

# Atome und Moleküle

Markus Lippitz

9. Oktober 2024



# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Die Grenzen der klassischen Physik</b>	<b>5</b>
<b>2 Quantisierung</b>	<b>15</b>
<b>3 Wellenfunktionen</b>	<b>31</b>



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International" Lizenz](#).



# Kapitel 1

## Die Grenzen der klassischen Physik

Markus Lippitz  
9. Oktober 2024

### Überblick

In diesem Kapitel geht es um den Aufbau und die Eigenschaften von Atomen. Atome entziehen sich unserer Anschauung. Wir können sie nicht direkt erfahren. Wir können nur die Ergebnisse von Experimenten beobachten und versuchen, daraus Schlüsse zu ziehen. Daraus entwickeln wir ein physikalisches Modell, das aber eigentlich nur in unserer Vorstellung existiert. In diesem Kapitel geht es daher viel darum, welche experimentellen Beobachtungen mit welcher Vorstellung noch vereinbar sind oder wie man das Modell anpassen muss, um das Experiment beschreiben zu können. Wir folgen hier der erkenntnisgeschichtlichen Entwicklung gegen Ende des 19. Jahrhunderts.

Wir diskutieren vier Bereiche

- Wie kann man mit Licht etwas über einen Objekt erfahren? Heiße Körper emittieren ein kontinuierliches Spektrum, atomare Gase dagegen diskrete Linien.
- Woher wissen wir, dass Atome aus noch kleineren Teilchen aufgebaut sind? Die Elektronenstrahlröhre ermöglichte wichtige Experimente.
- Wie konnte das Rutherford'sche Streuexperiment zeigen, dass sich die gesamte Masse eines Atoms im Kern befindet?
- Woraus besteht dieser Kern?

Dieses Kapitel entspricht in seinem Aufbau dem Kapitel 37 von Knight, 2023. Gute andere Darstellungen finden sich in Halliday, 2020, Demtröder, 2016 und Haken und Wolf, 2001.

### Was bislang geschah

Die Vorstellung, dass Materie aus nicht weiter teilbaren Teilchen, den Atomen, besteht, geht auf die griechischen Philosophen Leukipp und Demokrit im 5. Jahrhundert vor Christus. 'Atomos' ist griechisch und bedeutet 'unteilbar'. Das war aber nur eine Vorstellung, die durch keine Beobachtung gestützt wurde.



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International" Lizenz](#).

In der Chemie konnte John Dalton um 1808 zeigen, dass chemische Reaktionen gut verstanden werden können, wenn man von ganzzahligen Verhältnissen der beteiligten Elemente ausgeht ('Gesetz der multiplen Proportionen'). Abweichungen vom idealen Gasgesetz lassen Rückschlüsse auf die Größe der Atome zu.

Licht wurde seit dem Doppelspaltexperiment von Thomas Young (1801) als Welle verstanden und schließlich von James Clerk Maxwell 1862 als elektromagnetische Welle beschrieben.

Als Max Planck sich um 1874 für ein Physikstudium interessierte, sagte ihm der Münchener Physikprofessor Philipp von Jolly, dass eigentlich schon alles erforscht sei und es keine wesentlichen Fragen mehr gäbe.

Eine Reihe von Experimenten zeigte Ende des 19. Jahrhunderts Widersprüche zu den bis dahin gültigen Modellen auf. Diese Experimente zum Aufbau der Atome und zur Natur des Lichts begründeten die 'Moderne Physik'. Auch wenn wir Atome nicht direkt sehen können, so können wir doch aus verschiedenen Experimenten Rückschlüsse auf ihren Aufbau ziehen.

## Schwarzkörperstrahlung

Wichtige Erkenntnisse über die Natur des Lichts stammen aus einer einfachen Beobachtung: Viele leuchtende Objekte ändern ihre Farbe in Abhängigkeit von der Temperatur. Der Glühfaden einer Glühbirne ändert seine Farbe von grau zu gelb, wenn er durch den fließenden Strom nur heiß genug wird. Stahl ändert seine Farbe im Kohlefeuer der Schmiede. Lava ist im kalten Zustand schwarz, am Vulkan aber rot bis gelb.

