem Studium der sogenannten **stationären Zustände** zu:

**Definition:** Ein physikalischer Zustand, dessen Wellenfunktion nur über den Faktor  $e^{-i\omega t}$  von der Zeit abhängt, heisst **stationärer** Zustand.

Für einen stationären Zustand gilt also

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\omega t} \quad (2.1.12)$$

mit einer nur vom Ort (und nicht von der Zeit) abhängigen Funktion  $\varphi(x)$ . Wegen

$$w(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2 \cdot |e^{-i\omega t}|^2 = |\varphi(x)|^2 \quad (2.1.13)$$

ist die Wahrscheinlichkeitsdichte eines stationären Zustandes **von der Zeit unabhängig!**

Zur Ableitung einer Differentialgleichung für die zeitunabhängige Funktion  $\varphi(x)$  setzt man (2.1.12) in (2.1.10) ein:

$$\begin{aligned} i\hbar \cdot (-i\omega)\varphi(x) \cdot e^{-i\omega t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \varphi''(x) \cdot e^{-i\omega t} + V(x) \cdot \varphi(x) \cdot e^{-i\omega t} \\ \hbar\omega \varphi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \varphi''(x) + V(x) \cdot \varphi(x) \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

Mit der Gesamtenergie  $W = \hbar\omega$  des betrachteten Zustandes und der ortsabhängigen potentiellen Energie  $V(x)$  lautet die **zeitunabhängige Schrödingergleichung**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \varphi''(x) + V(x) \cdot \varphi(x) = W \cdot \varphi(x) \quad (2.1.15)$$

Die dreidimensionale Verallgemeinerung von (2.1.15) lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}) \cdot \varphi(\vec{r}) = W \cdot \varphi(\vec{r}) \quad (2.1.16)$$

Die Lösung von (2.1.16) für eine konstante potentielle Energie  $V(x) = V_0$  lautet

$$\varphi(x) = A \cdot e^{\alpha x} + B \cdot e^{-\alpha x} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W)}, \quad (2.1.17)$$

wie man leicht durch Einsetzen nachweist. Für  $W < V_0$  ist  $\alpha$  reell und  $\varphi(x)$  ist die Summe von zwei reellen Exponentialfunktionen. Dieser Fall ist in der klassischen Mechanik nicht möglich, weil die Gesamtenergie als Summe aus potentieller und kinetischer Energie mindestens so groß

## 2 Stationäre Zustände

wie die potentielle Energie sein muss. Nach der Quantenmechanik kann sich das Teilchen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit also an Orten aufhalten, an denen es nach der klassischen Mechanik nie sein kann. Wir werden diesen Fall an konkreten Beispielen noch genau studieren.

Für  $W > V_0$  ist die kinetische Energie

$$W_k = \frac{m}{2} v^2 = W - V_0 \quad (2.1.18)$$

des Teilchens positiv und es gilt

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2m(W - V_0)} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{m^2 v^2} = \frac{i}{\hbar} p = i k \quad (2.1.19)$$

Aus (2.1.17) folgt

$$\varphi(x) = A \cdot e^{i k x} + B \cdot e^{-i k x} \quad \text{mit} \quad k = \frac{p}{\hbar} \quad \text{für} \quad W > V_0 \quad (2.1.20)$$

(2.1.20) beschreibt die Überlagerung einer nach rechts laufenden mit einer nach links laufenden Welle, denn für stationäre Zustände gilt  $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i \omega t}$  und damit

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i \omega t} = A \cdot e^{i(kx - \omega t)} + B \cdot e^{i(-kx - \omega t)} \quad (2.1.21)$$

Da in (2.1.15) die zweite Ableitung von  $\varphi(x)$  nach  $x$  steht, muss  $\varphi(x)$  mindestens zweimal differenzierbar sein. Notwendig dafür ist folgende Stetigkeitsforderung:

$$\boxed{\varphi(x) \text{ und } \varphi'(x) \text{ sind stetig für alle } x} \quad (2.1.22)$$

Mit Hilfe dieser Stetigkeitsforderung (die auch an Unstetigkeitsstellen von  $V(x)$  gelten muss) und der Normierungsbedingung

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1} \quad (2.1.23)$$

werden die Konstanten in  $\varphi(x)$  berechnet.

Die Konstanten  $A$  und  $B$  in (2.1.17) und (2.1.20) sind i.a. komplex, d.h. es gilt

$$A = a_1 + a_2 i \quad \text{und} \quad B = b_1 + b_2 i \quad (2.1.24)$$

mit reellen Zahlen  $a_1, a_2, b_1$  und  $b_2$ . Im Fall  $W > V_0$  erhält man aus (2.1.20) die Wahrscheinlichkeitsdichte (siehe Aufgaben)

$$\begin{aligned} w(x) &= |A|^2 \cdot [1 + |D|^2 + 2 d_1 \cos 2kx + 2 d_2 \sin 2kx] \\ &= |A|^2 \cdot [1 + |D|^2 + 2 |D| \sin(2kx + \sigma)] \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

mit

$$D = \frac{B}{A} = d_1 + d_2 i \quad \text{und} \quad \tan \sigma = \frac{d_1}{d_2} \quad (2.1.26)$$

Für den Mittelwert von  $w(x)$  erhält man durch Integration über eine Wellenlänge

$$\langle w \rangle = \frac{k}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{k}} w(x) dx = |A|^2 \cdot (1 + |D|^2) = |A|^2 + |B|^2 \quad (2.1.27)$$

**Zusammenfassung:**

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen der Gesamtenergie  $W$  und der potentiellen Energie  $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \varphi''(x) + V(x) \cdot \varphi(x) = W \cdot \varphi(x)$$

hat für  $V(x) = V_0 = \text{konst.}$  die Lösung

$W < V_0$	$\varphi(x) = A \cdot e^{\alpha x} + B \cdot e^{-\alpha x}$	mit $\alpha = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(V_0 - W)}$
$W > V_0$	$\varphi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}$	mit $k = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(W - V_0)}$
	$w(x) =  A ^2 \cdot [1 +  D ^2 + 2 D  \sin(2kx + \sigma)]$	mit $D = \frac{B}{A}$ und $\tan \sigma = \frac{\text{Re}(D)}{\text{Im}(D)}$

Die Konstanten in  $\varphi$  berechnet man nach folgenden Regeln:

- Auch an Unstetigkeitsstellen von  $V(x)$  müssen  $\varphi(x)$  und  $\varphi'(x)$  stetig sein.

- Normierung von  $\varphi(x)$  mit  $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$

**2.2 Potentialbarrieren**

In der klassischen Mechanik wird eine Potentialbarriere der Höhe  $V_0$  von einem Teilchen mit der Gesamtenergie  $W > V_0$  sicher überwunden. Ein Teilchen mit  $W < V_0$  kehrt am Ort  $x_0$  mit  $V(x_0) = W$  seine Bewegungsrichtung um. Quantenmechanisch könnte man das Problem „Teilchen gegen Potentialbarriere“ folgendermaßen angehen: Man sucht eine Lösung der **zeitabhängigen** Schrödingergleichung (2.1.10) mit dem zur Zeit Null

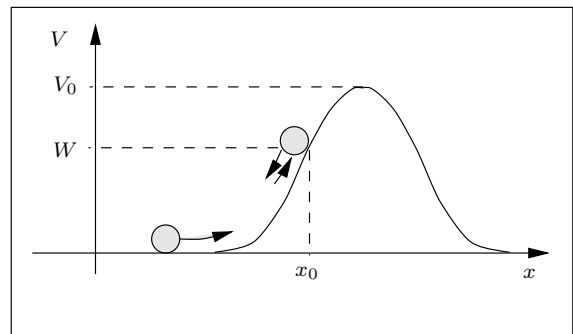


Abb.2.2.1 Potentialbarriere

bekanntem Wellenpaket  $\psi(x, 0)$ . Diese Methode ist, zumindest numerisch, immer durchführbar, aber recht aufwendig. An den wesentlichen Ergebnissen ändert sich nichts, wenn man ein Teilchen mit scharf definiertem Impuls verwendet, dessen Wellenfunktion durch

$$\psi(x, t) = C \cdot e^{i(kx - \omega t)} = C \cdot e^{ikx} \cdot e^{-i\omega t} \tag{2.2.1}$$

gegeben ist ( $\Delta p = 0, \Delta x = \infty$ ). Wegen (2.1.12) handelt es sich hier um einen stationären Zustand mit  $\varphi(x) = C \cdot e^{ikx}$  und das Problem wird durch die **zeitunabhängige** Schrödingergleichung (2.1.15) beschrieben. (2.2.1) kann auch als Wellenfunktion eines Stromes von vielen identischen Teilchen gleicher Geschwindigkeit betrachtet werden. Die Größe

$$dP = |\psi|^2 dx = w(x) dx \tag{2.2.2}$$

## 2 Stationäre Zustände

ist dann proportional zur mittleren Zahl  $dN$  der Teilchen im Intervall  $[x, x + dx]$ :

$$dN = \text{konst.} \cdot w(x) dx \quad (2.2.3)$$

Da der Impuls  $p$  das gleiche Vorzeichen hat wie  $k$ , gilt:

Teilchenstrom nach rechts : $\varphi(x) = A \cdot e^{ikx}$ Teilchenstrom nach links : $\varphi(x) = B \cdot e^{-ikx}$
--

(2.2.4)

Im Folgenden betrachten wir Beispiele, in denen ein von links einfallender Teilchenstrom auf eine Potentialbarriere trifft. Für  $x < 0$  und für  $x > d$  sei die potentielle Energie konstant (siehe Abb. 2.2.2). Ist die Teilchenenergie  $W$  kleiner als die maximale potentielle Energie  $V_0$ , dann muss das Teilchen, klassisch gesehen, umkehren, d.h. es wird nie in den Bereich  $x > d$  vordringen. Die Lösung der Schrödingergleichung für unser Problem zeigt auch für den Bereich  $x > d$  eine von Null verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit (**Tunneleffekt**).

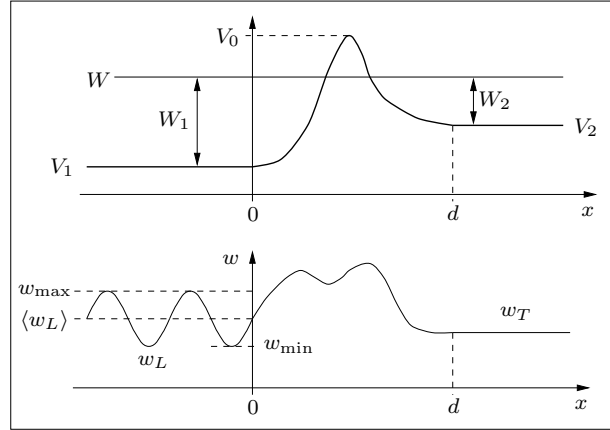


Abb.2.2.2 Potentialbarriere

Die Lösung der Schrödingergleichung in den Bereichen mit konstanter potentieller Energie ist für  $W > \max(V_1, V_2)$  nach (2.1.20)

$$\varphi(x) = \begin{cases} A \cdot e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_1 x} & \text{für } x < 0 \\ E e^{ik_2 x} & \text{für } x > d \end{cases} \quad (2.2.5)$$

mit

$$k_1 = \frac{p_1}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(W - V_1)} \quad (2.2.6)$$

$$k_2 = \frac{p_2}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(W - V_2)} \quad (2.2.7)$$

Dem einfallenden Strahl entspricht die Wellenfunktion  $A \cdot e^{ik_1 x}$ , der Summand  $B \cdot e^{-ik_1 x}$  muss als Wellenfunktion eines reflektierten Strahls interpretiert werden. Im durchgehenden Strahl, also für  $x > d$ , gibt es keine reflektierten Teilchen (kein Summand mit  $e^{-ik_2 x}$ ). Nach (2.1.25) gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(x) = \begin{cases} |A|^2 + |B|^2 + 2|A| \cdot |B| \cdot \sin(2k_1 x + \sigma) & \text{für } x < 0 \\ |E|^2 & \text{für } x > d \end{cases} \quad (2.2.8)$$

Der Mittelwert der Wahrscheinlichkeitsdichte im Bereich links der Barriere ist nach (2.1.27)

$$\langle w_L \rangle = |A|^2 + |B|^2 \quad (2.2.9)$$

## 2 Stationäre Zustände

Dabei ist  $|A|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte für den einfallenden und  $|B|^2$  für den reflektierten Teil des Teilchenstroms. In einem Zeitintervall  $\Delta t$  fallen  $N$  Teilchen ein,  $N_R$  Teilchen werden reflektiert und  $N_T$  Teilchen durchdringen die Barriere. Die Teilchenzahlen sind proportional zu den Wahrscheinlichkeiten, die Teilchen in Ortsintervallen der Breiten  $v_1 \cdot \Delta t$  bzw.  $v_2 \cdot \Delta t$  zu finden:

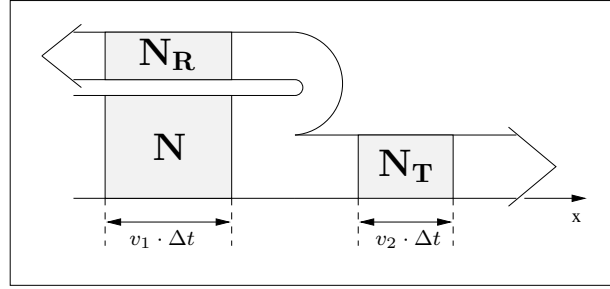


Abb.2.2.3 Teilchenzahlen

$$\left. \begin{aligned} N &= \varepsilon^* |A|^2 v_1 \Delta t = \varepsilon |A|^2 v_1 \\ N_R &= \varepsilon^* |B|^2 v_1 \Delta t = \varepsilon |B|^2 v_1 \\ N_T &= \varepsilon^* |E|^2 v_2 \Delta t = \varepsilon |E|^2 v_2 \end{aligned} \right\} \quad (2.2.10)$$

Der **Reflexionskoeffizient**  $R$  und der **Transmissionskoeffizient**  $T$  sind die Wahrscheinlichkeiten für Reflexion bzw. für das Durchdringen der Barriere:

$$\boxed{R = \frac{N_R}{N} = \frac{|B|^2}{|A|^2}} \quad , \quad \boxed{T = \frac{N_T}{N} = \frac{|E|^2 \cdot v_2}{|A|^2 \cdot v_1}} \quad (2.2.11)$$

Wir betrachten nur Vorgänge, bei denen keine Teilchen erzeugt oder vernichtet werden, d.h. es gilt

$$\boxed{N_R + N_T = N} \quad \text{bzw.} \quad \boxed{R + T = 1} \quad (2.2.12)$$

Da  $w(x)$  nach dem Durchdringen einer Potentialbarriere konstant ist, beginnt man die **numerische Lösung** der Schrödingergleichung für Probleme dieser Art im Bereich nach der Barriere und rechnet dann rückwärts. Da im Bereich nach der Barriere  $\varphi(x) = E \cdot e^{ik_2 x}$  gilt und  $\varphi^*(x) = E \cdot e^{ik_2(x-x_0)}$  die gleiche Wahrscheinlichkeitsdichte wie  $\varphi$  ergibt, kann man die Konstante  $x_0$  beliebig wählen. Mit einem beliebigen  $x_0$  **nach** der Barriere lauten dann die Anfangsbedingungen für die numerische Lösung

$$\varphi(x_0) = E \quad , \quad \varphi'(x_0) = i k E \quad (2.2.13)$$

Aus den numerisch gewonnenen Funktionswerten von  $w$  im Bereich **vor** der Barriere berechnet man mit einer geeigneten Interpolation (Parabel durch drei Funktionswerte) das Maximum und das Minimum von  $w(x)$ . Dazu wählt man aus einer möglichst feinen Wertetabelle den maximalen Wert und seine beiden Nachbarn (siehe Abb. 2.2.4). Durch Einsetzen der drei Wertepaare in die Parabelgleichung

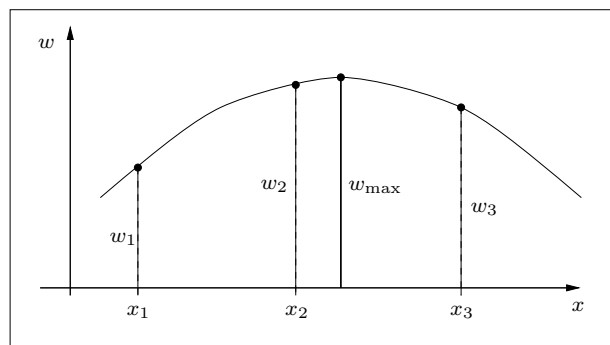


Abb.2.2.4 Maximumberechnung

$$g(x) = a x^2 + b x + c \quad (2.2.14)$$

erhält man drei Gleichungen zur Berechnung der Koeffizienten  $a$ ,  $b$  und  $c$ . Der Scheitelwert der so erhaltenen Parabel ist eine gute Näherung für das wahre Maximum von  $w(x)$ . Analog berechnet man das Minimum und erhält so (siehe Abb. 2.2.2)

$$\langle w_L \rangle = \frac{1}{2} \cdot (w_{\min} + w_{\max}) \quad (2.2.15)$$

## 2 Stationäre Zustände

Da bei der numerischen Rechnung  $|E|$  bekannt ist (Anfangswerte!), kann man jetzt den Transmissionskoeffizienten  $T$  berechnen. Aus

$$N + N_R = 2N - N_T \quad (2.2.16)$$

folgt

$$\langle w_L \rangle \cdot v_1 = 2|A|^2 v_1 - |E|^2 v_2 \quad (2.2.17)$$

Auflösen nach  $|A|^2$  und Einsetzen in (2.2.11) ergibt

$$T = \frac{2|E|^2 v_2}{\langle w_L \rangle \cdot v_1 + |E|^2 v_2} = \frac{2|E|^2 k_2}{\langle w_L \rangle \cdot k_1 + |E|^2 k_2} \quad (2.2.18)$$

Da in den messbaren Wahrscheinlichkeiten  $T$  und  $R$  nur Verhältnisse der Beträge der Konstanten  $A$ ,  $B$  und  $E$  vorkommen, kann eine der Konstanten noch frei gewählt werden. Zweckmäßigerweise wählt man  $E = 1$  in den Anfangsbedingungen und erhält dann mit (2.2.15)

$$\boxed{T = \frac{4k_2}{(w_{\min} + w_{\max}) \cdot k_1 + 2k_2}} \quad (2.2.19)$$

Als erstes Beispiel betrachten wir eine **Potentialschwelle**

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } x \geq 0 \end{cases} \quad (2.2.20)$$

mit einer Teilchenenergie  $W < V_0$ . Die Lösung der Schrödingergleichung ist ( $L$  steht für „links“, d.h.  $x < 0$  und  $R$  für „rechts“, d.h.  $x > 0$ , wir wählen  $A = 1$ ) wegen (2.1.17) und (2.1.20):

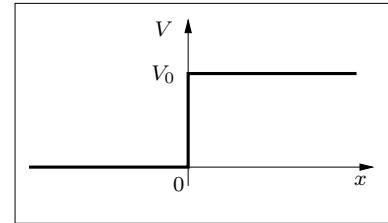


Abb.2.2.5 Potentialschwelle

$$\varphi_L(x) = e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad (2.2.21)$$

$$\varphi_R(x) = C \cdot e^{-\alpha x} + D \cdot e^{\alpha x} \quad (2.2.22)$$

mit

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW} \quad \text{und} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W)} \quad (2.2.23)$$

Wegen der Normierbarkeit muss  $D = 0$  gewählt werden. Die Stetigkeitsforderungen bei  $x = 0$  lauten

$$\varphi_L(0) = \varphi_R(0) \quad \Longrightarrow \quad 1 + B = C \quad (2.2.24)$$

$$\varphi'_L(0) = \varphi'_R(0) \quad \Longrightarrow \quad ik - ikB = -\alpha C \quad (2.2.25)$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems ist

$$B = \frac{1 - \beta^2 - 2\beta i}{1 + \beta^2} \quad \text{und} \quad C = \frac{2 - 2\beta i}{1 + \beta^2} \quad (2.2.26)$$

mit

$$\beta = \frac{\alpha}{k} = \sqrt{\frac{V_0}{W} - 1} \quad (2.2.27)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte erhält man mit (2.2.8)

$$w(x) = \begin{cases} 1 + |B|^2 + 2 \cdot |B| \cdot \sin(2kx + \sigma) & \text{für } x < 0 \\ |C|^2 \cdot e^{-2\alpha x} & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (2.2.28)$$



Abb.2.2.6 zeigt  $w(x)$  für ein Elektron mit  $V_0 = 1 \text{ eV}$  und  $W = 0,5 \text{ eV}$ . Beachtenswert ist das Eindringen des Elektrons in den klassisch verbotenen Bereich  $x > 0$ . Für  $x < 0$  liegt eine typische stehende Welle vor, die durch Überlagerung der Wellenfunktionen der einfallenden und reflektierten Teilchen entsteht.