In der Wärmelehre haben Sie gesehen, dass die Wärmestrahlung eines Körpers mit der vierten Potenz seiner Temperatur  $T$  zunimmt

$$\dot{Q} = e \sigma A T^4 \quad (1.1)$$

mit der Emissivität  $e$ , der Stefan-Boltzmann-Konstanten  $\sigma$  und der Objektoberfläche  $A$ . Die Emissivität  $e$ , auch Emissionsgrad genannt, ist eins für einen idealen Wärmestrahler. Dieser wird als Schwarzkörper und das von ihm abgestrahlte Licht als Schwarzkörperstrahlung bezeichnet.

Ende des 19. Jahrhunderts versuchte man, möglichst ideale Schwarzkörper zu konstruieren und deren Emissionsspektren möglichst genau zu messen. Abbildung 1.1 zeigt Schwarzkörperspektren für verschiedene Temperaturen. Mit steigender Temperatur nimmt die spektrale Intensität bei jeder Wellenlänge zu. Gleichzeitig verschiebt sich das Maximum zu kurzen Wellenlängen, entsprechend dem *Wien'schen Verschiebungsgesetz*

$$\lambda_{peak} = \frac{b}{T} \quad (1.2)$$

mit der Wien'schen Verschiebungskonstanten  $b \approx 2898 \mu\text{m K}$ .

Damals erwartete man, dass die Form des Schwarzkörperspektrums aus einer gut verstandenen Thermodynamik und der Maxwell'schen Theorie der elektromagnetischen Strahlung abgeleitet werden könnte. Man fand zwei Modelle<sup>1</sup>, die aber jeweils nur einen Teil des Spektrums richtig beschrieben: Das Wiensche Gesetz den langwelligen Teil, das von Rayleigh und Jeans den kurzwelligen. Schlimmer noch: Das Rayleigh-Jeans-Gesetz liefert ein

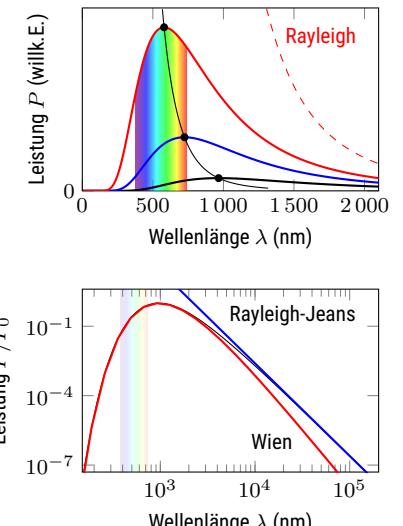


Abbildung 1.1: Schwarzkörperspektren.  
Oben: lineare Darstellung für  $T = 3000 \text{ K}, 4000 \text{ K}$  und  $5000 \text{ K}$ . Unten: Doppellogarithmische Darstellung (3000 K) mit Modellen von Wien und Rayleigh-Jeans.

<sup>1</sup> Wir diskutieren im nächsten Kapitel die heute akzeptierte Form und finden dann diese beiden alten Modelle als Grenzfälle

divergierendes Spektrum, so dass auch die abgestrahlte Leistung divergiert. Das ist die *UV-Katastrophe*.

Trotz des einfachen Experiments 'Spektrum eines schwarzen Körpers' und eigentlich gut verstandener Theorien zur Elektrodynamik und Thermodynamik funktioniert hier also etwas nicht.

Spektren über der Wellenlänge und über der Frequenz Ich zeige hier nur Spektren über der Wellenlänge  $\lambda$ . Mit  $\nu = c/\lambda$  kann man auch zur Frequenz  $\nu$  übergehen. Dabei ändert sich aber nicht nur die x-Achse, sondern auch der y-Wert des Spektrums, da eigentlich  $I(\lambda)d\lambda$  bzw.  $I(\nu)d\nu$  aufgetragen wird und somit auch  $d\lambda$  in  $d\nu$  umgerechnet werden muss. Dies wird besonders deutlich, wenn man bedenkt, dass das Integral über das Spektrum unabhängig von der Skalierung der x-Achse immer die gleiche Leistung ergeben muss. Bei dieser Umrechnung ändert sich die Form des Spektrums und damit die Lage des Maximums, also

$$\nu_{peak} \neq \frac{c}{\lambda_{peak}} . \quad (1.3)$$

### Zum Weiterdenken

1. Sonnenlicht lässt sich gut durch ein Schwarzkörperspektren von etwa 5000 K beschrieben. Die Erde hingegen strahlt wie ein Körper von 300 K in den Weltraum ab. Skizzieren Sie diese beiden Spektren und leiten Sie daraus das Transmissionsspektrum der Atmosphäre ab, das zum natürlichen Treibhauseffekt führt.

## Spektren von atomaren Gasen

In einer Gasentladungsrohre fließt ein elektrischer Strom durch ein Gas, das in einer Glaskugel eingeschlossen ist. Die bunten Lichter der Leuchtreklame oder 'Neonröhren' basieren auf diesem Prinzip, haben aber manchmal noch einen leuchtenden Phosphor als Beschichtung auf der Röhre selbst. Das Emissionsspektrum unterscheidet sich deutlich von dem eines schwarzen Strahlers. Es besteht aus diskreten, sehr scharfen Linien, die sich für jedes Element wie ein Fingerabdruck unterscheiden. Neon zum Beispiel hat viele Linien im roten Spektralbereich (Abb. 1.2 oben). Sie erzeugen das rote Licht der Leuchtreklame.

Man kann auch das Absorptionsspektrum der Atome eines Gases messen, indem man beispielsweise ein kontinuierliches Schwarzkörperspektrum durch ein Gas schickt und dann spektroskopiert. Man findet diskrete, schmale, dunkle Linien, die das Gas aus dem breiten Spektrum des Schwarzkörpers herausausschneidet (Abb. 1.2 unterschiedlichen). Diese Absorptionslinien sind jedoch nur eine Teilmenge der Emissionslinien. Für jede Absorptionslinie gibt es eine Emissionslinie bei der gleichen Wellenlänge, aber nicht umgekehrt.

Mit der klassischen Physik war das alles nicht zu erklären. Warum diskrete Linien, warum für jedes Element anders, warum mehr in der Emission als in der Absorption?

Der einzige Lichtblick war die Entdeckung des Schweizer Lehrers Johann Balmer, dass die Wellenlänge der Emissionslinien des einfachsten Atoms,

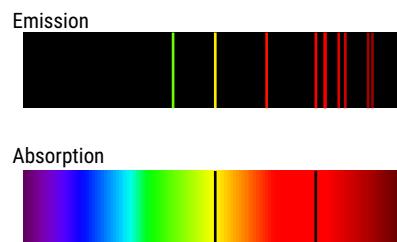


Abbildung 1.2: Spektrallinien von Ne in Emission und Absorption.



Abbildung 1.3: Die Balmer-Serie von Wasserstoff.

des Wasserstoffs, durch eine einfache Formel beschrieben werden kann:

$$\lambda = \frac{91.18 \text{ nm}}{\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}} \quad \text{mit } m = 1, 2, 3, \dots \quad \text{und } n = m + 1, m + 2, \dots \quad (1.4)$$

Diese *Balmer-Formel* beschreibt für  $m = 2$  die zuerst beobachtete *Balmer-Serie*, eine Abfolge von Linien im sichtbaren Spektralbereich, die immer enger zusammenrücken und gegen 365 nm konvergieren (Abb. 1.3).

Die Balmerformel ist rein empirisch. Die zufällig gefundene Kombination ganzer Zahlen liefert die Position der Linien. Worauf sie beruht, ist zu diesem Zeitpunkt noch völlig unklar. Eine so einfache Beziehung sollte eigentlich eine einfache Begründung haben.