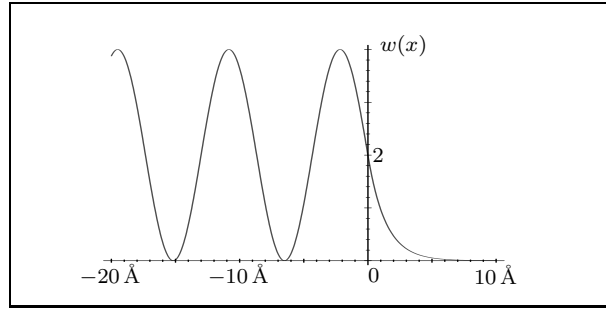


Abb.2.2.6  $w(x)$  bei der Potentialschwelle

Als nächstes Beispiel betrachten wir eine **Rechtecksbarriere** der Breite  $d$ :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } 0 \leq x \leq d \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.2.29)$$

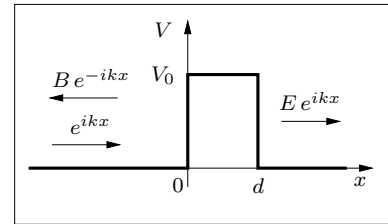


Abb.2.2.7 Rechtecksbarriere

mit  $W < V_0$ . Aus (2.1.17) und (2.1.20) folgt für die Wellenfunktion ( $A = 1$  wurde gewählt)

$$\varphi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} & \text{für } x < 0 \\ C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x} & \text{für } 0 \leq x \leq d \\ E e^{ikx} & \text{für } x > d \end{cases} \quad (2.2.30)$$

und aus (2.1.25) für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(x) = \begin{cases} 1 + |B|^2 + 2 \cdot |B| \cdot \sin(2kx + \sigma) & \text{für } x < 0 \\ |E|^2 & \text{für } x > d \end{cases} \quad (2.2.31)$$

Mit einem Computeralgebrasystem berechnet man aus den Stetigkeitsforderungen für  $\varphi$  und  $\varphi'$  an den Stellen  $x = 0$  und  $x = d$  die Konstanten  $B, C, D$  und  $E$  und erhält dann aus (2.2.11) mit  $A = 1$  und  $v_1 = v_2$  für den Transmissionskoeffizienten

$$T := |E|^2 = \frac{\gamma}{e^{2\alpha d} + e^{-2\alpha d} + \gamma - 2} \quad \text{mit} \quad \gamma = 16 \cdot \frac{W}{V_0} \cdot \left(1 - \frac{W}{V_0}\right) \quad (2.2.32)$$

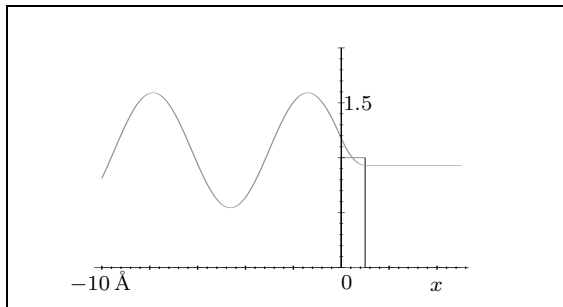


Abb.2.2.8  $w(x)$  bei der Rechtecksbarriere

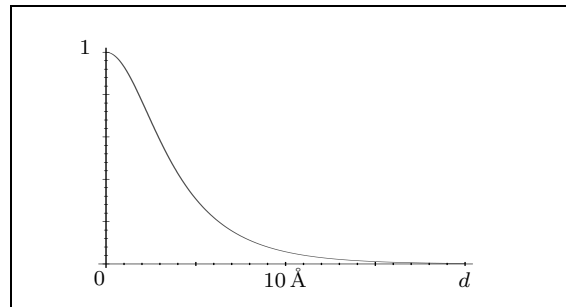


Abb.2.2.9 Transmissionskoeffizient

Abb.2.2.8 zeigt  $w(x)$  für ein Elektron mit  $V_0 = 1 \text{ eV}$ ,  $W = 0,9 \text{ eV}$  und  $d = 1 \text{ \AA}$ . In Abb.2.2.9 ist die Funktion  $T(d)$  dargestellt, die wegen der Exponentialfunktion im Nenner mit wachsendem  $d$  sehr schnell gegen Null geht.

Eine schöne Bestätigung des Tunneleffekts war die theoretische Erklärung des radioaktiven  $\alpha$ -Zerfalls durch **Gamow** (siehe Abb.2.2.10). Das Potential des  $\alpha$ -Teilchens ( ${}^4\text{He}$ -Kern) ist eine Überlagerung des Coulombpotentials und des Potentials der starken Wechselwirkung.

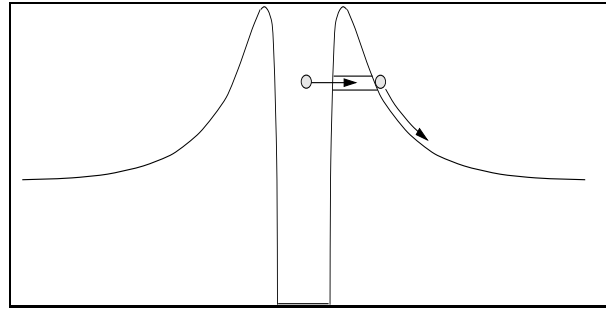


Abb.2.2.10  $\alpha$ -Zerfall

### 2.3 Gebundene Zustände

Wir betrachten ein Teilchen der Masse  $m$  im Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ +\infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.3.1)$$

Die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x) \varphi(x) = W \varphi(x) \quad (2.3.2)$$

hat in den Bereichen  $x < 0$  und  $x > a$  für ein endliches  $W$  die Lösung  $\varphi(x) = 0$ .

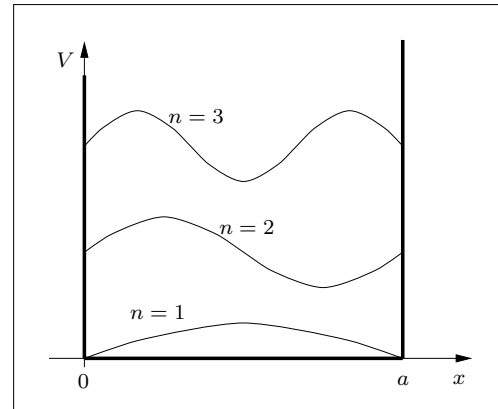


Abb.2.3.1 Unendlich tiefer Potentialtopf

Im Intervall  $0 \leq x \leq a$  lautet die Lösung nach (2.1.20)

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (2.3.3)$$

Die Stetigkeit von  $\varphi(x)$  bei  $x = 0$  ergibt

$$\varphi(0) = A + B = 0 \implies B = -A \quad (2.3.4)$$

d.h.

$$\varphi(x) = A (e^{ikx} - e^{-ikx}) = A (\cos kx + i \sin kx - \cos kx + i \sin kx) \quad (2.3.5)$$

$$\varphi(x) = 2 A i \sin kx \quad (2.3.6)$$

Aus der Stetigkeit von  $\varphi(x)$  bei  $x = a$  folgt

$$\sin ka = 0 \implies k = n \cdot \frac{\pi}{a} \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.3.7)$$

d.h.

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} 2 A i \sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.3.8)$$

und

$$w_n(x) = |\varphi_n(x)|^2 = \begin{cases} 4 A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.3.9)$$

Die Normierung von  $\varphi$  dient zur Berechnung von  $A$ :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} w_n(x) dx &= 4 A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) dx = \\ &= \left[ \frac{x}{2} - \frac{a}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{a} \cdot x\right) \right]_0^a = 4 A^2 \cdot \frac{a}{2} = 1 \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

## 2 Stationäre Zustände

Damit gilt  $A^2 = \frac{1}{2a}$  und die normierte Wahrscheinlichkeitsdichte lautet

$$w_n(x) = \begin{cases} \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.3.11)$$

Die wesentliche Erkenntnis aus unseren Rechnungen ist, dass die Schrödingergleichung für das eingespernte Teilchen nur für ganz bestimmte Teilchenenergien  $W_n$  eine Lösung hat. Aus (2.3.7) folgt

$$W_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} \cdot n^2 = \frac{h^2}{8m a^2} \cdot n^2 \quad (2.3.12)$$

Für  $n = 0$  ist  $w(x) = 0$ , d.h. es ist überhaupt kein Teilchen vorhanden. Die niedrigste Teilchenenergie ist also  $W_1$ , d.h. es gibt kein eingesperntes, ruhendes Teilchen!!

**Allgemein gilt:**

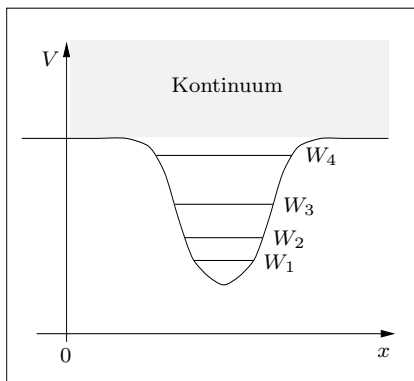


Abb.2.3.2 Energiespektrum

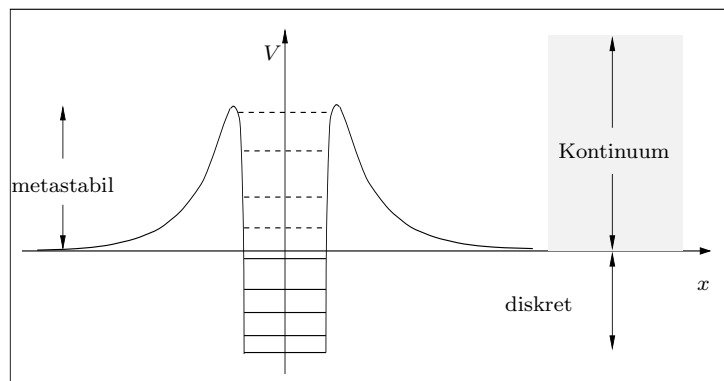


Abb.2.3.3 Metastabile diskrete Zustände neben einem Kontinuum am Beispiel eines  $\alpha$ -Teilchens im Potential des Restkerns

Zu jedem **streng gebundenen Zustand** (Teilchen in einer Potentialmulde mit **unendlich breiten Wänden**) gibt es nur **diskrete** Energiewerte  $W_n$  mit ganzen **Quantenzahlen**  $n$ . Ausserhalb des Bereichs der streng gebundenen Zustände sind alle Energiewerte möglich (freies Teilchen, Kontinuum, siehe Abb. 2.3.2). Aus einem Potentialtopf mit endlich breiten Wänden verschwindet das Teilchen nach einer gewissen Zeit (Tunneleffekt). Es existieren **quasistationäre (metastabile)** Zustände neben einem Kontinuum.

In einem Leiter oder Halbleiter bewegen sich die Elektronen im periodischen Potential der Atomrümpfe. Dadurch verbreitern sich die diskreten Energiewerte zu **Energiebändern**. Im **Valenzband** (unterstes Band in Abb. 2.3.4) sind die Elektronen an die Atomrümpfe gebunden, im Leitungsband sind sie, innerhalb des Metalls, frei beweglich. Die Zahl  $N$  der Elektronen im Leitungsband ist eine Funktion der Temperatur:

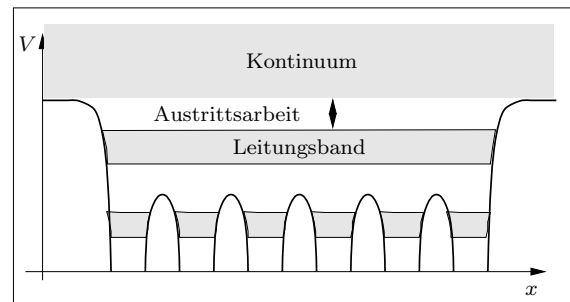


Abb.2.3.4 Energiezustände in einem Leiter

$$N(T) = A \cdot e^{-\frac{B}{T}} \quad \text{mit Konstanten } A \text{ und } B. \quad (2.3.13)$$

## 2 Stationäre Zustände

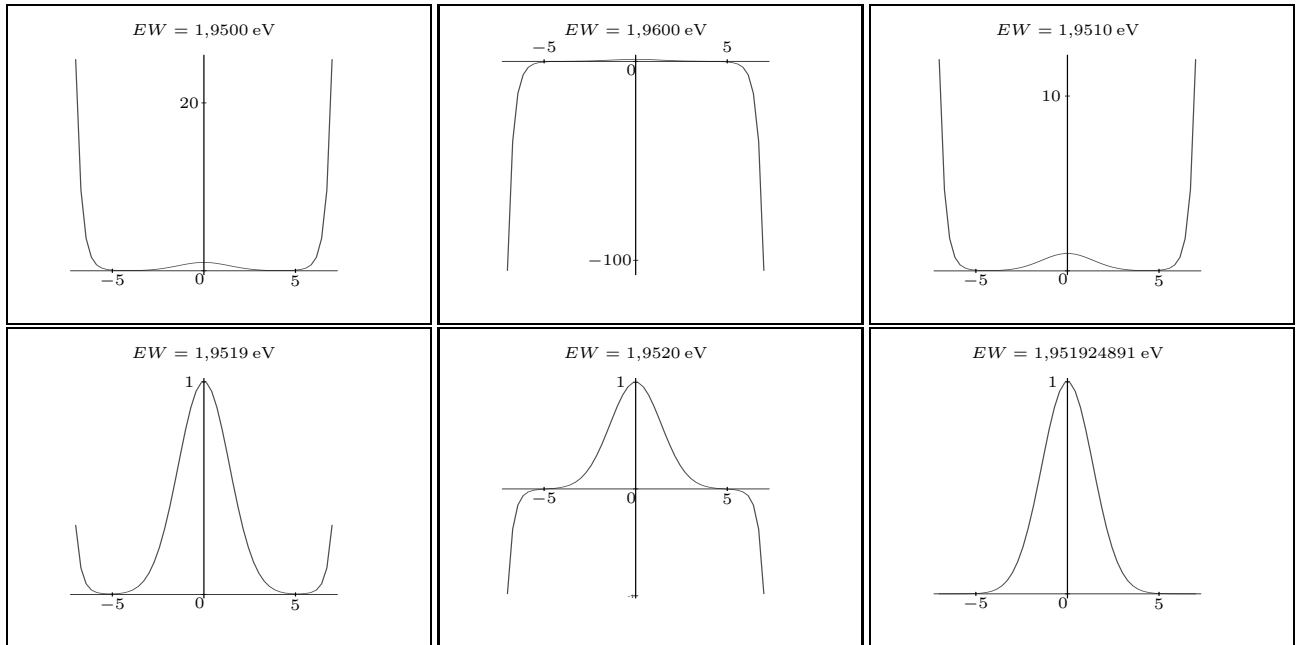


Abb.2.3.5 Schrittweises Annähern an die richtige Wellenfunktion für  $V(x) = x^2$

Zur numerischen Lösung bringt man die Schrödingergleichung

$$\frac{d^2 \psi(X)}{dX^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot [U(X) - W] \cdot \psi(X) \quad (2.3.14)$$

in eine einheitenfreie Form. Für ein Elektron erhält man mit

$$\hbar = 6,5821220 \cdot 10^{-22} \text{ MeV s}, \quad m = 0,51099906 \frac{\text{MeV}}{c^2}, \quad c = 299792458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$X = x \text{ \AA}, \quad \psi(X) = \varphi(x) \frac{1}{\sqrt{\text{\AA}}}, \quad U(X) = V(x) \text{ eV}, \quad W = EW \text{ eV}$$

die einheitenfreie Gleichung (Aufgabe!)

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = B \cdot [V(x) - EW] \cdot \varphi(x) \quad \text{mit} \quad B = 0,2624664482 \quad (2.3.15)$$

Für einen zu  $x = 0$  achsensymmetrischen Potentialtopf muss auch die Wahrscheinlichkeitsdichte  $w(x)$  zu  $x = 0$  achsensymmetrisch sein. Die Wellenfunktion  $\varphi(x)$  ist dann entweder zu  $x = 0$  achsensymmetrisch (**gerade** Funktion) oder zum Ursprung punktsymmetrisch (**ungerade** Funktion). Als Anfangsbedingung wählt man für gerade Funktionen  $\varphi(0) = 1$  und  $\varphi'(0) = 0$ , für ungerade Funktionen  $\varphi(0) = 0$  und  $\varphi'(0) = 1$  ( $\varphi$  ist damit noch nicht normiert).

Um die Normierbarkeit von  $\varphi$  zu gewährleisten, muss  $\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(x) = 0$  gelten. Durch Probieren findet man die richtigen Energiewerte  $EW$  (Eigenwerte), für die  $\varphi$  im Unendlichen verschwindet. Dieses Verfahren ist aber recht zeitaufwendig, da für jeden Versuch die Schrödingergleichung numerisch gelöst werden muss (siehe Abb.2.3.5). Schneller geht es mit dem Newtonverfahren: Für ein genügend großes  $x_0$  berechnet man  $g(EW) = \varphi(x_0)$  und sucht die Lösung von  $g(EW) = 0$ .

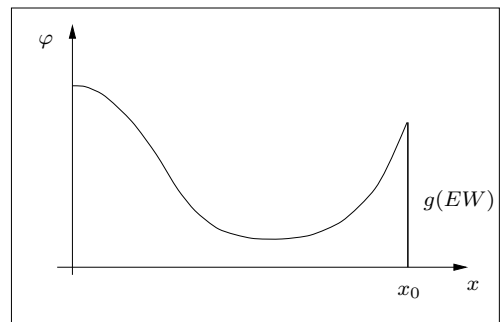


Abb.2.3.6 Newtonverfahren zur EW-Bestimmung

## 2.4 Der Franck-Hertz-Versuch

Franck und Hertz führten 1914 folgenden Versuch durch (siehe Abb.2.4.1): Eine evakuierte Elektronenröhre mit einem Quecksilbertropfen im Inneren wird in einem Ofen erhitzt, um eine Hg-Atmosphäre zu schaffen. Die Spannung  $U$  wird von Null bis ca. 30 V hochgeregelt und dabei der Strom  $I(U)$  mit einem Messverstärker gemessen. Der Verlauf der Funktion  $I(U)$  ist in Abb.2.4.2 dargestellt.