## Kathodenstrahlen

Mit zunehmender Verbesserung der Vakuumtechnik ist aufgefallen, dass in Gasentladungsrohren nicht nur das Gas in einer für das Gas charakteristischen Farbe leuchtet, sondern auch Teile der Gläsröhre grünlich leuchten. Von der Kathode scheinen Strahlen auszugehen, die sich geradlinig ausbreiten. Gegenstände im Strahlengang werfen einen Schatten. Diese Strahlen nannte man Kathodenstrahlen.

William Crookes und andere entdeckten Ende des 19. Jahrhunderts, dass Kathodenstrahlen mit einem elektrischen Strom in der Gasentladungsrohre zusammenhängen. Die Strahlen werden durch ein Magnetfeld abgelenkt, als wären sie negativ geladen. Und die Strahlen sind unabhängig vom Material der Kathode.

Geladene Gasteilchen könnten eine Erklärung sein. Ihre mittlere freie Weglänge ist aber viel kleiner als die Länge der Röhre. Sie müssten sehr oft zusammenstoßen und könnten sich nicht geradlinig ausbreiten.

Maxwells Theorie der elektromagnetischen Strahlung war damals noch sehr jung. Man wusste, dass sich Licht nicht von Magnetfeldern ablenken lässt. Man konnte aber nicht ganz ausschließen, dass Strahlung mit einer ganz anderen Wellenlänge abgelenkt werden könnte.

Wilhelm Röntgen untersuchte diese Kathodenstrahlen. Er entdeckte 1895, dass eine andere Art von Strahlung entsteht, wenn die Kathodenstrahlen auf eine Metallanode treffen. Diese später als Röntgenstrahlung bezeichnete Strahlung verlässt die Entladungsrohre, durchdringt praktisch alle Materialien und belichtet Filme. Erst später wurden Röntgenstrahlen als sehr kurzwellige elektromagnetische Wellen erkannt, die ebenfalls den Maxwell-Gleichungen unterliegen.

Joseph John Thomson schließlich hatte die Idee, die Kathodenstrahlen in einem Magnetfeld so abzulenken, dass sie auf eine Anode treffen. Nur in diesem Fall fließt ein Strom durch die Anode, nicht aber, wenn der Kathodenstrahl auf die daneben liegende Glaswand trifft. Damit war bewiesen, dass der Strahl aus negativ geladenen Teilchen besteht.



Abbildung 1.4: Aufbau einer Kathodenstrahlröhre

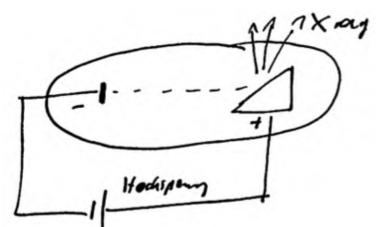


Abbildung 1.5: Aufbau einer Röntgen-Röhre

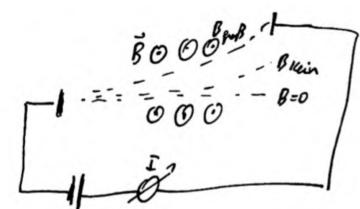


Abbildung 1.6: Ablenkung von Kathodenstrahlen im Magnetfeld

## Gekreuzte E- und B-Felder

Die Ablenkung einer Ladung  $q$  mit der Geschwindigkeit  $v$  in einem Magnetfeld  $B$  aufgrund der Lorentzkraft

$$F_B = q v B \quad (1.5)$$

führt zu einer Kreisbahn mit dem Radius  $r$

$$r = \frac{mv}{qB} \quad (1.6)$$

mit der Masse  $m$  des Teilchens. Die Ablenkung im Magnetfeld hängt also von zu vielen Unbekannten ab, um eine Aussage über das Teilchen machen zu können.