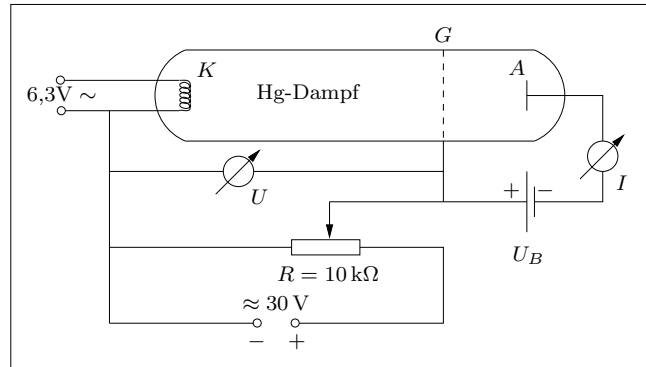


Abb.2.4.1 Franck-Hertz-Versuch

Die Maxima von  $I$  misst man bei

$U$ in V	6,8	11,5	16,2	21,6	26,5
$\Delta U$ in V		4,7	4,7	5,3	4,9

Der Mittelwert von  $\Delta U$  ist

$$\langle \Delta U \rangle = 4,9 \text{ V} \quad (2.4.1)$$

Das Versuchsergebnis kann wie folgt erklärt werden: Die Hg-Atome befinden sich im Grundzustand mit der Energie  $W_0$ , ihr erster angeregter Zustand hat die Energie  $W_1 = W_0 + 4,9 \text{ eV}$ . Elektronen mit einer kinetischen Energie  $W < 4,9 \text{ eV}$  stoßen nur elastisch mit den Hg-Atomen zusammen und verlieren wegen  $m_e \ll m_{\text{Hg}}$  fast keine Energie. Bei  $U = 4,9 \text{ V}$  reicht die ki-

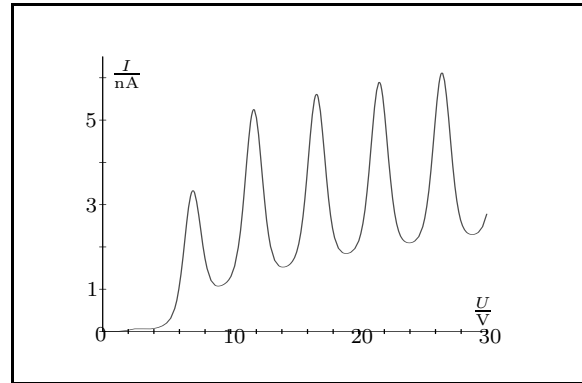


Abb.2.4.2  $I(U)$  beim Franck-Hertz-Versuch

netische Energie der Elektronen aus, um die Hg-Atome in den ersten angeregten Zustand zu versetzen. Dabei verlieren die Elektronen ihre gesamte kinetische Energie und können nicht mehr gegen die Bremsspannung  $U_B$  zwischen Gitter und Anode anlaufen, d.h.  $I$  wird kleiner. Wird  $U$  weiter vergrößert, dann wandert die Zone der unelastischen Stöße vom Gitter weg nach links. Zwischen dieser Zone und dem Gitter nimmt die kinetische Energie der Elektronen wieder zu und der ganze Vorgang wiederholt sich. Der offensichtlich falsche Spannungswert des ersten Maximums ergibt sich aus einer Verschiebung der ganzen  $UI$ -Kurve. Gemessen wird nämlich die Spannung  $U^*$  zwischen Punkten im **Inneren**

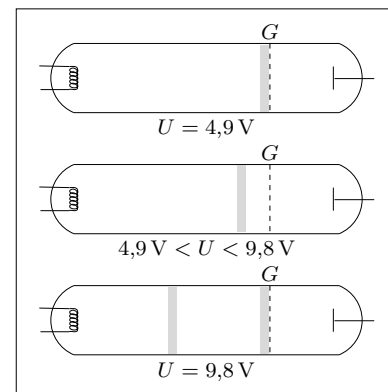


Abb.2.4.3 Zonen der unelastischen Stöße

von Kathode und Gitter. Das Feld zwischen Kathode und Gitter hängt aber von der Spannung  $U$  zwischen den **Oberflächen** der Leiter ab. Da Kathode und Gitter i.a. aus verschiedenen

Materialien bestehen (warum?), unterscheidet sich die tatsächliche Beschleunigungsspannung  $U$  um die Differenz der Austrittsarbeiten der verwendeten Materialien von der gemessenen Spannung  $U^*$ :

$$U^* + A_1 = U + A_2 \quad (2.4.2)$$

und damit

$$U = U^* + A_1 - A_2 \quad (2.4.3)$$

Die genaue Form der  $UI$ -Kurve ergibt sich aus der Röhrenkennlinie ohne Hg-Dampf (siehe Abb.2.4.5) und der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung der aus der Kathode austretenden Glühelktronen.

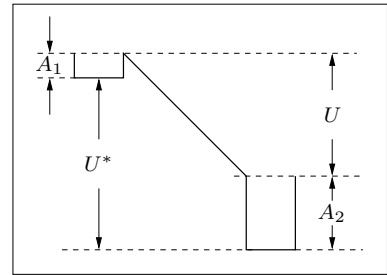


Abb.2.4.4 Die wahre Beschleunigungsspannung  $U$

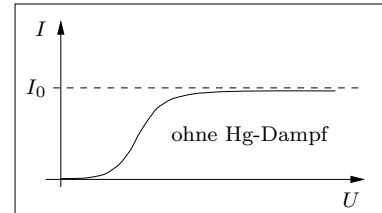


Abb.2.4.5 Röhrenkennlinie

# 3 Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie

## 3.1 Der Übergang zwischen stationären Zuständen - Spektrallinien

Wechselt ein Teilchen von einem stationären Zustand

$$\psi_m = \varphi_m(x) \cdot e^{-i\omega_m t} \quad \text{mit} \quad W_m = \hbar\omega_m = h \cdot f_m \quad (3.1.1)$$

in einen anderen stationären Zustand

$$\psi_n = \varphi_n(x) \cdot e^{-i\omega_n t} \quad \text{mit} \quad W_n = \hbar\omega_n = h \cdot f_n, \quad (3.1.2)$$

dann geschieht dieser Wechsel nicht plötzlich, sondern für kurze Zeit sind beide Zustände gleichzeitig vorhanden. Für den Überlagerungszustand gilt

$$\psi = \psi_m + \psi_n = \varphi_m(x) \cdot e^{-i\omega_m t} + \varphi_n(x) \cdot e^{-i\omega_n t} \quad (3.1.3)$$

und die Wahrscheinlichkeitsdichte des Überlagerungszustandes ist damit

$$\begin{aligned} w(x, t) &= |\psi|^2 = \psi \cdot \psi^* = \\ &= (\varphi_m \cdot e^{-i\omega_m t} + \varphi_n \cdot e^{-i\omega_n t}) \cdot (\varphi_m^* \cdot e^{i\omega_m t} + \varphi_n^* \cdot e^{i\omega_n t}) = \\ &= |\varphi_m|^2 + |\varphi_n|^2 + \varphi_m \varphi_n^* \cdot e^{-i(\omega_m - \omega_n)t} + \varphi_m^* \varphi_n \cdot e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte oszilliert also im Übergangszustand mit der Frequenz

$$f_{mn} = \frac{\omega_{mn}}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} |\omega_m - \omega_n| = |f_m - f_n| \quad (3.1.5)$$

Bei einem geladenen Teilchen ist die Ladungsdichte  $\rho$  zur Wahrscheinlichkeitsdichte  $w$  proportional. Beim Übergang  $\psi_m \rightarrow \psi_n$  mit  $W_m > W_n$  ( $f_m > f_n$ ) schwingt also die Ladungsverteilung mit der Frequenz  $f_{mn}$ , d.h. es wird eine elektromagnetische Welle der Frequenz  $f_{mn}$  ausgestrahlt. Die Gesamtenergie der bei einem Übergang ausgestrahlten Welle ist nach dem Energiesatz

$$W_{mn} = W_m - W_n = h(f_m - f_n) = h \cdot f_{mn} \quad (3.1.6)$$

Fällt umgekehrt eine elektromagnetische Welle der Frequenz  $f$  auf ein geladenes Teilchen im Zustand  $\psi_n$  (z.B. auf ein Elektron in einem Atom) und ist  $f$  gleich einer der „**Resonanzfrequenzen**“  $f_{mn}$ , dann wird der Mischzustand  $\psi_m + \psi_n$  angeregt und das Teilchen geht mit der **Übergangswahrscheinlichkeit**  $P_{mn}$  in den Zustand  $\psi_m$  über. Dabei wird der Welle die Energie  $W_{mn} = h \cdot f_{mn}$  entzogen. Die Berechnung von  $P_{mn}$  erfolgt mit der **quantenmechanischen Störungsrechnung**, würde hier aber zu weit führen.

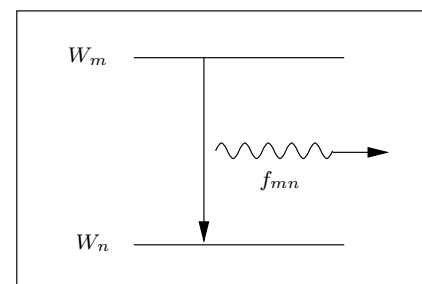


Abb.3.1.1 Übergang mit Strahlung

Es folgt eine Zusammenfassung der bisherigen Ergebnisse:

Ein Atom (oder ein anderer quantenmechanischer Zustand) mit den Energieeigenwerten $W_\nu$ , $\nu \in \mathbb{N}_0$ , kann nur Licht absorbieren oder ausstrahlen, dessen Frequenz gleich einer der Resonanzfrequenzen	(3.1.7)
$f_{mn} = \frac{1}{h} (W_m - W_n)$	
ist.	

Ein Atom (oder ein anderer quantenmechanischer Zustand) kann aus einem elektromagnetischen Wellenfeld der Frequenz $f$ nur den Energiebetrag	(3.1.8)
$W = h f$	
aufnehmen.	

Die Energie eines von Atomen ausgesandten elektromagnetischen Wellenfeldes der Frequenz $f$ ist ein ganzzahliges Vielfaches von	(3.1.9)
$h f = \hbar \omega$	

Mit der Wellenlänge

$$\lambda_{mn} = \frac{c}{f_{mn}} \tag{3.1.10}$$

der ausgesandten bzw. absorbierten Strahlung gilt

$W_m - W_n = h \cdot f_{mn} = \frac{h c}{\lambda_{mn}}$	(3.1.11)
---	----------

**(Bohr'sche Frequenzbedingung)**

Die Wellenlängen  $\lambda_{mn}$  können mit Prismen- oder Gitterspektrometern sehr genau gemessen werden. Die optische Untersuchung von Spektren ist also mit Hilfe von (3.1.11) der experimentelle Weg zur Bestimmung der Energiedifferenzen  $W_m - W_n$ . Tritt Licht, das von leuchtenden Gasen (also von **wechselwirkungsfreien** Atomen) ausgesandt wird, durch ein Gitter, dann beobachtet man einzelne, scharf begrenzte **Spektrallinien**. Jeder Spektrallinie ist eindeutig eine Wellenlänge zugeordnet. Wegen (3.1.11) sind somit die Linienspektren eine direkte experimentelle Bestätigung für die Existenz diskreter Energiewerte von Atomen.

Wir betrachten jetzt den Mechanismus der Lichtentstehung etwas genauer:

Einem Atom im Grundzustand ( $W_0$ ) wird die Energie  $W_{m0}$  zugeführt, das Atom hat dann die Energie  $W_m$ . Die Energiezufuhr geschieht durch Stöße mit anderen Atomen (Wärmebewegung, Glühlampe), durch Stöße mit Elektronen (Leuchtstoffröhre, Bildschirm) oder durch Licht (Resonanzfluoreszenz). Die angeregten Zustände eines Atoms haben meistens eine sehr kurze Lebensdauer  $\tau$  in der Größenordnung von  $10^{-8}$  s. Nach dieser kurzen Zeit gibt das Atom seine Anregungsenergie in einem ein- oder mehrstufigen Prozess in Form von elektromagnetischer Strahlung wieder ab.



Einen Überblick über alle möglichen Frequenzen, die ein quantenmechanisches System ausstrahlen oder absorbieren kann, erhält man mit einem sogenannten Termschema (siehe Abb. 3.1.2).

Mit Hilfe der **Spektralanalyse** können die Bestandteile sehr kleiner Proben eines Stoffes ermittelt werden. In einer elektrischen Funkenstrecke z.B. kann die Probe in ein leuchtendes Gas verwandelt und sein Spektrum untersucht werden.

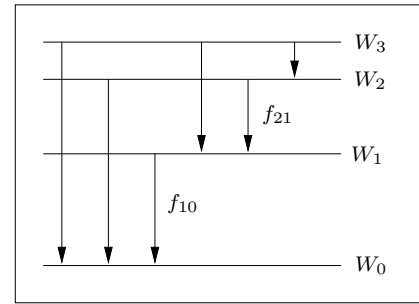


Abb.3.1.2 Termschema

**Ein Versuch zur Resonanzabsorption:**

Das Licht einer Natriumdampflampe wird von einem Spektrometer in seine Bestandteile zerlegt. Man beobachtet eine intensive gelbe Linie bei  $\lambda = 589 \text{ nm}$ . Anschließend ersetzt man die Natriumdampflampe durch eine Kohlenbogenlampe, die weißes Licht ausstrahlt. Bringt man Natriumdampf in den Strahlengang, dann fehlt im kontinuierlichen Spektrum der Bogenlampe genau die gelbe Natriumlinie bei  $\lambda = 589 \text{ nm}$ ,

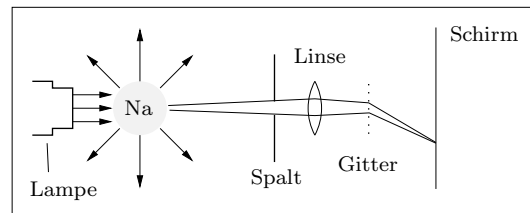


Abb.3.1.3 Spektrometer

Statt des Gitters kann auch ein Geradsichtprisma verwendet werden

d.h. an dieser Stelle ist eine schwarze Linie zu erkennen (**Umkehrung der Natriumlinie**). Das Licht mit  $\lambda = 589 \text{ nm}$  regt die Na-Atome an, die es dann **isotrop** wieder abstrahlen, d.h. am Ort des Spalts ist diese Wellenlänge nur mit geringer Intensität vertreten (**Resonanzstreuung**). Das ist ein direkter Beweis für die **Resonanzabsorption**.

Als **Absorptionsspektrum** bezeichnet man ein Spektrum weißen Lichtes mit schwarzen Absorptionslinien. Die Absorptionslinien im Sonnenspektrum werden nach ihrem Entdecker **Fraunhoferlinien** genannt (J. Fraunhofer, 1814, Straubing). Die Fraunhoferlinien geben Aufschluss über die Elemente, die in der Sonnenatmosphäre vorkommen.

Als weiteres Beispiel unserer Theorie der Lichtenstehung betrachten wir die prinzipielle Funktionsweise eines **Lasers** (**L**ight **A**mplifier by **S**timulated **E**mission of **R**adiation):

Ein Atom befinde sich im Energiezustand  $W_n$ . Die Wahrscheinlichkeit für den spontanen Übergang in den Grundzustand ist  $P_{n0}$ . Wird das Atom im Zustand  $W_n$  von einer elektromagnetischen Welle der Frequenz  $f_{n0} = \frac{W_n - W_0}{h}$  getroffen, dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit  $S_{n0}$  in den Grundzustand viel größer als  $P_{n0}$  (**stimulierte Emission**).

Man verwendet eine Atomsorte, für die

$$P_{mn} \gg P_{n0} \quad (3.1.12)$$

ist und die eine nicht zu kleine Wahrscheinlichkeit  $P_{mn}$  für den Übergang von  $W_m \rightarrow W_n$  haben. Werden die Atome mit Licht der Frequenz

$$f_{m0} = \frac{W_m - W_0}{h} \quad (3.1.13)$$

bestrahlt, dann gehen die Atome zunächst in den Zustand  $W_m$  über. Wegen (3.1.12) gibt es mit der Zeit

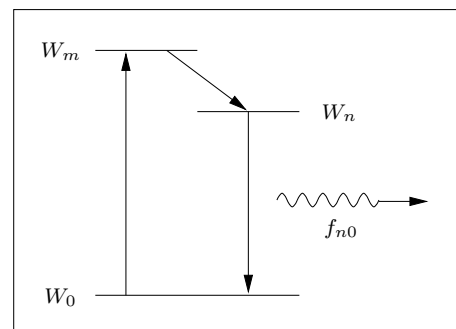


Abb.3.1.4 Prinzip des Lasers

immer mehr Atome im Zustand  $W_n$  (**optisches Pumpen**). Jetzt werden die angeregten Atome

mit Licht der Frequenz

$$f_{n0} = \frac{W_n - W_0}{h} \quad (3.1.14)$$

bestrahlt. Schlagartig nimmt die Wahrscheinlichkeit für den Übergang nach  $W_0$  zu (aus  $P_{n0}$  wird  $S_{n0}$ ) und alle Atome strahlen fast gleichzeitig eine Welle der Frequenz  $f_{n0}$  ab (Zünden des Lasers).

Wir betrachten den Zündvorgang des Lasers etwas genauer: Die einfallende Welle trifft zur Zeit  $t_1$  auf das Atom  $A_1$  und zur Zeit

$$t_2 = t_1 + \frac{x}{c} \quad (3.1.15)$$

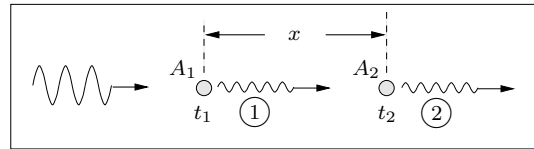


Abb.3.1.5 Zünden des Lasers

auf das Atom  $A_2$ . Die von den Atomen ausgestrahlten Wellen stehen in einer festen Phasenbeziehung zur einfallenden Welle und haben als bevorzugte Richtung die Richtung der auslösenden Welle. Die von  $A_1$  ausgestrahlte Welle ① trifft gleichzeitig mit der auslösenden Welle auf  $A_2$ , d.h. ① und ② sind gleichphasig.

Der Laser sendet monochromatisches, über große Raumbereiche gleichphasiges (**kohärentes**) Licht aus.

Die Kohärenz des Laserlichts ist von viel größerer Bedeutung als die hohen Energiedichten, die ein gepulster Laser erzeugen kann.

### 3.2 Die Lichtquantenhypothese

Die Aussagen (3.1.7), (3.1.8) und (3.1.9) können auch durch folgende Hypothese gedeutet werden:

Eine elektromagnetische Welle der Frequenz  $f$  ist in Portionen der Energie

$$W = h \cdot f, \quad (3.2.1)$$

die sogenannten **Lichtteilchen**, **Lichtquanten** oder **Photonen**, aufgeteilt.

Die dynamische Masse eines Photons wäre dann

$$\mu = \frac{W}{c^2} = \frac{h f}{c^2}, \quad (3.2.2)$$

sein Impuls

$$p = \mu c = \frac{W}{c} = \frac{h f}{c}. \quad (3.2.3)$$

Für elektromagnetische Wellen gilt

$$c = f \cdot \lambda \quad \text{oder} \quad \omega = c \cdot k \quad (3.2.4)$$

woraus

$$p = \frac{h f}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{2 \pi \hbar}{\lambda} = \hbar k \quad (3.2.5)$$

folgt. Für Photonen gelten also die Planck-Relation und die de Broglie-Relation genauso wie für Materieteilchen.

$$\mu = \frac{m}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \Rightarrow \quad m = \mu \sqrt{1 - \beta^2} = \mu \sqrt{1 - \frac{c^2}{c^2}} = 0 \quad (3.2.6)$$

d.h.

$$\text{Photonen haben die Masse } m = 0 \quad (3.2.7)$$

Aus (3.2.4) folgt für die Gruppengeschwindigkeit der Photonen

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = c \quad (3.2.8)$$

Licht der Frequenz  $f$  **besteht** aus kleinen Teilchen der Energie  
 $W = hf$  mit dem Impuls  $p = \frac{hf}{c}$ .

(3.2.9)

(Naives Photonenbild)

In Materie ist die Lichtgeschwindigkeit kleiner als  $c$  und daher können in Materie nach dem naiven Photonenbild überhaupt keine Photonen existieren, da wegen  $m = 0$  auch  $W = 0$  und damit  $f = 0$  gelten würde. Das naive Photonenbild ist also sicher noch keine vollständige physikalische Theorie.

### 3.3 Der Compton-Effekt

1919 bis 1923 untersuchte A.H. Compton die Streuung von Röntgenstrahlung der Frequenz  $f$  an freien Elektronen. Als „freie“ Elektronen verwendete er sehr lose an Atome gebundene Elektronen mit einer Ionisierungsenergie  $A$ , die sehr klein gegen die Energie  $W_\gamma$  der einfallenden Photonen war. Compton fand heraus, dass die Frequenz  $f'$  der gestreuten Photonen vom Streuwinkel  $\varphi$  abhängt. Um eine Formel für die Wellenlänge der gestreuten  $\gamma$ -Quanten zu erhalten, benutzen wir das naive Photonenbild, d.h. wir betrachten die Photonen als kleine Teilchen mit der Energie  $W = hf$  und dem Impuls  $p = \frac{hf}{c}$ . Mit der kinetischen Energie  $W_e$  und dem Impuls  $\vec{p}_e$  des Elektrons nach dem Stoß gilt

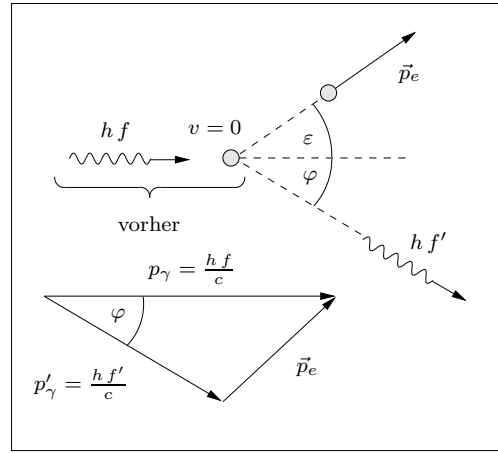


Abb.3.3.1 Compton-Streuung

Energiesatz:  $hf = hf' + W_e \implies hf - hf' = W_e \quad (3.3.1)$

Impulssatz:  $\vec{p}_\gamma = \vec{p}'_\gamma + \vec{p}_e \implies \vec{p}_\gamma - \vec{p}'_\gamma = \vec{p}_e \quad (3.3.2)$

Quadrieren von (3.3.1) und (3.3.2) ergibt mit  $\vec{p}_\gamma \vec{p}'_\gamma = p_\gamma p'_\gamma \cos \varphi$

$$h^2 f^2 + h^2 f'^2 - 2h^2 f f' \cos \varphi = p_e^2 c^2 \quad (3.3.3)$$

$$h^2 f^2 + h^2 f'^2 - 2h^2 f f' = W_e^2 \quad (3.3.4)$$

(3.3.3) - (3.3.4):

$$2h^2 f f' (1 - \cos \varphi) = p_e^2 c^2 - W_e^2 \quad (3.3.5)$$

Mit der Energie-Impuls-Relation folgt

$$p_e^2 c^2 = W^2 - W_0^2 = (W - W_0)(W + W_0) = W_e(2W_0 + W_e) \quad (3.3.6)$$

Einsetzen von (3.3.6) in (3.3.5):

$$2 h^2 f f' (1 - \cos \varphi) = 2 W_0 W_e = 2 W_0 h (f - f') \quad (3.3.7)$$

$$h f f' (1 - \cos \varphi) = W_0 (f - f') \quad (3.3.8)$$

$$f' [h f (1 - \cos \varphi) + W_0] = W_0 f \quad (3.3.9)$$

$$\frac{1}{f'} = \frac{h f (1 - \cos \varphi) + W_0}{W_0 f} \quad (3.3.10)$$

$$\lambda' = \frac{c}{f'} = \frac{h c}{W_0} (1 - \cos \varphi) + \frac{c}{f} \quad (3.3.11)$$

$$\lambda' = \frac{h c}{W_0} (1 - \cos \varphi) + \lambda \quad (3.3.12)$$

Die Differenz der Wellenlängen von Streustrahlung und einfallender Strahlung ist somit

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \varphi) = \lambda_C (1 - \cos \varphi) \quad (3.3.13)$$

mit der **Compton-Wellenlänge** des Elektrons

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = 2,42631 \cdot 10^{-12} \text{ m} \quad (3.3.14)$$

Ein Photon mit der Wellenlänge  $\lambda_C$  hat die Energie

$$W_C = h f_C = \frac{h c}{\lambda_C} = m_e c^2 \quad (3.3.15)$$

**Merkregel:**

$$\boxed{\text{Die Compton-Wellenlänge eines Teilchens ist gleich der Wellenlänge eines Photons, dessen Energie gleich der Ruhenergie des Teilchens ist.}} \quad (3.3.16)$$

(3.3.13) stimmt ausgezeichnet mit der Erfahrung überein, d.h. unser Ausgangspunkt der Rechnung, das „naive Photonenbild“, führt auf die richtige Funktion  $f'(\varphi)$ . Mit der Kenntnis von  $f'$  bzw.  $\lambda'$  in Abhängigkeit von  $\varphi$  ist aber der Versuchsausgang noch nicht vollständig beschrieben, da noch nicht bekannt ist, wie viele Photonen in die Richtung zwischen  $\varphi$  und  $\varphi + d\varphi$  gestreut werden. Unser „naives Photonenbild“ gibt uns keine Handhabe zur Berechnung der Intensitätsverteilung  $I(\varphi)$  der Streustrahlung. Im Jahre 1928 gelang es aber KLEIN und NISHINA,  $I(\varphi)$  mit Hilfe der **Dirac-Gleichung**, einer relativistischen Verallgemeinerung der Schrödingergleichung, zu berechnen. Klein und Nishina verwendeten als Ausgangspunkt ihrer sehr langwierigen Rechnung die **quantenmechanische Theorie des Elektrons** (Dirac-Gleichung) und die **klassische Theorie des elektromagnetischen Feldes** (Maxwell); diese Kombination heißt **semiklassische Theorie**:

$$\boxed{\text{Schrödinger (bzw. Dirac) + Maxwell = semiklassische Theorie}}$$

(3.3.13) kann auch mit der semiklassischen Theorie hergeleitet werden, doch übersteigt das den uns gesteckten Rahmen (siehe z.B. Döring, Atomphysik und Quantenmechanik I, S.302-306).

$dP = w(\varphi) d\varphi$  sei die Wahrscheinlichkeit, dass ein mit dem Elektron wechselwirkendes Photon in den Winkelbereich zwischen  $\varphi$  und  $\varphi+d\varphi$  gestreut wird. Abb.3.3.2 zeigt die von Klein und Nishina berechnete Funktion  $w(\varphi)$  als Polardiagramm, wobei die Richtung der waagrechten Achse  $\varphi = 0$  entspricht.

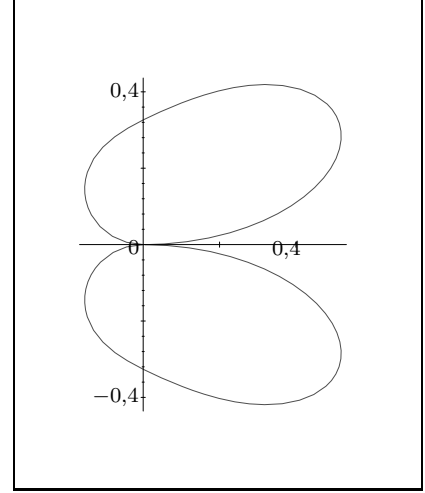


Abb.3.3.2  $w(\varphi)$

Für die Rückstoßenergie des Elektrons gilt nach (3.3.1)

$$W_e = \frac{hc}{\lambda} - \frac{hc}{\lambda'} = hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda + \Delta\lambda} \right) \quad (3.3.17)$$

Mit (3.3.13) erhält man die Elektronenenergie in Abhängigkeit vom Streuwinkel  $\varphi$  des Photons:

$$W_e = hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda + \lambda_C (1 - \cos \varphi)} \right) \quad (3.3.18)$$

$W_e$  ist maximal, wenn der zweite Bruch in (3.3.18) minimal ist, d.h. für  $\cos \varphi = -1$ :

$$\boxed{W_{e,\max} = hc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda + 2\lambda_C} \right)} \quad (3.3.19)$$

Um die Richtung zu bestimmen ( $\varepsilon$  in Abb.3.3.1), in die die Elektronen davonfliegen, setzen wir den Impulssatz vektoriell an:

$$\begin{pmatrix} \frac{hf}{c} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{hf'}{c} \cos \varphi \\ -\frac{hf'}{c} \sin \varphi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_e \cos \varepsilon \\ p_e \sin \varepsilon \end{pmatrix} \quad (3.3.20)$$

$$p_e \cos \varepsilon = \frac{hf}{c} - \frac{hf'}{c} \cos \varphi \quad (3.3.21)$$

$$p_e \sin \varepsilon = \frac{hf'}{c} \sin \varphi \quad (3.3.22)$$

$$\tan \varepsilon = \frac{f' \sin \varphi}{f - f' \cos \varphi} \quad (3.3.23)$$

Mit

$$f' = \frac{c}{\lambda'} = \frac{c}{\lambda + \lambda_C (1 - \cos \varphi)} \quad (3.3.24)$$

folgt aus (3.3.23)

$$\begin{aligned} \tan \varepsilon &= \frac{\sin \varphi}{\frac{f}{f'} - \cos \varphi} = \frac{\sin \varphi}{\frac{f [\lambda + \lambda_C (1 - \cos \varphi)]}{c} - \cos \varphi} = \\ &= \frac{\sin \varphi}{(1 - \cos \varphi) \left( 1 + \frac{\lambda_C}{\lambda} \right)} = \frac{1}{\frac{1 - \cos \varphi}{\sin \varphi} \left( 1 + \frac{\lambda_C}{\lambda} \right)} \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

Mit der trigonometrischen Umformung

$$\tan \frac{x}{2} = \sqrt{\frac{1 - \cos x}{1 + \cos x}} = \frac{1 - \cos x}{\sin x} \quad (3.3.26)$$

folgt aus (3.3.25)

$$\tan \varepsilon = \frac{1}{\left(1 + \frac{\lambda_C}{\lambda}\right) \cdot \tan \frac{\varphi}{2}} \quad (3.3.27)$$

Abb.3.3.3 zeigt den prinzipiellen Versuchsaufbau und die gemessene Intensität der Streustrahlung für einen festen Streuwinkel  $\varphi$  in Abhängigkeit von der Frequenz. Neben der Frequenz  $f'$  nach der Compton-Formel findet man auch gestreute Photonen mit der Frequenz  $f$  der einfallenden Strahlung. Für diese Photonen dient nicht ein einzelnes Elektron, sondern ein vollständiges Atom (bei Gasen) oder sogar der ganze Festkörper als Streupartner. Die Rechnung verläuft in diesem Fall genauso wie bei der Streuung an einem Elektron, im Ergebnis (3.3.13) ist aber die Masse des jeweiligen Streupartners in die Comptonwellenlänge  $\lambda_C$  einzusetzen. Da eine Atommasse oder gar die Masse des ganzen Körpers um einige Zehnerpotenzen größer ist als die Elektronenmasse, ist  $\lambda_C$  und somit auch  $\Delta\lambda$  um diesen Faktor kleiner als die entsprechende Größe bei der Streuung am Elektron. Die Frequenz des gestreuten Photons ist also fast gleich  $f$ . Die Wahrscheinlichkeit dafür, welcher Kanal der Wechselwirkung vom Photon gewählt wird, hängt davon ab, wie stark das Elektron an das Restatom gebunden ist. Bei Atomen niedriger Ordnungszahl ist die Bindung der Elektronen schwächer als bei Atomen hoher Ordnungszahl und damit die Wahrscheinlichkeit für die Streuung am einzelnen Elektron höher.

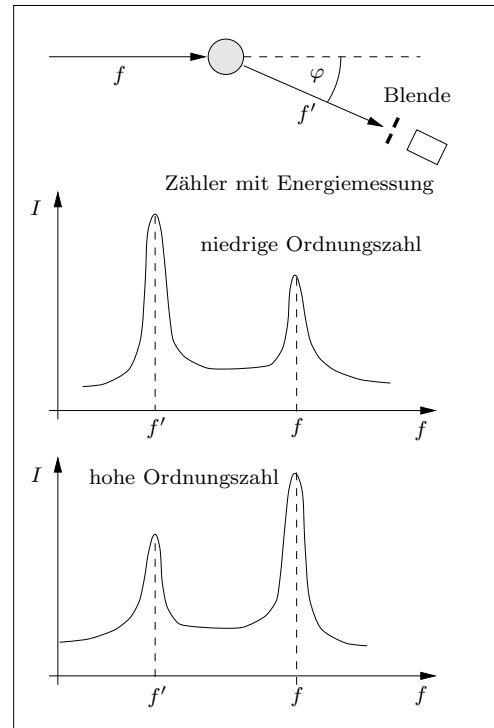
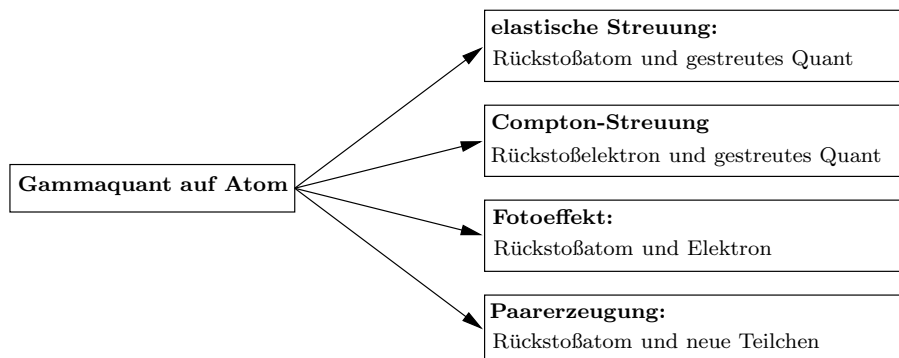


Abb.3.3.3 Experimentelle Untersuchung der Compton-Streuung

Die Streuung am ganzen Atom oder am Festkörper nennt man auch **elastische Streuung**, weil sich die Frequenz und damit die Energie des Photons fast nicht ändert. Neben der Compton-Streuung und der elastischen Streuung kann das einfallende Photon auch vom Atom absorbiert werden und seine ganze Energie abgeben (**Fotoeffekt**, siehe nächstes Kapitel). Bei genügend hoher Energie des Gammaquants können im Feld des Kerns auch neue Teilchen erzeugt werden (**Paarerzeugung**).

**Überblick über die wichtigsten Wechselwirkungen von Photonen mit Atomen:**



### 3.4 Der Fotoeffekt

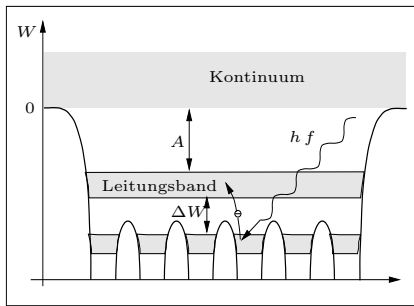


Abb.3.4.1 **Innerer Fotoeffekt**  
Anheben von Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband. Der elektrische Widerstand sinkt also bei Lichteinfall (**Fotowiderstand**).

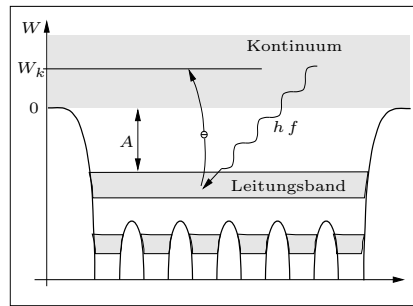


Abb.3.4.2 **Äußerer Fotoeffekt**  
Anheben von Elektronen aus dem Leitungsband ins Kontinuum (Ablösen von Elektronen aus dem Metall).  $A$  heißt **Austrittsarbeit** oder **Ablösearbeit**.

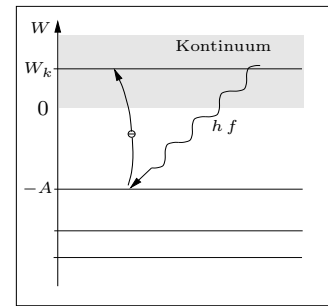


Abb.3.4.3 **Fotoionisation**  
Ablösung eines Elektrons von einem freien Atom.  $A$  heißt hier **Ionisierungsenergie**.

Ablösen von Elektronen aus einem Festkörper oder von einem Atom oder das Anheben von Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband bei einem Leiter oder Halbleiter bezeichnet man als **Fotoeffekt**, wenn dabei das auslösende Photon seine ganze Energie abgibt (kein gestreutes Photon wie beim Compton-Effekt).

Zur Untersuchung des äußeren Fotoeffekts verwendet man eine Fozelle (siehe Abb.3.4.4):

Eine großflächige Cäsiumkathode und ein Leiterring befinden sich in einem evakuierten Glasgefäß. Wird die Kathode mit Licht bestrahlt, treffen die austretenden Elektronen (**Fotoelektronen**) zum Teil auf den Leiterring und es fließt ein Fotostrom zwischen den Kontakten 1 und 2. Die Fozelle ist bei Lichteinfall eine Stromquelle.

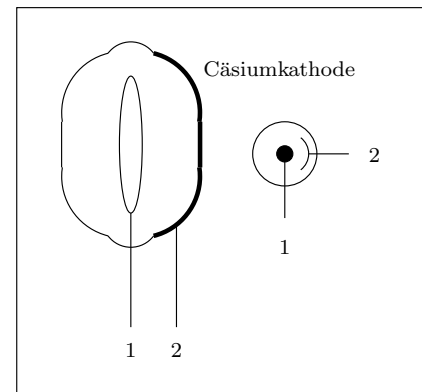


Abb.3.4.4 Fozelle mit Schaltbild

Es folgt eine Zusammenstellung einiger Versuche zum Fotoeffekt mit deren Ergebnissen:

Eine negativ geladene und fein abgeschmirgelte Zinkplatte (Entfernen der Oxydschicht), die auf ein Elektroskop zum Anzeigen der Ladung gesteckt ist, wird mit dem Licht einer Hg-Lampe bestrahlt: Die Platte entlädt sich. Wird der Versuch mit einer positiv geladenen Platte wiederholt, wird keine Entladung festgestellt.

$$\boxed{\text{Licht löst Elektronen von Metall ab (**Hallwachs-Effekt**)} .} \quad (3.4.1)$$

Wird der Abstand der Lichtquelle zu einer Fozelle verdoppelt, sinkt der Fotostrom auf ein Viertel. Daraus folgt

$$\boxed{\text{Der Fotostrom und damit die Zahl der abgelösten Elektronen ist zur Intensität des einfallenden Lichtes proportional.}} \quad (3.4.2)$$

Die Messung des Fotostroms mit einem Oszilloskop extrem hoher Zeitauflösung ( $\Delta t \leq 10^{-8}$  s) ergibt:

$$\boxed{\text{Der Fotostrom setzt praktisch sofort mit der Bestrahlung ein.}} \quad (3.4.3)$$

### 3 Wechselwirkung von elektrom. Strahlung mit Materie

Die maximale kinetische Energie der Fotoelektronen wird mit der **Gegenfeldmethode** gemessen (siehe Abb.3.4.5):

Mit geeigneten Filtern (farbige Gläser) werden der Reihe nach die Wellenlängen des Hg-Spektrums einer Quecksilberdampf-Hochdrucklampe ausge-

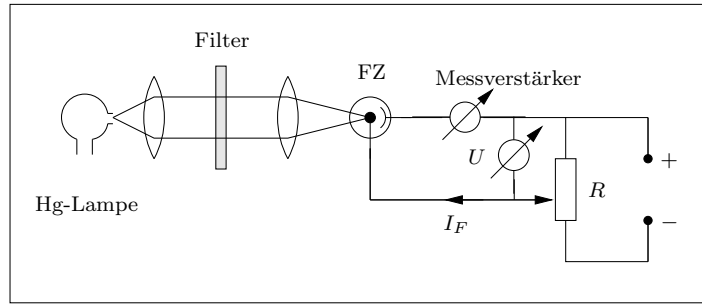


Abb.3.4.5 Gegenfeldmethode

sieht und damit eine Fotozelle bestrahlt. Zwischen die Kathode und die Anode der Fotozelle wird eine Gegenspannung  $U$  gelegt, die von den Fotoelektronen überwunden werden muss. Man stellt  $U$  so ein, dass der Fotostrom  $I_F$  gerade verschwindet ( $U = U_0$ ). In diesem Fall erreichen auch die schnellsten und unter dem günstigsten Winkel ausgetretenen Elektronen die Anode nicht mehr. Die maximale kinetische Energie der Fotoelektronen ist also  $W_k = e \cdot U_0$ .

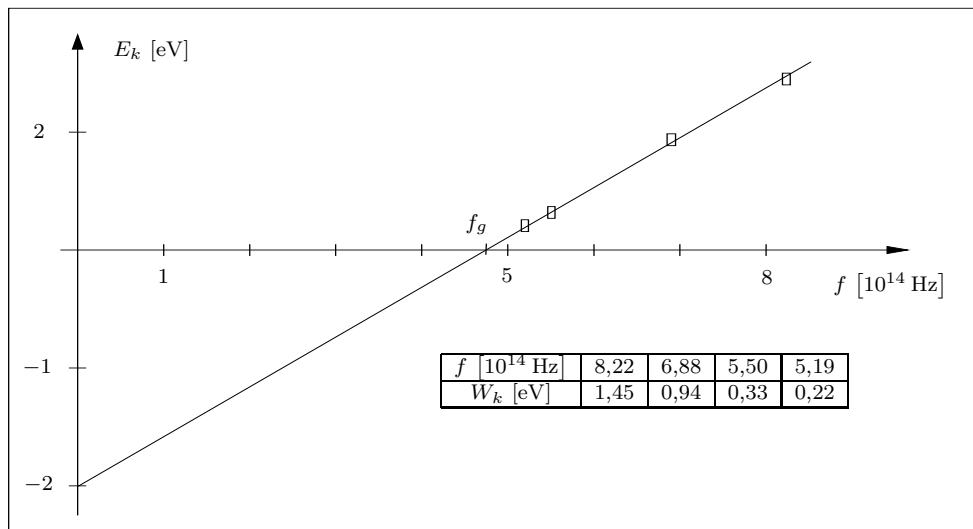


Abb.3.4.6 Gegenfeldmethode (Versuchsergebnis)

Der Versuch mit der Gegenfeldmethode liefert folgende Ergebnisse:

Die kinetische Energie hängt nicht von der Intensität, sondern nur von der Frequenz der einfallenden Strahlung ab. (3.4.4)

Es existiert eine materialabhängige Grenzfrequenz  $f_g$ ; für Licht mit einer kleineren Frequenz gibt es keine Fotoelektronen. (3.4.5)

Für die kinetische Energie der Fotoelektronen gilt

$$W_k = h f - A \quad (3.4.6)$$

(Lichtelektrische Gleichung; Einstein, Lenard, 1905)

Man beachte, dass (3.4.6) vor der Entdeckung der Quantenmechanik gefunden wurde. Mit unserem Kenntnisstand ist diese Gleichung eine triviale Anwendung des Energiesatzes und der Bohr'schen Frequenzbedingung, für Einstein hingegen war das Aufstellen dieser Gleichung eine radikale Abkehr von der klassischen Theorie des Lichtes (Maxwell). Für uns ist das in Abb.3.4.6 dargestellte Versuchsergebnis eine schöne Bestätigung unserer bisherigen Theorie und eine weitere Methode der experimentellen  $h$ -Bestimmung (Steigung der Geraden durch die Messwerte).