J.J. Thomsons Idee war, gleichzeitig ein elektrisches Feld  $E$  senkrecht zum B-Feld anzulegen. Die Coulombkraft wirkt dann der Lorentzkraft entgegen und kann die Ablenkung kompensieren. Für den Fall der geradlinigen Ausbreitung gilt daher

$$F_B = qvB = qE = F_E \quad \text{bzw.} \quad v = \frac{E}{B} \quad . \quad (1.7)$$

Damit kann die Geschwindigkeit  $v$  bestimmt werden. Bleibt dann alles unverändert, wird nur das E-Feld abgeschaltet, so kann mit der nun bekannten Geschwindigkeit  $v$  aus der Kreisbahn das Ladungs-Masse-Verhältnis bestimmt werden

$$\frac{q}{m} = \frac{v}{rB} \quad . \quad (1.8)$$

## Das Elektron

J.J. Thomson fand<sup>2</sup> für die Teilchen im Kathodenstrahl  $q/m \approx 1 \cdot 10^{11} \text{ C/kg}$ , etwa 1000 mal größer als der aus der Elektrolyse bekannte Wert des Wasserstoffions. Aber ob die Masse kleiner oder die Ladung größer war als beim Wasserstoffion oder beides, konnte nicht gesagt werden. Man vermutete aus der Elektrolyse, dass die Ladung quantisiert ist, aber der Zusammenhang zwischen Kathodenstrahl und Elektrolyse war nicht offensichtlich.

Thomson argumentierte, dass Kathodenstrahlen dünne Metallfilme durchdringen können, Atome jedoch nicht. Daher müssten die Kathodenstrahlen aus viel kleineren Teilchen bestehen, die wiederum Bestandteil des Atoms sind. Diese Teilchen wurden später als Elektronen bezeichnet.

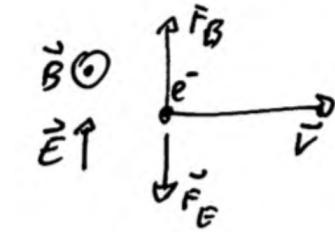


Abbildung 1.7: Kräfte auf eine bewegte Ladung

<sup>2</sup> heutiger Wert des Elektrons  $q/m \approx 1.76 \cdot 10^{11} \text{ C/kg}$

## Millikans Öltröpfchen-Experiment: die Elementarladung

Thomson hatte das Verhältnis  $q/m$  bestimmt, aber nicht die Bestandteile aufgelöst. Dies gelang 1906 Robert Millikan. Er ließ sehr kleine Öltröpfchen in einem Plattenkondensator schweben. Aus dem Gleichgewicht von Gewichtskraft und Coulombkraft ergibt sich

$$F_g = M g = Q E = F_C \quad \text{und} \quad Q = \frac{Mg}{E} \quad (1.9)$$



Abbildung 1.8: Skizze des Aufbaus von Millikan

mit der Masse  $M$  und der Ladung  $Q$  des Tropfens. Millikan bestimmte die Masse des Tropfens, indem er das elektrische Feld abschaltete und den Tropfen fallen ließ. Da der Tropfen sehr klein ist, erreicht er schnell die Geschwindigkeit, bei der die Schwerkraft durch die Auftriebskraft des Tropfens in der Luft, vermindert um die Reibungskraft der Bewegung in der Luft, kompensiert wird, so dass eine konstante Geschwindigkeit  $v$  erreicht wird

$$\rho_{oel} \frac{4}{3} \pi R^3 g = \rho_{luft} \frac{4}{3} \pi R^3 g - 6\pi\eta R v \quad (1.10)$$

mit dem Radius  $R$  des Tropfens und der Viskosität  $\eta$  von Luft und den Dichten  $\rho_{luft, oel}$ . Aus gemessener Geschwindigkeit  $v$  ergibt sich der Radius  $R$  des Tropfens und so seine Masse  $M$ , und daraus schließlich die Ladung  $Q$ .

Millikan untersuchte eine große Anzahl von Tropfen. Er fand heraus, dass sowohl positiv als auch negativ geladene Tropfen immer eine Ladung  $Q$  haben, die als ganzzahliges Vielfaches einer Elementarladung  $e$  dargestellt werden kann. Diese Elementarladung ist heute

$$e = 1.60 \cdot 10^{-10} C \quad . \quad (1.11)$$

Zusammen mit dem Wert für  $q/m$  ergibt sich daraus die Masse des Elektrons zu

$$m_{elec} = 9.11 \cdot 10^{-31} kg \quad . \quad (1.12)$$

### Zum Weiterdenken

2. Machen Sie sich die Argumente noch einmal klar: Warum ist ein Elektron kleiner als ein Atom? Warum ist es Bestandteil eines Atoms?

## Der Atomkern

Ein Atom ist also nicht unteilbar, wie die Griechen vermuteten, sondern zumindest Elektronen können aus dem Atom entfernt werden. Woraus besteht der Rest? Er muss positiv geladen sein, um die negative Ladung der Elektronen auszugleichen. Und er muss fast die gesamte Masse des Atoms ausmachen, denn die Elektronen sind ja viel leichter als die Atome.

J.J. Thomson schlug ein Modell vor, das 'Rosinenkuchenmodell': Masse und positive Ladung sind wie der Teig eines Kuchens über das ganze Atom verteilt, das eine Kugel von etwa  $10^{-10} m = 1 \text{\AA}$  Durchmesser bildet. In diesem Teig sind die viel kleineren Elektronen als Rosinen eingebettet.<sup>3</sup>

Ernest Rutherford wollte 1911 dieses Modell überprüfen, indem er mit seinen Mitarbeitern Marsden und Geiger die kurz zuvor beim radioaktiven Zerfall entdeckten Alphateilchen auf eine dünne Goldfolie schoss. Alphateilchen bestehen aus zwei Protonen und zwei Neutronen, sind also doppelt positiv geladene Heliumkerne. Ihr Verhältnis  $q/m$  war schon damals bekannt.

Nach dem Thomson-Modell würde man erwarten, dass die Alphateilchen nur wenig abgelenkt werden. Die Ladungen im Atom kompensieren sich und keine kann einen großen Effekt haben. Das sieht man auch, wenn man den transmittierten Alphastrahl auf einem Schirm beobachtet.

Die Überraschung war jedoch, dass einige Alphateilchen auch in sehr hohen Winkeln abgelenkt wurden, manche fast reflektiert. Das lässt sich mit

<sup>3</sup> Achtung: Nach heutigem Verständnis würde man den Atomkern als eine einzige Rosine in einer Elektronenwolke als Teig sehen. Das ist genau das Gegenteil des Thomson-Modells!



Abbildung 1.9: Skizze des Versuchsaufbaus von Rutherford

dem Thomson-Modell nicht erklären. Dazu muss die Masse (und genügend positive Ladung) in einem viel kleineren Volumen als dem des Atoms konzentriert sein. Rutherford hatte den Atomkern entdeckt. Die positive Ladung und fast die gesamte Masse sind in dem sehr kleinen Atomkern mit einem Durchmesser von etwa  $10^{-14}\text{ m} = 10\text{ fm}$  konzentriert. Der Rest des Atoms ist leer. Die Elektronen spielen für dieses Streuexperiment keine Rolle, da ihre Masse viel kleiner ist als die der Alphateilchen.

## Rutherford'sche Streuformel

Im Rutherford-Experiment wird die Anzahl  $N(\theta)$  der um den Winkel  $\theta$  abgelenkten Alphateilchen gemessen. Dabei ist die Größe des Detektors zu berücksichtigen, die durch den Raumwinkel  $d\Omega$  beschrieben wird. Die Streu- effizienz wird durch den integralen Streuquerschnitt  $\sigma$  bzw. durch den differenziellen Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{N(\theta)}{N_0} \quad (1.13)$$

beschrieben, mit der Gesamtzahl  $N_0$  aller Alphateilchen.