### 3 Wechselwirkung von elektrom. Strahlung mit Materie

Außerdem folgt aus dem Versuch die Austrittsarbeit  $A$  des verwendeten Kathodenmaterials der Fotozelle.

1931 untersuchte **Chaffee** die Winkelabhängigkeit der Intensitätsverteilung der Fotoelektronen. Das Versuchsergebnis (siehe Abb.3.4.8) steht im Widerspruch zu der Verteilung, die man nach dem naiven Photonenbild erwarten würde (siehe Abb.3.4.7).

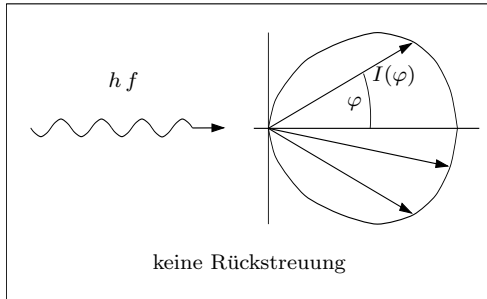


Abb.3.4.7 Naives Photonenbild

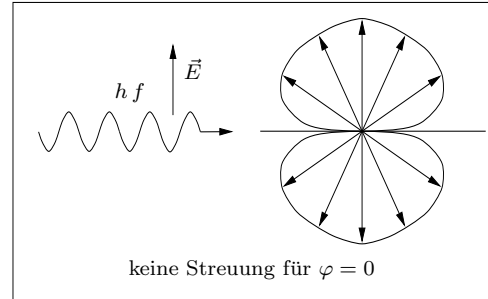


Abb.3.4.8 Semiklassische Theorie

Die **klassische Physik** (Newton und Maxwell) kann das Auftreten von Fotoelektronen erklären (erzwungene Schwingung der Elektronen im Feld der einfallenden Welle), doch wäre die Amplitude der Schwingung und somit auch die Energie des Elektrons von der Amplitude und damit der Intensität des einfallenden Lichtes abhängig (Widerspruch zu (3.4.4)). In der folgenden Tabelle ist zusammengestellt, welche Theorie welches Versuchsergebnis erklärt:

Versuch	(3.4.1)	(3.4.2)	(3.4.3)	(3.4.4)	(3.4.5)	(3.4.6)	$I(\varphi)$
klassisch	ja	ja	nein	nein	nein	nein	ja
„naives Photon“	ja	ja	ja	ja	ja	ja	nein
semiklassisch	ja	ja	ja	ja	ja	ja	ja

Die Versuche entscheiden eindeutig zugunsten der **semiklassischen Theorie!**

### 3.5 Der Wirkungsquerschnitt

Will man z.B. die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Comptoneffektes in Abhängigkeit von der Wellenlänge der einfallenden Strahlung messen, dann lässt man eine Strahlung der Intensität  $I_0$  und der Wellenlänge  $\lambda$  auf einen Körper, das sogenannte **Target** (Ziel), fallen und misst, gegebenenfalls in Abhängigkeit von der Richtung, die Intensität der gestreuten Strahlung.

Die meisten experimentellen Ergebnisse der Quantenmechanik und der Elementarteilchenphysik werden durch Streuexperimente dieser Art gefunden.

$N_0$  Teilchen, die sich im Zustand  $Z_0$  befinden, durchdringen ein sehr dünnes Target der Fläche  $A$  und der Dicke  $dx$ .

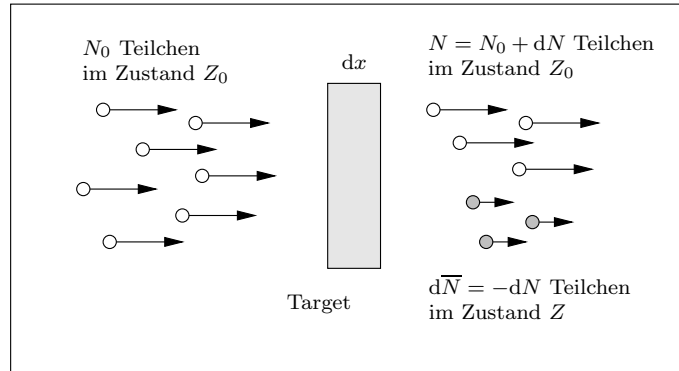


Abb.3.5.1 Streuexperiment

- $\rho$  : Dichte des Targetmaterials
- $dn$  : Zahl der Teilchen (Atome, Moleküle) im Target
- $M$  : Masse der Targetatome
- $dm$  : Masse des Targets
- $z$  : Teilchendichte des Targets

$$dm = M \cdot dn = \rho \cdot dV = \rho A dx \quad (3.5.1)$$

$$z = \frac{dn}{dV} = \frac{\rho}{M} \quad (3.5.2)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen beim Durchgang durch das Target vom Zustand  $Z_0$  in den Zustand  $Z$  übergeht, ist

$$P = \frac{d\bar{N}}{N_0} \quad (3.5.3)$$

Zu jedem Atom des Targets denken wir uns eine auf der Flugrichtung der Teilchen senkrecht stehende Querschnittsfläche  $\sigma$ .  $\sigma$  muss nichts mit der „geometrischen“ Fläche des Atoms zu tun haben. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen beim Durchgang durch das Target mindestens eine der gedachten Querschnittsflächen trifft, ist

$$P' = \frac{dn \cdot \sigma}{A} \quad (3.5.4)$$

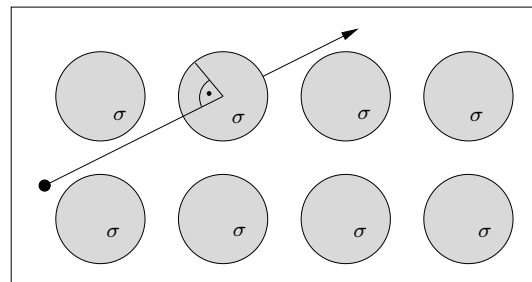


Abb.3.5.2 Wirkungsquerschnitt

$\sigma$  heißt **Wirkungsquerschnitt** der Targetatome für den Übergang von  $Z_0$  nach  $Z$ , wenn  $P' = P$  gilt, d.h. wenn

$$\frac{\sigma \cdot dn}{A} = \frac{d\bar{N}}{N_0} \quad (3.5.5)$$

Aus (3.5.1) und (3.5.2) folgt  $dn = z dV = z A dx$  und daraus mit (3.5.5)

$$\frac{d\bar{N}}{N_0} = \frac{\sigma \cdot dn}{A} = \sigma z dx \quad (3.5.6)$$

oder

$$\boxed{d\bar{N} = N_0 \sigma z dx} \quad (3.5.7)$$

Für ein nicht extrem dünnes Target ist in (3.5.7)  $N_0$  durch  $N(x)$  (die Zahl der Teilchen im Zustand  $Z_0$  am Ort  $x$ ) zu ersetzen. Damit erhält man

$$dN = -d\bar{N} = -N(x) \sigma z dx \quad (3.5.8)$$

oder

$$\frac{dN}{N} = -\sigma z dx \quad (3.5.9)$$

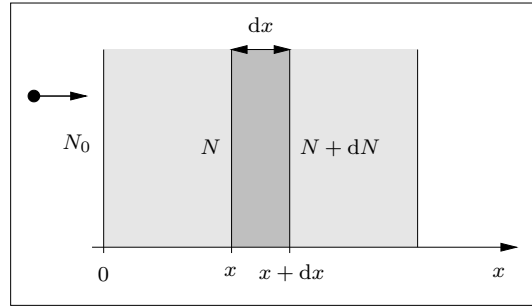


Abb.3.5.3 Lambert'sches Gesetz

Integration von (3.5.9) liefert

$$\ln N = -\sigma z x + C', \quad (3.5.10)$$

woraus

$$N = e^{-\sigma z x + C'} = C \cdot e^{-\sigma z x} \quad (3.5.11)$$

folgt. Aus  $N(0) = N_0$  folgt  $C = N_0$  und damit das LAMBERT'sche Gesetz

$$\boxed{N(x) = N_0 e^{-\alpha x}} \quad (3.5.12)$$

mit

$$\alpha = \sigma \cdot z = \sigma \cdot \frac{\rho}{M} \quad (3.5.13)$$

Die **Halbwertsdicke**  $x_h$  des Targets ist durch  $N(x_h) = \frac{1}{2} N_0$  definiert. Aus (3.5.12) folgt

$$\boxed{x_h = \frac{\ln 2}{\alpha}} \quad (3.5.14)$$

Im Fall der Absorption bedeutet der Zustand  $Z$ , dass das Teilchen nicht mehr vorhanden ist.  $N$  ist dann die Zahl der noch vorhandenen Teilchen,  $\alpha$  nennt man den **Absorptionskoeffizienten** und  $\sigma$  heißt in diesem Fall der **Absorptionsquerschnitt**.

Ist der Zustand  $Z$  durch „das Teilchen wurde gestreut“ gekennzeichnet, dann nennt man  $\sigma$  den **Streuquerschnitt**.

Das Lambert'sche Gesetz gilt nur dann, wenn ein in den Zustand  $Z$  versetztes Teilchen nicht mehr in den Zustand  $Z_0$  zurückkehren kann (Alles-oder-nichts-Wechselwirkung). (3.5.12) gilt z.B. für die Absorption von Photonen durch den Fotoeffekt oder die Paarerzeugung und in guter Näherung auch für die Rayleigh- und Compton-Streuung.

### 3.6 Die wesentlichen Wechselwirkungen elektromagnetischer Strahlung mit Materie-Überblick

Hauptsächlich gibt es vier Arten von Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie. Im Folgenden bezeichnet  $A$  die Ionisierungsenergie des am schwächsten gebundenen Elektrons,  $f_1 < f_2 < \dots < f_n$  sind die Resonanzfrequenzen der beteiligten Atome,  $m_e$  ist die Ruhmasse des Elektrons,  $f$  die Frequenz der einfallenden und  $f'$  die Frequenz der gestreuten Strahlung.  $Z$  sei die Ordnungszahl (Zahl der Elektronen) der beteiligten Atome.

#### 3.6.1 Kohärente Streuung oder Rayleigh-Streuung ( $f = f'$ )

Für Wellenlängen, die groß gegen die Abmessungen eines Atoms sind ( $\lambda \gg 10^{-10}\text{m}$ ), d.h. für  $hf \ll 10^4\text{eV}$ , kann das elektrische Feld der Welle über den Bereich des Atoms als konstant angesehen werden. Die elastisch an den Kern gebundenen Elektronen schwingen dann im Takt der einfallenden Welle und bilden somit selbst einen schwingenden Dipol, der Licht in alle Richtungen aussendet (**Rayleigh-Streuung**). Mit dem klassischen Elektronenradius

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \quad (3.6.1)$$

und dem **Thomson-Querschnitt**

$$\sigma_{\text{Th}} = \frac{8\pi}{3} \cdot r_e^2 \quad (3.6.2)$$

gilt für den Wirkungsquerschnitt der Rayleigh-Streuung außerhalb der Resonanzfrequenzen

$$\sigma_{\text{R}} \sim Z^2 \cdot f^4 \quad \text{für } f \ll f_1 \quad (3.6.3)$$

$$\sigma_{\text{R}} = Z^2 \cdot \sigma_{\text{Th}} \quad \text{für } f_n \ll f \ll 10^4 \text{ eV} \quad (3.6.4)$$

$$\lim_{f \rightarrow \infty} \sigma_{\text{R}} = 0 \quad (3.6.5)$$

Für eine Resonanzfrequenz ist der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{\text{Res}} = \frac{e^2 \tau}{\epsilon_0 m_e c}, \quad (3.6.6)$$

wobei  $\tau$  die mittlere Lebensdauer des angeregten Zustands ist.  $\tau$  liegt in der Größenordnung von  $10^{-8}\text{s}$ . Wegen der endlichen Masse des streuenden Atoms ist  $f'$  nicht exakt gleich  $f$ , sondern etwas kleiner.  $f'$  berechnet man mit der Comptonformel, wobei die Masse  $m_e$  des Elektrons durch die Masse  $M$  des freien Atoms ersetzt werden muss (Comptoneffekt am ganzen Atom). Die kohärente Streuung an Atomen im Kristall ist die Grundvoraussetzung für die Braggreflexion.

#### 3.6.2 Comptonstreuung

Die klassische Behandlung der Streuung von elektromagnetischen Wellen an *freien* Elektronen (J.J. THOMSON) liefert als Streuquerschnitt den Thomsonquerschnitt (3.6.2). Nach der klassischen Rechnung schwingen die Elektronen im Takt der einfallenden Strahlung mit, d.h. es ist  $f' = f$ . Die korrekte Beschreibung der Streuung an freien Elektronen mit der Quantenmechanik liefert die Comptonformel. Hier gilt näherungsweise für kleine Frequenzen  $f' \approx f$ . Der Wirkungsquerschnitt für die Comptonstreuung wurde 1929 von KLEIN und NISHINA mit Hilfe der Diracgleichung, einer relativistischen Verallgemeinerung der Schrödingergleichung, berechnet:

$$\sigma_{\text{C}} = 2\pi r_e^2 \cdot \frac{1}{x} \cdot \left[ \left(1 - \frac{4}{x} - \frac{8}{x^2}\right) \cdot \ln(1+x) + \frac{1}{2} + \frac{8}{x} - \frac{1}{2(1+x)^2} \right] \quad (3.6.7)$$

mit

$$x = \frac{2hf}{m_e c^2} \quad (3.6.8)$$

Für  $hf \ll m_e c^2$  gilt

$$\sigma_C \approx \frac{\sigma_{\text{Th}}}{1+x}, \quad (3.6.9)$$

d.h.  $\sigma_C$  geht für kleine Frequenzen in den Thomsonquerschnitt über. Die Comptonformel

$$\lambda' = \lambda + \lambda_C(1 - \cos \varphi) \quad (3.6.10)$$

und die Formel (3.6.7) von Klein-Nishina gelten exakt nur für wirklich freie Elektronen, in guter Näherung aber auch für gebundene Elektronen, deren Ionisierungsenergie bzw. Austrittsarbeit klein gegen  $hf$  ist. Der Wirkungsquerschnitt eines Atoms mit  $Z$  Elektronen für Comptonstreuung an Elektronen ist

$$\sigma_{C,\text{Atom}} = Z \cdot \sigma_C \quad (3.6.11)$$

$\sigma_{C,\text{Atom}}$  darf nicht mit dem Streuquerschnitt des „Comptoneffekts am ganzen Atom“ ( $m_e$  durch  $m_{\text{Atom}}$  ersetzen, Rayleighstreuung) verwechselt werden!

### 3.6.3 Fotoeffekt

Für  $hf > A$  tritt neben der kohärenten Streuung und der Comptonstreuung als weiterer Kanal der Wechselwirkung noch der Fotoeffekt auf. Der Wirkungsquerschnitt  $\sigma_F$  von H-Atomen für den Fotoeffekt kann analytisch berechnet werden. Mit  $A = 13,6 \text{ eV}$  gilt

$$\sigma_F(f) \approx \begin{cases} 10^7 \cdot \sigma_{\text{Th}} & \text{für } hf = A \\ 1,5 \cdot 10^6 \cdot \sigma_{\text{Th}} \cdot \left(\frac{A}{hf}\right)^{\frac{7}{2}} & \text{für } A \ll hf \ll m_e c^2 \end{cases} \quad (3.6.12)$$

Für andere Atome ist  $\sigma_F$  viel größer, da im Bereich  $hf \gg A$  der Wirkungsquerschnitt  $\sigma_F$  ungefähr proportional zu  $Z^5$  ist.

### 3.6.4 Paarerzeugung

Für  $hf > 2m_e c^2$  kann sich ein Photon im Feld eines Kerns (der Kern nimmt Impuls auf) in ein Elektron-Positron-Paar verwandeln. Der Wirkungsquerschnitt für Paarerzeugung ist

$$\sigma_P(f) = \begin{cases} \frac{\pi}{1644} \cdot Z^2 r_e^2 \cdot \left[ \frac{hf}{m_e c^2} - 2 \right]^3 & \text{für } hf \gtrsim 2m_e c^2 \\ \frac{28}{1233} \cdot Z^2 r_e^2 \cdot \left[ \ln \left( \frac{2hf}{m_e c^2} \right) - \frac{109}{42} \right] & \text{für } 2m_e c^2 \ll hf \ll \frac{137}{Z^{\frac{1}{3}}} m_e c^2 \\ \frac{28}{1233} \cdot Z^2 r_e^2 \cdot \left[ \ln \left( \frac{183}{Z^{\frac{1}{3}}} \right) - \frac{1}{42} \right] & \text{für } hf \gg \frac{137}{Z^{\frac{1}{3}}} m_e c^2 \end{cases} \quad (3.6.13)$$

Die Berechnung der Wirkungsquerschnitte findet man z.B. in LANDAU, LIFSCHITZ, *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Bd. IVa.

Die heute beste Beschreibung der Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie ist die 1928 von DIRAC begonnene und in den Fünfzigerjahren des zwanzigsten Jahrhunderts von SCHWINGER, TOMONAGA und FEYNMAN vollendete **Quantenelektrodynamik** (QED). Die QED sagt eine mit der semiklassischen Theorie (Schrödinger und Maxwell) nicht erklärbare Verschiebung der Energieniveaus von Atomen voraus (Lambshift), die 1949 von KROLL, LAMB, WEISSKOPF und FRENCH berechnet wurde ( $\Delta W \approx 10^{-6} \text{ eV}$ ).

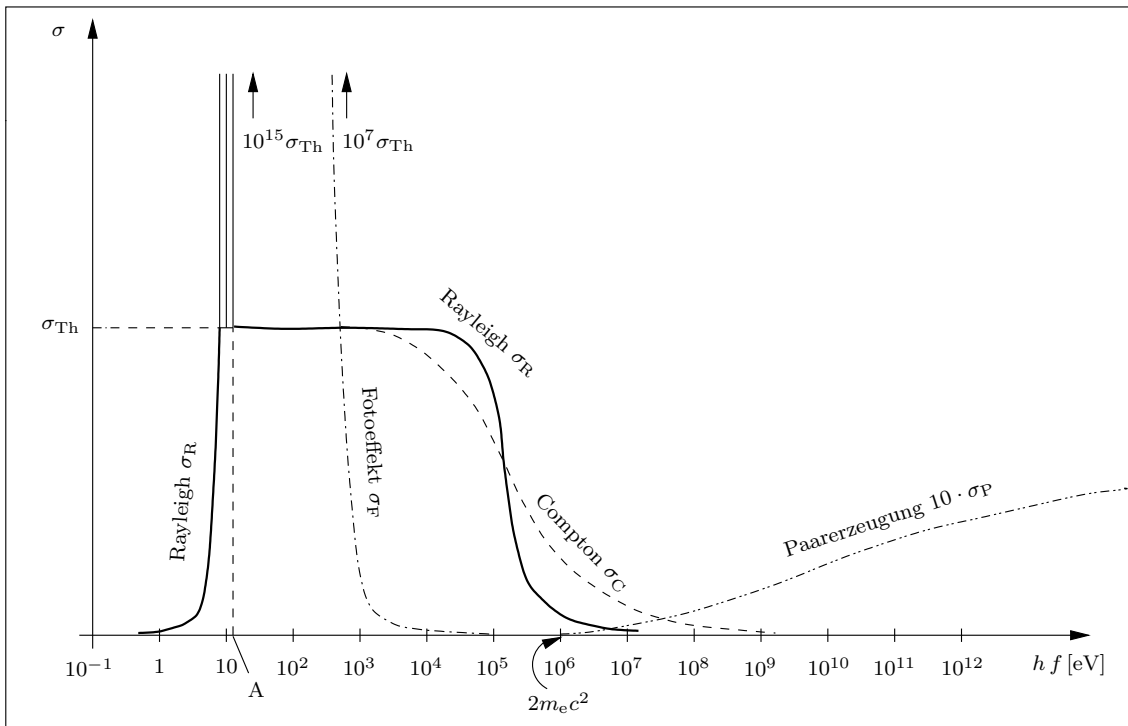


Abb.3.6.1 Wirkungsquerschnitte für die Streuung von Photonen an H-Atomen

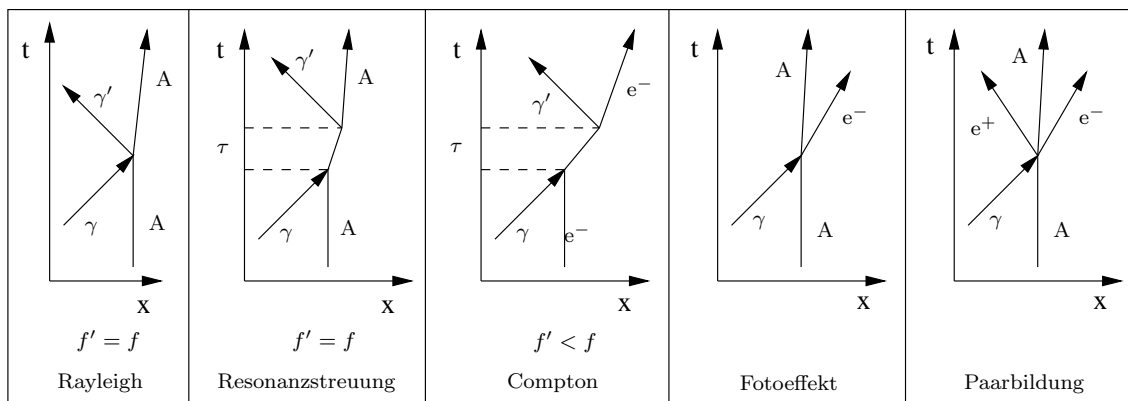


Abb.3.6.2 Feynman-Diagramme der behandelten Wechselwirkungen

# 4 Atomm Modelle

## 4.1 Das Atommodell von Rutherford

Energierreiche  $\alpha$ -Teilchen durchdringen leicht die Elektronenhülle eines Atoms und werden erst in Kernnähe spürbar abgelenkt. Rutherford untersuchte 1911 die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Goldkernen.

Experimentell ermittelte Rutherford die Zahl  $dN$  der Teilchen, die in den Winkelbereich zwischen  $\varphi$  und  $\varphi + d\varphi$  gestreut werden im Verhältnis zur Gesamtzahl  $N$  der einfallenden  $\alpha$ -Teilchen.

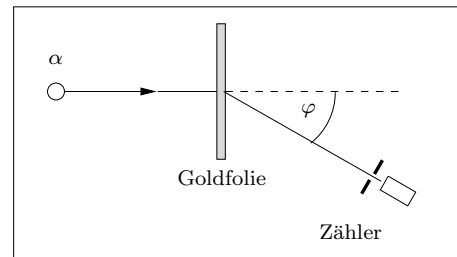


Abb.4.1.1 Versuch von Rutherford

Denkt man sich um den streuenden Kern  $K$  eine Kugelfläche mit dem Radius  $r$ , dann entspricht dem Winkelbereich  $[\varphi, \varphi + d\varphi]$  die Ringfläche  $2\pi a db$  (siehe Abb.4.1.2). Die Maßzahl dieser Ringfläche für  $r = 1$  nennt man den **Raumwinkel**  $d\Omega$ . Alle einfallenden Teilchen, die eine gewisse Ringfläche  $d\sigma$  um das Streuzentrum treffen, werden in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut.  $d\sigma$  nennt man den **differentiellen Wirkungsquerschnitt**. Mit

$$a = r \sin \varphi = \sin \varphi$$

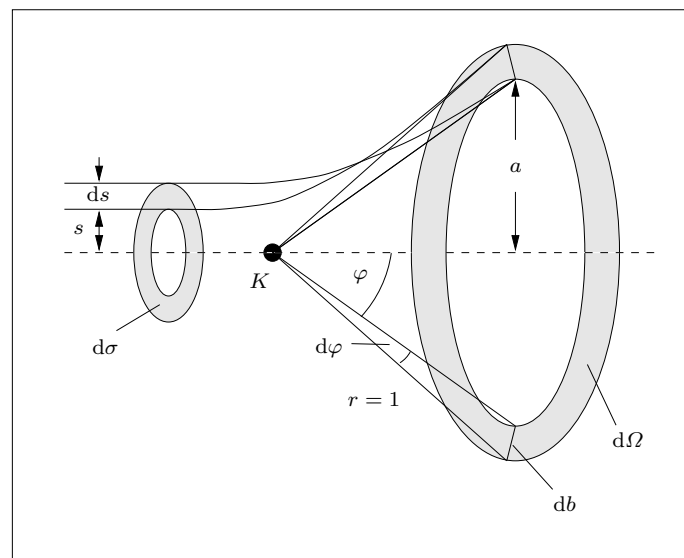


Abb.4.1.2 Differentieller Wirkungsquerschnitt

und

$$db = r d\varphi = d\varphi$$

erhält man

$$d\Omega = 2\pi \sin \varphi d\varphi \tag{4.1.1}$$

Den Abstand  $s$  des Streuzentrums von der Flugbahn des noch weit entfernten Teilchens nennt man den **Stoßparameter**. Damit gilt

$$d\sigma = 2\pi s ds \tag{4.1.2}$$

Aus der „Atomdichte“  $z$  (Zahl der Atome pro Volumen) des Targetmaterials und der Dicke  $x$  des Targets berechnet sich die Fläche  $\sigma$ , die jedem streuenden Atomkern zusteht ( $A_q$  sei die Querschnittsfläche des einfallenden Teilchenstrahls):

$$\sigma = \frac{A_q}{zV} = \frac{A_q}{zA_q x} = \frac{1}{zx} \tag{4.1.3}$$

Damit gilt

$$\frac{dN}{N} = \frac{d\sigma}{\sigma} = zx d\sigma \tag{4.1.4}$$

#### 4 Atommodelle

Aus (4.1.1), (4.1.2) und (4.1.4) erhält man (wenn  $s$  größer wird, wird  $\varphi$  kleiner!)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{s ds}{\sin \varphi |d\varphi|} = \frac{s}{\sin \varphi \left| \frac{d\varphi}{ds} \right|} \quad (4.1.5)$$

Mit einer rein klassischen Rechnung (Newton 2, Coulombkraft), die der Berechnung von Planetenbahnen vollkommen analog ist, erhielt Rutherford folgendes Ergebnis, die im Anhang zu diesem Kapitel hergeleitet werden:

$$\varphi = 2 \cdot \arcsin B \quad \text{mit} \quad B = \frac{1}{\sqrt{1 + \left( \frac{m s v_0^2}{\alpha} \right)^2}} \quad (4.1.6)$$

Dabei ist  $m$  die Masse eines  $\alpha$ -Teilchens,  $v_0$  die Geschwindigkeit der einfallenden Teilchen in noch großer Entfernung und

$$\alpha = \frac{q_\alpha \cdot q_{\text{Kern}}}{4\pi \varepsilon_0} = \frac{2e \cdot Ze}{4\pi \varepsilon_0} = \frac{Ze^2}{2\pi \varepsilon_0} \quad (4.1.7)$$

Differenzieren von (4.1.6) und Einsetzen in (4.1.5) liefert die berühmte **Rutherford'sche Streuformel**

$$\boxed{d\sigma = \frac{\alpha^2}{4m^2 v_0^4} \cdot \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}}} \quad (4.1.8)$$

Mit (4.1.4), (4.1.7) und (4.1.8) erhält man endgültig für die Zahl  $dN$  der Teilchen, die in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut werden:

$$\boxed{dN = N z x d\sigma = N z x \left[ \frac{Ze^2}{4\pi \varepsilon_0 m v_0^2} \right]^2 \cdot \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}}} \quad (4.1.9)$$

Eine quantenmechanische Rechnung ergibt zufällig die exakt gleiche Streuformel, die Rutherford auf rein klassischem Wege erhalten hat!

Rutherford bestimmte experimentell die Zahl  $dN$  der in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreuten Teilchen und verglich die Messergebnisse mit seiner Formel. Bei Goldkernen stellte er bis zu einer kinetischen Energie der  $\alpha$ -Teilchen von ungefähr 20 MeV auch für große Streuwinkel Übereinstimmung mit seiner Formel fest. Erst für größere Energien kommen die Teilchen dem Kern zu nahe und die gemachte Annahme der reinen Coulombwechselwirkung ist nicht mehr erfüllt, da die Teilchen dann in den Bereich der Kernkräfte gelangen. Zu einer Abschätzung des Radiuses der Goldkerne gehen wir von einer Rückstreuung ( $\varphi = 180^\circ$ ) aus:

$$W_{\text{kin}} = W_{\text{pot}} = \frac{2e \cdot 79e}{4\pi \varepsilon_0 \cdot r} \implies r \approx \frac{158 e^2}{4\pi \varepsilon_0 \cdot 20 \text{ MeV}} = \underline{\underline{1,1 \cdot 10^{-14} \text{ m}}}$$

#### Atommodell von Rutherford:

Fast die ganze Masse eines Atoms ist im **Atomkern** mit der Ladung  $Z \cdot e$  ( $Z = \text{Ordnungszahl}$ ) konzentriert, der einen Durchmesser der Größenordnung  $10^{-14} \text{ m}$  aufweist. Die Elektronen befinden sich im Raum um den Kern und gleichen die elektrische Anziehung durch Bewegung (Zentrifugalkraft) aus.

#### Anhang: Herleitung der Rutherfordformel



Die Kraft auf das  $\alpha$ -Teilchen ist

$$\vec{F} = \frac{\alpha \vec{r}}{r^3} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{Z e^2}{2 \pi \epsilon_0} \quad (4.1.10)$$

Damit lauten die Bewegungsgleichungen

$$\ddot{x} = \frac{\alpha x}{m r^3} \quad \text{und} \quad \ddot{y} = \frac{\alpha y}{m r^3} \quad (4.1.11)$$

Zweimaliges Differenzieren der Beziehung

$$r^2 = x^2 + y^2 \quad (4.1.12)$$

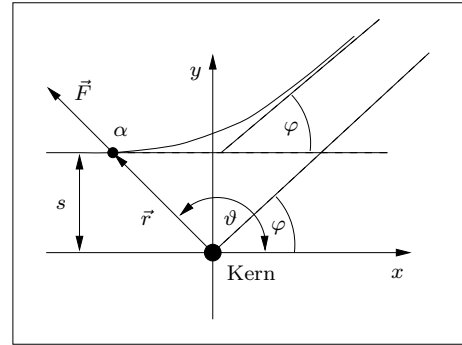


Abb.4.1.3 Versuch von Rutherford

liefert unter Anwendung der Ketten- und Produktregel

$$\dot{r}^2 + r \ddot{r} = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + x \ddot{x} + y \ddot{y} \quad (4.1.13)$$

Einsetzen von (4.1.11) und

$$v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 \quad (4.1.14)$$

in (4.1.13) liefert

$$r \ddot{r} = v^2 - \dot{r}^2 + \frac{\alpha}{m r} \quad (4.1.15)$$

Mit

$$x = r \cos \vartheta \quad \text{und} \quad y = r \sin \vartheta \quad (4.1.16)$$

erhält man, wieder unter Anwendung der Ketten- und Produktregel

$$v_x = \dot{r} \cos \vartheta - r \dot{\vartheta} \sin \vartheta \quad \text{und} \quad v_y = \dot{r} \sin \vartheta + r \dot{\vartheta} \cos \vartheta \quad (4.1.17)$$

und damit

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 \quad (4.1.18)$$

Aus (4.1.15) und (4.1.18) folgt

$$r \ddot{r} = r^2 \dot{\vartheta}^2 + \frac{\alpha}{m r} \quad (4.1.19)$$

Mit (4.1.19) haben wir eine erste Bewegungsgleichung des  $\alpha$ -Teilchens in Polarkoordinaten erhalten. Eine zweite Gleichung liefert uns der Drehimpulssatz. Der Drehimpuls des Teilchens bezüglich des Ursprungs, der wie der Impuls eine Erhaltungsgröße ist, ist definiert durch

$$\vec{L} = m \cdot \vec{r} \times \vec{v} = m \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x v_y - y v_x \end{pmatrix} \quad (4.1.20)$$

Für den Betrag des Drehimpulses erhält man mit (4.1.16) und (4.1.17)

$$L = m \cdot (x v_y - y v_x) = m r^2 \dot{\vartheta} \quad (4.1.21)$$

Der konstante Drehimpuls  $L$  kann leicht durch die Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$  ( $r \rightarrow \infty$ ) und den Stoßparameter  $s$  ausgedrückt werden (siehe Abb.4.1.3):

$$L = m s v_0 \quad (4.1.22)$$

(4.1.19) und (4.1.21) sind die Bewegungsgleichungen in Polarkoordinaten, deren Lösung die Funktionen  $r(t)$  und  $\vartheta(t)$  sind. Um den Ablenkwinkel  $\varphi$  zu berechnen brauchen wir aber nicht die volle zeitabhängige Lösung, sondern es genügt uns die Bahngleichung  $r(\vartheta)$ . Dazu rechnen wir die Ableitungen nach der Zeit mit Hilfe der Kettenregel und (4.1.21) in Ableitungen nach  $\vartheta$  um, die wir im Folgenden mit einem Strich bezeichnen:

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\vartheta} \frac{d\vartheta}{dt} = r' \dot{\vartheta} \stackrel{(4.1.21)}{=} \frac{r' L}{m r^2} \quad (4.1.23)$$

#### 4 Atommodelle

Um eine leicht lösbare Differentialgleichung zu erhalten, führen wir folgende Substitution aus:

$$r = \frac{1}{u} \quad \text{bzw.} \quad u = \frac{1}{r} \quad (4.1.24)$$

Damit folgt aus (4.1.21)

$$\dot{\vartheta} = \frac{L}{m} \cdot u^2 \quad (4.1.25)$$

Mit der Quotienten- und der Kettenregel folgt

$$u' = \frac{du}{d\vartheta} = \frac{d}{d\vartheta} \left( \frac{1}{r} \right) = -\frac{1}{r^2} \cdot \frac{dr}{d\vartheta} = -\frac{r'}{r^2} \quad (4.1.26)$$

oder

$$r' = -r^2 u' = -\frac{u'}{u^2} \quad (4.1.27)$$

Aus (4.1.23), (4.1.27) und  $r^2 \cdot u^2 = 1$  folgt

$$\dot{r} = -\frac{L}{m} \cdot u' \quad (4.1.28)$$

Nochmaliges Differenzieren nach  $t$  liefert

$$\ddot{r} = -\frac{L}{m} \cdot \frac{du'}{dt} = -\frac{L}{m} \cdot \frac{du'}{d\vartheta} \cdot \dot{\vartheta} = -\frac{L^2}{m^2} \cdot u^2 \cdot u'' \quad (4.1.29)$$

Einsetzen von (4.1.24), (4.1.29) und (4.1.25) in (4.1.19):

$$\frac{1}{u} \cdot \left( -\frac{L^2}{m^2} \cdot u^2 \right) \cdot u'' = \frac{1}{u^2} \cdot \frac{L^2 u^4}{m^2} + \frac{\alpha u}{m} \quad (4.1.30)$$

oder

$$\boxed{u'' + u = -\frac{\alpha m}{L^2}} \quad (4.1.31)$$

Wäre die rechte Seite von (4.1.31) Null, dann wäre es die vertraute Schwingungsgleichung. Wie man leicht sieht, ist die Lösung von (4.1.31):

$$u(\vartheta) = A \cdot \cos(\vartheta - \Phi) - \frac{\alpha m}{L^2} \quad (4.1.32)$$

mit noch frei wählbaren Konstanten  $A$  und  $\Phi$ . Nach Rücksubstitution erhält man die gesuchte Bahngleichung in Polarkoordinaten:

$$\boxed{r(\vartheta) = \frac{1}{A \cdot \cos(\vartheta - \Phi) - \frac{\alpha m}{L^2}}} \quad (4.1.33)$$

Die Konstante  $\Phi$  bewirkt eine Drehung der Bahnkurve um den Winkel  $\Phi$ . Durch geeignete Wahl des Koordinatensystems erreichen wir  $\Phi = 0$ . Die Konstante  $A$  bestimmen wir mit Hilfe des Energiesatzes. Die potentielle Energie des  $\alpha$ -Teilchens ist  $U(r) = \frac{\alpha}{r}$ . Damit lautet der Energiesatz

$$\frac{m}{2} v^2 + \frac{\alpha}{r} = W = \frac{m}{2} v_0^2 = \text{konst.} \quad (4.1.34)$$

oder mit (4.1.18)

$$\frac{m}{2} \left( \dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 \right) + \frac{\alpha}{r} = W \quad (4.1.35)$$

Einsetzen von (4.1.23) und (4.1.25) in (4.1.35):

$$\frac{L^2 r'^2}{2m r^4} + \frac{L^2}{2m r^2} + \frac{\alpha}{r} = W \quad (4.1.36)$$

Differenzieren von (4.1.33):

$$r' = \frac{dr(\vartheta)}{d\vartheta} = \frac{A \sin \vartheta}{\left(A \cdot \cos \vartheta - \frac{\alpha m}{L^2}\right)^2} = r^2 \cdot A \sin \vartheta \quad (4.1.37)$$

Einsetzen von (4.1.37) und (4.1.33) in (4.1.36):

$$\begin{aligned} W &= \frac{L^2 A^2 \sin^2 \vartheta}{2m} + \frac{L^2}{2m} \cdot \left(A \cos \vartheta - \frac{\alpha m}{L^2}\right)^2 + \alpha \cdot \left(A \cos \vartheta - \frac{\alpha m}{L^2}\right) = \\ &= \frac{L^2 A^2}{2m} - \frac{\alpha^2 m}{2L^2} \end{aligned} \quad (4.1.38)$$

Auflösen nach  $A$ :

$$A = \pm \frac{1}{L} \sqrt{2mW + \left(\frac{\alpha m}{L}\right)^2} \quad (4.1.39)$$

Mit (4.1.33) und (4.1.39) haben wir die Bahngleichung in Abhängigkeit von der Gesamtenergie  $W$  und vom Drehimpuls  $L$  gefunden. Diese Lösung gilt nicht nur für die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Atomkernen, sondern für alle Wechselwirkungen, deren Kraft einem  $\frac{1}{r^2}$ -Gesetz gehorcht, insbesondere für die Bahnen von Planeten und Satelliten. Wenn die Masse des Zentralgestirns (Sonne) nicht sehr groß gegen die Masse des Satelliten ist, muss man vorher ins Schwerpunktsystem transformieren. Für Gravitationswechselwirkungen ist

$$\alpha = -\gamma m M \quad (4.1.40)$$

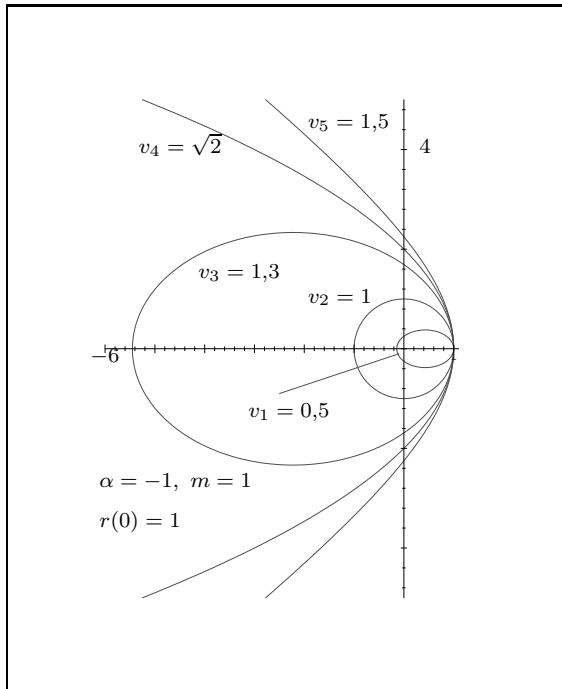


Abb.4.1.4 Satellitenbahnen

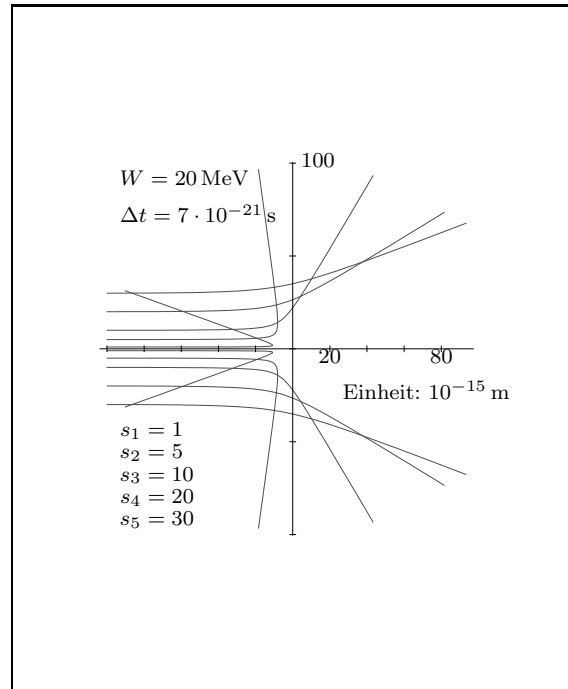


Abb.4.1.5 Rutherfordstreuung (numerisch)

Es ist üblich, (4.1.33) in der Form

$$r(\vartheta) = \frac{p}{1 + e \cos \vartheta} \quad (4.1.41)$$

mit

$$p = -\frac{L^2}{m \alpha} \quad (4.1.42)$$

und der **Exzentrizität**

$$e = \mp \operatorname{sgn}(\alpha) \cdot \sqrt{1 + \frac{2W L^2}{m \alpha^2}} \quad (4.1.43)$$

zu schreiben. Für anziehende Kräfte ( $\alpha < 0$ ) gilt folgende Bahnklassifizierung (siehe Abb.4.1.4, die schwere Masse befindet sich im Koordinatenursprung):

$$-\frac{m \alpha^2}{2L^2} < W < 0, \quad -1 < e < 0 \quad : \quad \text{Ellipse} \quad (v_1 \text{ in Abb.4.1.4})$$

$$W = -\frac{m \alpha^2}{2L^2}, \quad e = 0 \quad : \quad \text{Kreis (Spezialfall der Ellipse)} \quad (v_2 \text{ in Abb.4.1.4})$$

$$-\frac{m \alpha^2}{2L^2} < W < 0, \quad 0 < e < 1 \quad : \quad \text{Ellipse} \quad (v_3 \text{ in Abb.4.1.4})$$

$$W = 0, \quad e = 1 \quad : \quad \text{Parabel} \quad (v_4 \text{ in Abb.4.1.4})$$

$$W > 0, \quad e > 1 \quad : \quad \text{Hyperbel} \quad (v_5 \text{ in Abb.4.1.4})$$

Für eine abstoßende Kraft ( $\alpha > 0$ ) ist die potentielle Energie und damit auch die Gesamtenergie  $W$  immer positiv, es gilt  $e > 1$  und die Bahnkurve ist eine Hyperbel (siehe Abb.4.1.5).

Es fehlt noch die Berechnung des Ablenkswinkels  $\varphi$ . Abb.4.1.6 entnimmt man

$$\varphi = \pi - 2\vartheta_0 \quad (4.1.44)$$

$\vartheta_0$  erhält man aus (4.1.41) durch Nullsetzen des Nenners, weil dann  $r$  gegen Unendlich geht:

$$\cos \vartheta_0 = -\frac{1}{e} \quad (4.1.45)$$

Aus (4.1.44) und (4.1.45) folgt

$$\varphi = \pi - 2 \arccos \left( -\frac{1}{e} \right) = 2 \left( \frac{\pi}{2} - \arccos \left( -\frac{1}{e} \right) \right)$$

oder mit Hilfe einer Formelsammlung

$$\varphi = -2 \arcsin \left( -\frac{1}{e} \right) = 2 \arcsin \left( \frac{1}{e} \right) \quad (4.1.46)$$

Zur Herleitung der Streuformel müssen wir  $\varphi$  durch den Stoßparameter  $s$  ausdrücken. Mit der Geschwindigkeit  $v_0$  des  $\alpha$ -Teilchens im Unendlichen gilt

$$L = m v_0 s \quad \text{und} \quad W = \frac{m}{2} v_0^2 \quad (4.1.47)$$

Mit (4.1.43) und (4.1.47) geht (4.1.46) über in

$$\varphi = 2 \cdot \arcsin B \quad \text{mit} \quad B = \frac{1}{\sqrt{1 + \left( \frac{m s v_0^2}{\alpha} \right)^2}} \quad (4.1.48)$$

Mit Hilfe von

$$\frac{1}{\sqrt{1 - B^2}} = \frac{\sqrt{1 + \left( \frac{m s v_0^2}{\alpha} \right)^2}}{\frac{m s v_0^2}{\alpha}} \quad (4.1.49)$$

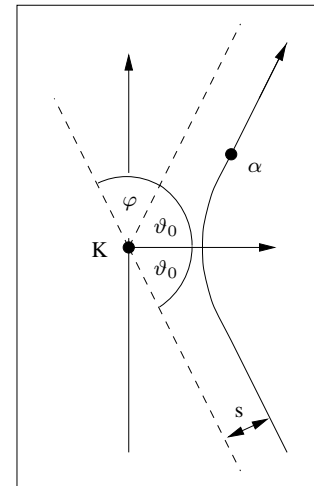


Abb.4.1.6 Ablenkswinkel

berechnet sich die Ableitung von (4.1.48) nach  $s$  zu

$$\frac{d\varphi}{ds} = \frac{-2 m v_0^2}{\alpha \left( 1 + \left( \frac{m s v_0^2}{\alpha} \right)^2 \right)} \quad (4.1.50)$$

Einsetzen von (4.1.50) in (4.1.5) ergibt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha s \left( 1 + \left( \frac{m s v_0^2}{\alpha} \right)^2 \right)}{2 m v_0^2 \sin \varphi} = \frac{\alpha s}{2 m v_0^2 B^2 \sin \varphi} \quad (4.1.51)$$

Aus (4.1.48) folgt

$$\sin \frac{\varphi}{2} = B \quad \text{und} \quad 1 + \left( \frac{m s v_0^2}{\alpha} \right)^2 = \frac{1}{B^2} = \frac{1}{\sin^2 \frac{\varphi}{2}} \quad (4.1.52)$$

Damit kann man  $\sin \varphi$  umschreiben:

$$\begin{aligned} \sin \varphi &= 2 \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2} = 2 \sin \frac{\varphi}{2} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{\varphi}{2}} = \\ &= 2 \sin \frac{\varphi}{2} \sqrt{1 - B^2} \stackrel{(4.1.49)}{=} 2 \sin \frac{\varphi}{2} \cdot B \cdot \frac{m s v_0^2}{\alpha} = \\ &= 2 \cdot \frac{m s v_0^2}{\alpha} \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2} \end{aligned} \quad (4.1.53)$$

(4.1.52) und (4.1.53) in (4.1.51) liefert endgültig die Rutherford'sche Streuformel:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha s}{2 m v_0^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2} \cdot 2 \cdot \frac{m s v_0^2}{\alpha} \cdot \sin^2 \frac{\varphi}{2}} = \frac{\alpha^2}{4 m^2 v_0^4} \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}} \quad (4.1.54)$$

oder

$$\boxed{d\sigma = \frac{\alpha^2}{4 m^2 v_0^4} \cdot \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}}} \quad (4.1.55)$$

Es folgen, ohne Beweis, einige Formeln für Ellipsenbahnen, wenn die Masse  $M$  des Zentralgestirns sehr groß gegen die Masse  $m$  des Satelliten ist. Das Zentralgestirn befindet sich in einem Brennpunkt der Ellipse ( $B_1$ ), der auch der Ursprung des Koordinatensystems ist. Der sonnenernste Punkt der Ellipse heißt Aphel ( $A$ ), der sonnennächste Punkt ist der Perihel ( $P$ ).  $a$  ist die große Halbachse,  $b$  die kleine Halbachse.

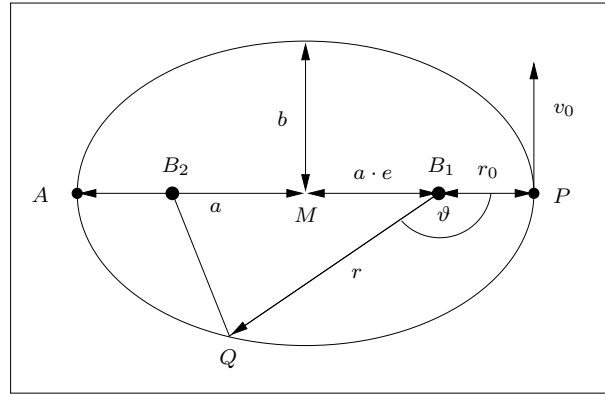


Abb.4.1.7 Keplerellipse

$$r(\vartheta) = \frac{p}{1 + e \cos \vartheta} \qquad a = \overline{B_1 Q} + \overline{B_2 Q} \qquad (4.1.56)$$

$$r_0 = r(0) = \overline{B_1 P} = \frac{p}{1 + e} \qquad r(\pi) = \overline{B_1 A} = \frac{p}{1 - e} \qquad (4.1.57)$$

$$a = \frac{p}{1 - e^2} \qquad b = \frac{p}{\sqrt{1 - e^2}} \qquad (4.1.58)$$

$$p = \frac{r_0^2 v_0^2}{\gamma M} \qquad e = \left| \frac{r_0 v_0^2}{\gamma M} - 1 \right| \qquad (4.1.59)$$

## 4.2 Das Bohr'sche Atommodell

Das Rutherford'sche Atommodell (Newton und Maxwell auf kreisendes Elektron anwenden) liefert keinen Anhaltspunkt für diskrete Energiewerte des Atoms. Wir versuchen daher folgende Modellvorstellung:

Das Elektron im H-Atom wird als stehende Materiewelle um den Kern herum beschrieben (siehe Abb.4.2.1).

Für die Wellenlänge dieser Materiewelle gilt dann

$$n \cdot \lambda = 2 \pi r_n \qquad (4.2.1)$$

Mit der de Broglie-Relation  $\lambda = \frac{h}{m_e v_n}$

folgt dann

$$\boxed{m_e v_n r_n = n \cdot \hbar} \qquad (4.2.2)$$

**(1. Bohr'sches Postulat)**

Niels Bohr hat dieses Postulat 1913 aufgestellt, um die experimentellen Ergebnisse zu erklären (de Broglie veröffentlichte seine Relation erst 1924!!). In Worten lautet das 1. Bohr'sche Postulat:

Der Bahndrehimpuls  $L_n = m_e v_n r_n$  des Elektrons kann nur ein ganzzahliges Vielfaches von  $\hbar$  sein!

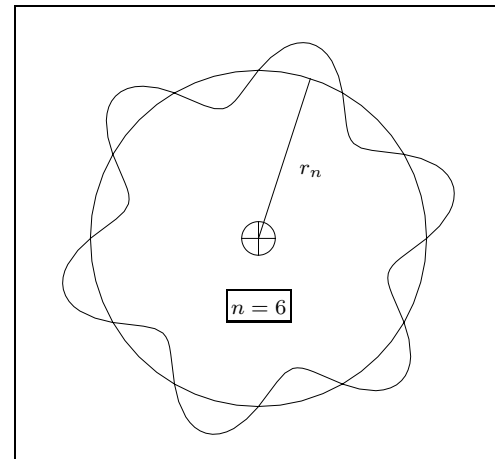


Abb.4.2.1 Stehende Welle um den Kern

Weiter forderte Bohr, dass die Elektronen auf den Bohr'schen Bahnen, im Gegensatz zur Maxwell'schen Theorie, strahlungsfrei kreisen!

Die Bohr'sche Frequenzbedingung

$$\boxed{h f = W_m - W_n} \quad (4.2.3)$$

wird auch als **2. Bohr'sches Postulat** bezeichnet.

Im **Einelektronensystem** (z.B. H, He<sup>+</sup>, Li<sup>++</sup>, Be<sup>+++</sup> usw.) spielt die elektrische Kraft die Rolle der Zentripetalkraft, d.h. es gilt

$$\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n} \quad (4.2.4)$$

Auflösen von (4.2.2) nach  $v_n$ , Einsetzen in (4.2.4) und Auflösen nach  $r_n$  liefert

$$\boxed{r_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{Z m_e e^2} \cdot n^2 = \frac{\epsilon_0 h^2}{Z m_e e^2 \pi} \cdot n^2} \quad (4.2.5)$$

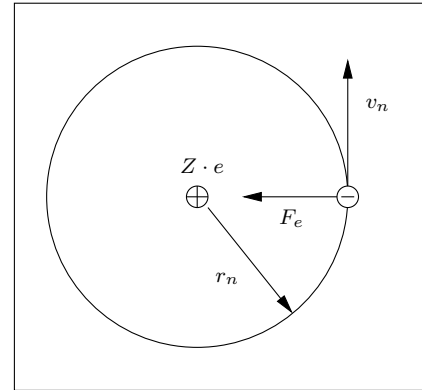


Abb.4.2.2 Kräfte auf das e<sup>-</sup>

Mit  $r_{H1}$  bezeichnen wir den Radius des Wasserstoffatoms für  $n = 1$  (**1. Bohr'scher Radius**):

$$\boxed{r_{H1} = \frac{\epsilon_0 h^2}{m_e e^2 \pi} = 0,529 \text{ \AA}} \quad (4.2.6)$$

Damit gilt für ein beliebiges Einelektronensystem mit der Kernladungszahl  $Z$ :

$$\boxed{r_n = \frac{r_{H1}}{Z} \cdot n^2 = \frac{0,529 \text{ \AA}}{Z} \cdot n^2} \quad (4.2.7)$$

Mit (4.2.4) erhält man für die potentielle und die kinetische Energie des Elektrons

$$W_{\text{pot}} = -\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_n} \quad \text{und} \quad W_{\text{kin}} = \frac{m_e}{2} v_n^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_n} \quad (4.2.8)$$

Die Gesamtenergie des Elektrons auf der  $n$ -ten Bahn ist dann

$$W_n = W_{\text{kin}} + W_{\text{pot}} = -\frac{1}{2} W_{\text{pot}} + W_{\text{pot}} = \frac{1}{2} W_{\text{pot}} = -\frac{Z e^2}{8 \pi \epsilon_0 r_n} \quad (4.2.9)$$

Mit (4.2.5) folgt aus (4.2.9)

$$\boxed{W_n = -\frac{m_e}{8} \cdot \left(\frac{Z e^2}{\varepsilon_0 h}\right)^2 \cdot \frac{1}{n^2}} \quad (4.2.10)$$

Mit

$$C = \frac{m_e}{8} \cdot \left(\frac{e^2}{\varepsilon_0 h}\right)^2 = 2,179 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,60 \text{ eV} \quad (4.2.11)$$

folgt

$$\boxed{W_n = -Z^2 \cdot C \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{W_1}{n^2}} \quad (4.2.12)$$

Die Ionisierungsenergie eines Einelektronensystems im Grundzustand ist

$$\boxed{W_{\text{Ion}} = W_\infty - W_1 = Z^2 \cdot C = Z^2 \cdot 13,60 \text{ eV}} \quad (4.2.13)$$

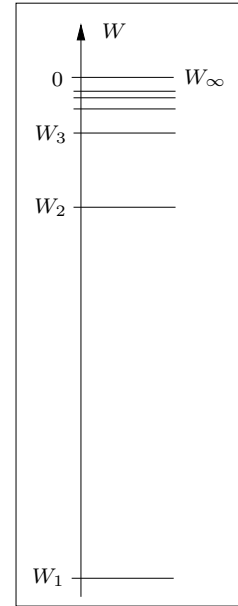


Abb.4.2.3 Energiespektrum

Beim Übergang von  $W_m$  nach  $W_n$  wird elektromagnetische Strahlung der Wellenlänge  $\lambda_{mn}$  ausgesandt. Es gilt

$$\boxed{\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{W_m - W_n}{h c} = Z^2 \cdot R_\infty \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)} \quad (4.2.14)$$

mit der **Rydbergkonstanten**

$$\boxed{R_\infty = \frac{C}{h c} = \frac{m_e e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c} = 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}} \quad (4.2.15)$$

Das „ $\infty$ “ in  $R_\infty$  steht für eine unendliche Kernmasse (keine Berücksichtigung der Kernmitbewegung). Es gilt  $R_H \approx R_\infty$  (siehe Aufgaben).



### 4.3 Quantenmechanische Atomtheorie

Das Bohr'sche Atommodell erklärt die Energiewerte von Eielektronensystemen in bester Übereinstimmung mit dem Experiment. Dieses Modell kann aber folgende Eigenschaften der Atome **nicht** erklären:

- Die dreidimensionale Gestalt
- Die magnetischen Eigenschaften
- Die Spektren der Mehrelektronenatome
- Die Auswahlregeln für erlaubte Übergänge (Spektrallinien zu bestimmten Energiedifferenzen fehlen)
- Die Feinstruktur (Aufspaltung) der Energieniveaus

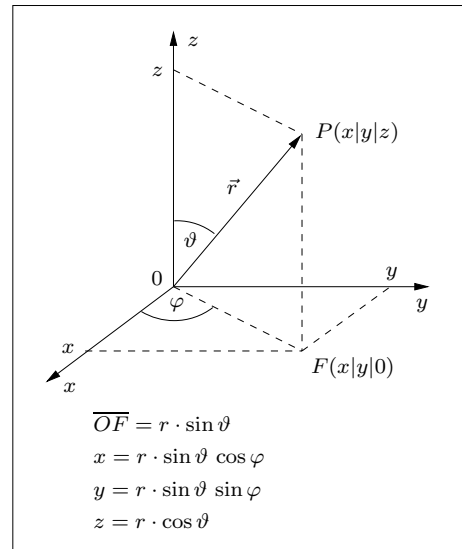


Abb.4.3.1 Kugelkoordinaten

Schreibt man die dreidimensionale Schrödingergleichung für das H-Atom

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right) + V(\vec{r}) \cdot \varphi(\vec{r}) = W \cdot \varphi(\vec{r}) \quad (4.3.1)$$

auf Kugelkoordinaten um (siehe Abb.4.3.1), dann erhält man mit der potentiellen Energie

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (4.3.2)$$

eine von  $r$ ,  $\vartheta$  und  $\varphi$  abhängige Lösung, die in der Form

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi) \quad (4.3.3)$$

geschrieben werden kann. Die selbstverständlichen Bedingungen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(r, \vartheta, \varphi) = 0 \quad \text{und} \quad \psi(r, \vartheta + 2\pi, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (4.3.4)$$

lassen für die in den Funktionen  $R$ ,  $\Theta$  und  $\Phi$  auftretenden Konstanten  $n$ ,  $l$  und  $m$  nur **ganze** Zahlen mit folgenden Zusatzbedingungen zu:

Zu jeder **Hauptquantenzahl**  $n$  kann  $l$  die Werte  $0, 1, 2, \dots, n - 1$  und zu jedem  $l$  kann  $m$  die Werte  $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  annehmen.

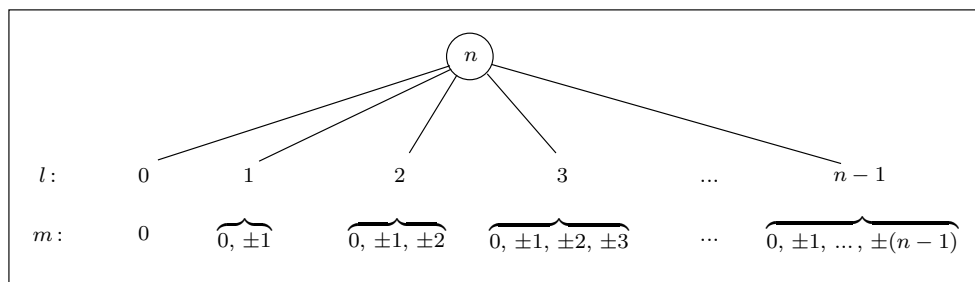


Abb.4.3.2 Quantenzahlen

#### 4 Atommodelle

Zu jedem Wert von  $l$  gibt es  $2l + 1$  verschiedene Werte von  $m$ . Die Gesamtzahl der verschiedenen Wellenfunktionen zu einer festen Hauptquantenzahl  $n$  ist also

$$1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2 \quad (4.3.5)$$

(siehe Aufgaben).

Zu jedem Zustand  $(n, l, m)$  gibt es noch zwei Einstellungen des **Eigendrehimpulses** oder **Spins** des Elektrons, was durch eine vierte Quantenzahl  $s$  beschrieben wird:

$$s = \pm \frac{1}{2} \quad (4.3.6)$$

(4.3.6) bedeutet, dass der Spin die Werte  $\pm \frac{1}{2} \hbar$  annehmen kann.

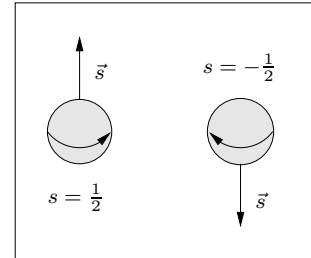


Abb.4.3.3 Spin

Die Energie, die zu einer Wellenfunktion  $\psi_{nmls}$  gehört, hängt nur von der Hauptquantenzahl  $n$  ab und ist identisch mit den Werten der Bohr'schen Theorie.

Beim H-Atom gibt es also zu jeder Hauptquantenzahl  $n$  genau  $2n^2$  verschiedene Zustände mit der gleichen Energie  $W_n$ .

Die verschiedenen Zustände mit gleichem  $n$  unterscheiden sich z.B. im Bahndrehimpuls, der im Gegensatz zur Bohr'schen Theorie ( $L = n \hbar$ ) durch

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (4.3.7)$$

gegeben ist. Wolfgang Pauli (Nobelpreis 1945) entdeckte 1925 sein berühmtes Ausschließungsprinzip (**Pauliprinzip** oder **Pauliverbot**):

Im Atom kann jeder Elektronenzustand  $(n, l, m, s)$  nur von **einem** Elektron besetzt sein!

Im Mehrelektronenatom sind die Energien zu verschiedenen Zuständen, auch bei gleicher Hauptquantenzahl, i.a. verschieden. Da das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons mit wachsendem  $n$  weiter vom Kern entfernt ist, kommt es zu einem schalenartigen Aufbau der Elektronenhülle eines Atoms.

$n$	1	2	3	4	5
Bezeichnung der Schale:	K	L	M	N	O
maximale Besetzung ( $2n^2$ ):	2	8	18	32	50

Die Spektren der Alkalimetalle können annähernd durch eine etwas abgewandelte Bohr'sche Theorie beschrieben werden (**Leuchtelektronenmodell**): Die Kernladung wird durch die Elektronen der inneren Schalen teilweise abgeschirmt; man verwendet daher in den Bohr'schen Formeln eine **effektive Kernladung**  $Z_{\text{eff}} < Z$ :

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} \approx Z_{\text{eff}}^2 \cdot R_{\infty} \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (4.3.8)$$

#### 4 Atommodelle

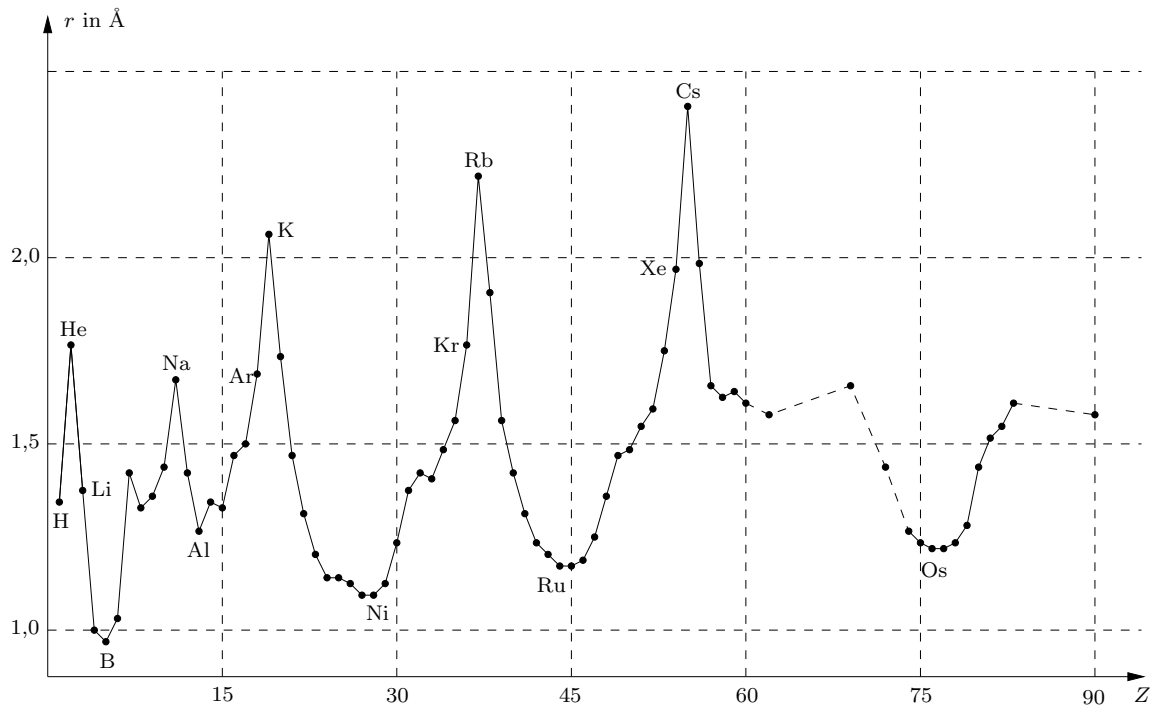


Abb.4.3.4 Atomradien in Abhängigkeit von der Ordnungszahl  $Z$

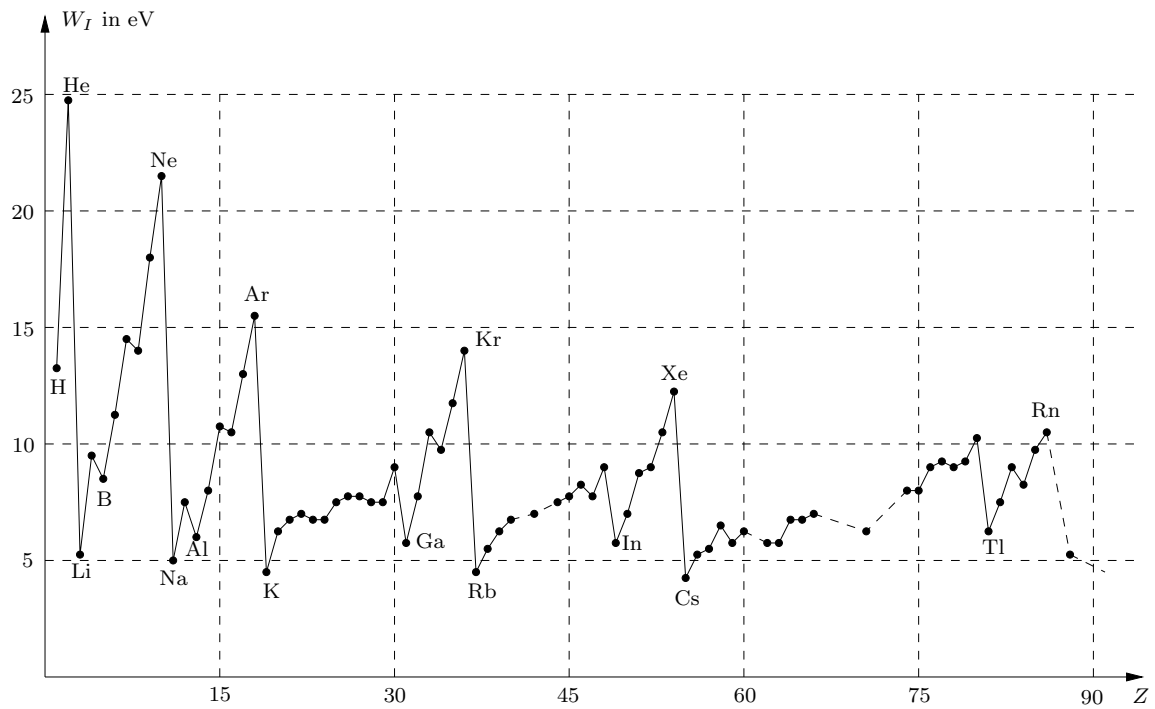


Abb.4.3.5 Ionisierungsenergien in Abhängigkeit von der Ordnungszahl  $Z$

Es folgt eine qualitative Erklärung der Größe der Atomradien in Abhängigkeit von der Kernladungszahl  $Z$  (siehe Abb.4.3.4). Wir gehen von der vereinfachenden Annahme aus, dass die Elektronen der äußeren Schale tatsächlich weiter außen sind als die Elektronen der inneren Schalen (wir wissen natürlich, dass sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Elektronen überschneiden). Befinden sich  $n$  Elektronen in der äußeren Schale, dann „sieht“ ein Elektron der äußeren Schale unter sich eine effektive Kernladung  $Z_{\text{eff}} \cdot e$ , mit dem maximalen Wert

$$Z \cdot e - (Z - n) \cdot e = n \cdot e \quad (4.3.9)$$

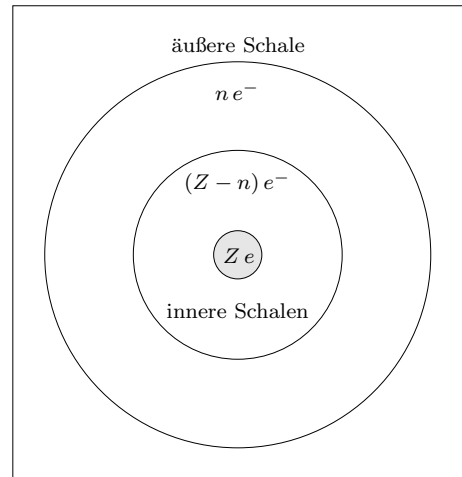


Abb.4.3.6 Zur effektiven Kernladung

Wenn alle anderen Elektronen der äußeren Schale auch noch „unter“ dem betrachteten Elektron sind, dann ist die effektive Kernladung nur noch  $e$ :

$$1 \leq Z_{\text{eff}} \leq n \quad (4.3.10)$$

Für ein Alkaliatom ist  $n = 1$  und damit  $Z_{\text{eff}} \approx 1$ . Mit wachsendem  $Z$  wird  $Z_{\text{eff}}$  zunächst größer und der Atomradius  $r$  kleiner. Wird  $Z$  noch größer, dann wird die äußere Schale immer mehr gefüllt und  $Z_{\text{eff}}$  wird wieder kleiner, der Radius wieder größer. Beim Erreichen des nächsten Alkaliatoms wird eine neue Schale begonnen und der Radius steigt sprunghaft an.

Der große Sprung bei der Ionisierungsenergie von einem Edelgas zum benachbarten Alkaliatom erklärt sich wie folgt: Beim Alkaliatom ist der Radius groß und  $Z_{\text{eff}} \approx 1$ , beim Edelgas ist der Radius kleiner und  $Z_{\text{eff}}$  größer. Wegen (4.2.9) ist die Ionisierungsenergie

$$W_{\text{Ion}} = \frac{Z_{\text{eff}}}{r_n} \cdot \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \quad (4.3.11)$$

damit beim Edelgas viel größer als beim benachbarten Alkaliatom.

### 4.4 Röntgenspektren

Bei einer nicht zu kleinen Beschleunigungsspannung  $U$  einer Röntgenröhre tritt zum **kontinuierlichen Bremsspektrum** (nur von  $U$  abhängig) noch ein vom Material der Anode abhängiges **charakteristisches Linienspektrum**. **W. Kossel** erklärte 1914 das Auftreten diskreter Linien im Röntgenspektrum mit der Bohr'schen Theorie: Ein beschleunigtes Elektron schlägt aus dem Atom ein Elektron einer **inneren Schale** heraus. Dieses Loch wird von einem Elektron einer **äußeren Schale** wieder aufgefüllt.

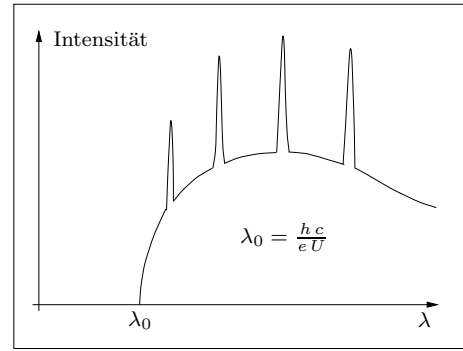


Abb.4.4.1 Röntgenemissionsspektrum

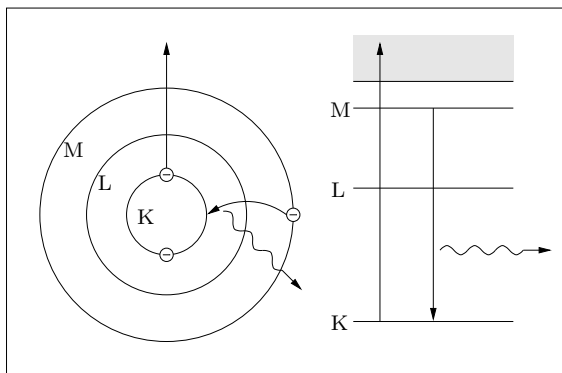


Abb.4.4.2 Beispiel 1

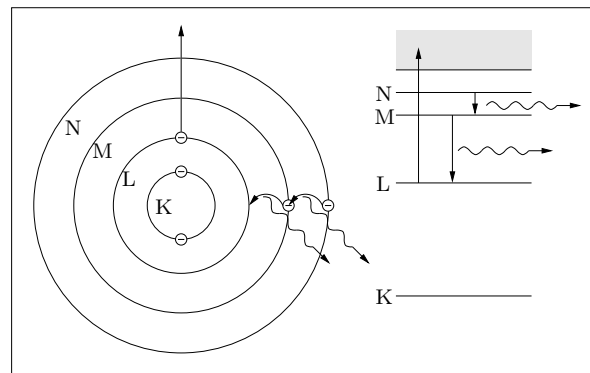


Abb.4.4.3 Beispiel 2

Im ersten Beispiel (siehe Abb.4.4.2) wird ein Elektron der K-Schale herausgeschlagen und von einem Elektron der M-Schale in einem Sprung wieder aufgefüllt - es wird ein Quant der  $K_\beta$ -Linie ausgesendet. Im zweiten Beispiel (siehe Abb.4.4.3) wird ein Elektron der L-Schale herausgeschlagen und von einem Elektron der N-Schale in zwei Sprüngen wieder aufgefüllt - es wird ein Quant der  $L_\alpha$ - und der  $M_\alpha$ -Linie ausgesendet.

Fehlt ein Elektron der K-Schale, dann „sieht“ ein Elektron der L-Schale eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung der Ladung  $(Z - 1)e$  (wenn das K-Elektron im Grundzustand ist). Aus (4.2.15) folgt dann für die Wellenlänge der  $K_\alpha$ -Linie mit  $n = 1$  und  $m = 2$  das **Moseley'sche Gesetz**

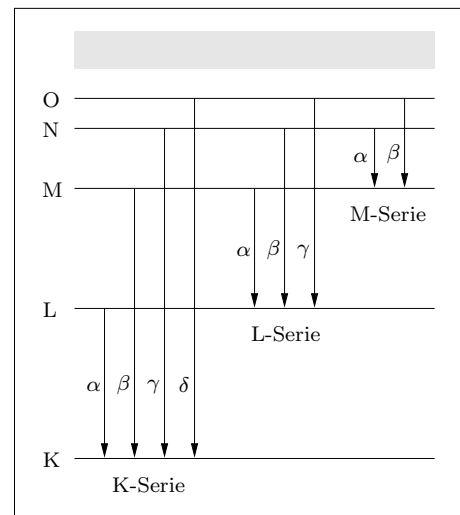


Abb.4.4.4 Diskrete Röntgenlinien

$$\frac{1}{\lambda_{K_\alpha}} = \frac{3}{4} R_\infty (Z - 1)^2 \tag{4.4.1}$$

Für beliebige Röntgenlinien folgt analog

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} \approx R_\infty (Z - a)^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \tag{4.4.2}$$

mit einer von  $m$  und  $n$  abhängigen „Abschirmkonstanten“  $a$ . Das Ungefährzeichen wird verwendet, weil die Wechselwirkung zwischen den Elektronen vernachlässigt wird. Für die  $L_\alpha$ -Linie würde man  $a \approx 9$  erwarten, experimentell erhält man  $a = 7,4$ .

Springt ein Elektron der M-Schale in ein Loch der K-Schale, wird ein Photon der  $K_\beta$ -Linie emittiert. Die Energie dieses Photons ist sicher größer als die Energie eines Photons der  $K_\alpha$ -Linie, d.h. es gilt  $\lambda_{K_\beta} < \lambda_{K_\alpha}$ . Mit  $n = 1$  und  $m = 3$  folgt aus (4.4.2)

$$\frac{1}{\lambda_{K_\beta}} \approx \frac{8}{9} \cdot R_\infty (Z - a)^2 \quad (4.4.3)$$

Auf dem Weg von der M- zur K-Schale „sieht“ das Elektron eine effektive Kernladung von ungefähr  $Z - 9$  bis zu  $Z - 1$ , d.h. es gilt sicher  $a > 1$ . Mit (4.4.3) und (4.4.1) folgt daraus für die Lage der  $K_\beta$ -Linie

$$\lambda_{K_\beta} \approx \frac{8}{9} R_\infty (Z - a)^2 < \frac{8}{9} R_\infty (Z - 1)^2 = \frac{32}{27} \cdot \frac{1}{\lambda_{K_\alpha}}$$

oder zusammengefasst

$$\frac{27}{32} \lambda_{K_\alpha} < \lambda_{K_\beta} < \lambda_{K_\alpha} \quad (4.4.4)$$

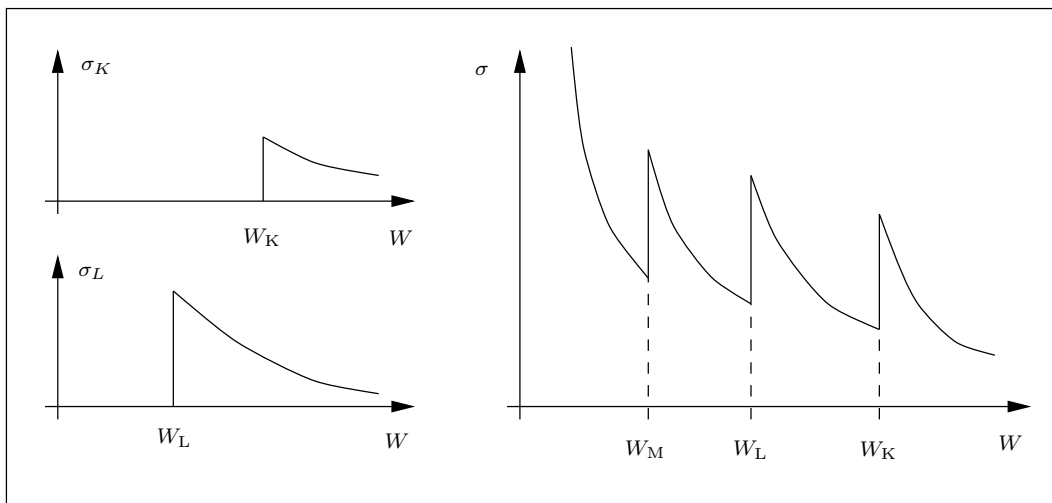


Abb.4.4.5 Röntgenabsorptionsspektrum

Die linken Diagramme in Abb.4.4.5 zeigen den Wirkungsquerschnitt für die Absorption eines Photons durch den Fotoeffekt an einem Elektron einer bestimmten Schale. Die Form der Diagramme folgt aus der Tatsache, dass der Wirkungsquerschnitt für den Fotoeffekt mit wachsender Gammaenergie abnimmt, für Energien kleiner der Ionisierungsenergie aber Null sein muss. Die Überlagerung der Wirkungsquerschnitte für die einzelnen Schalen ergibt den gesamten Wirkungsquerschnitt.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Materiewellen</b>	<b>2</b>
1.1 Elektronenbeugung . . . . .	2
1.2 Die Wellenfunktion und ihre physikalische Bedeutung . . . . .	4
1.3 Wellenpakete als Überlagerung ebener Wellen . . . . .	8
1.4 Teilchen als Wellenpakete . . . . .	16
1.5 Die Unbestimmtheitsrelationen . . . . .	19
<b>2 Stationäre Zustände</b>	<b>25</b>
2.1 Die Schrödingergleichung . . . . .	25
2.2 Potentialbarrieren . . . . .	28
2.3 Gebundene Zustände . . . . .	33
2.4 Der Franck-Hertz-Versuch . . . . .	36
<b>3 Wechselwirkung von elektrom. Strahlung mit Materie</b>	<b>38</b>
3.1 Der Übergang zwischen stationären Zuständen - Spektrallinien . . . . .	38
3.2 Die Lichtquantenhypothese . . . . .	41
3.3 Der Compton-Effekt . . . . .	42
3.4 Der Fotoeffekt . . . . .	46
3.5 Der Wirkungsquerschnitt . . . . .	49
3.6 Die wesentlichen Wechselwirkungen elektromagnetischer Strahlung mit Materie- Überblick . . . . .	51
3.6.1 Kohärente Streuung oder Rayleigh-Streuung ( $f = f'$ ) . . . . .	51
3.6.2 Comptonstreuung . . . . .	51
3.6.3 Fotoeffekt . . . . .	52
3.6.4 Paarerzeugung . . . . .	52
<b>4 Atommodelle</b>	<b>54</b>
4.1 Das Atommodell von Rutherford . . . . .	54
4.2 Das Bohr'sche Atommodell . . . . .	61
4.3 Quantenmechanische Atomtheorie . . . . .	64
4.4 Röntgenspektren . . . . .	68