Das Rutherford-Modell kann rein klassisch modelliert werden. Man beschreibt die Bahn eines geladenen Teilchens im Coulombpotential einer punktförmigen geladenen Masse unter Berücksichtigung der Energie- und Impulserhaltung. Da das Problem rotationssymmetrisch um die Achse Alpha- Quelle – Atomkern ist, wird nur der sogenannte Stoßparameter  $b$  berücksichtigt, der den Abstand der nicht abgelenkten Bahn des Alpha-Teilchens von dieser Symmetrieachse angibt. Man findet<sup>4</sup> eine charakteristische  $\sin^{-4}(\theta/2)$ -Abhängigkeit:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left( \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 2E_{kin}} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (1.14)$$

wobei  $Q$  und  $q$  die Ladungen des Kerns und des Alphateilchens und  $E_{kin}$  die kinetische Energie des weit vom Kern entfernten Alphateilchens sind.

Zum Weiterdenken

3. Experimentieren Sie mit der Simulation<sup>5</sup> und erklären Sie Ihre Beobachtungen.
4. Wie ändert sich die Geschwindigkeit des Alpha-Teilchens zwischen Quelle und Detektor? Oder bleibt sie gleich?

## Elektronenvolt

Nun ist es an der Zeit, die sehr praktische Einheit 'Elektronenvolt' einzuführen. Die Angabe einer Energie in Joule ist für makroskopische Fragestellungen sinnvoll. Deshalb wurde diese Einheit eingeführt. Für Objekte wie Atome und Kerne ist sie nicht mehr geeignet.

Wir verwenden hier die Einheit 'Elektronenvolt', abgekürzt 'eV'. Sie beschreibt die Energie  $\Delta E$ , die ein Elektron aufgenommen hat, wenn es eine Potentialdifferenz von  $\Delta U = 1\text{ V}$  durchlaufen hat, also

$$\Delta E = e\Delta U \quad \text{und somit} \quad 1\text{eV} = 1.60 \cdot 10^{-19}\text{ J} \quad . \quad (1.15)$$

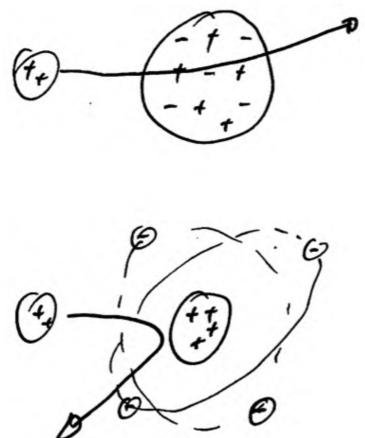


Abbildung 1.10: Die Modelle von Thomson und Rutherford sagen unterschiedliche Bahnen des Alphateilchens vorbaus.

<sup>4</sup> dies ist eine Übungsaufgabe



Abbildung 1.11: Verteilung der Auftreffpunkte der Alpha-Teilchen auf einem Film im Rutherford-Versuch. Die horizontale Koordinate entspricht dem Ablenkwinkel.

<sup>5</sup> Simulation 'rutherford\_scattering'

Hier ist in mehrfacher Hinsicht Vorsicht geboten: Die Einheit besteht aus zwei Zeichen (wie Pa), was insbesondere in Kombination mit Kilo-, Mega-, etc. zunächst ungewohnt sein kann:  $1\text{eV} = 1000\text{eV}$ . Und das 'V' von Volt taucht auf, ohne dass eine Spannung beschrieben wird. Da  $1\text{J} = 1\text{VAs}$  ist  $1\text{eV} = 1.60 \cdot 10^{-19}\text{VAs}$ , aber die beiden V haben eine unterschiedliche Bedeutung.

## Aufbau des Atomkerns

Das Periodensystem der Elemente wurde 1869 von Dmitri Mendelejew vorgeschlagen. Die Position eines Elements ergibt sich aus seiner Ordnungszahl  $Z$ , die immer eine ganze Zahl ist. Sie gibt auch an, wie viele Elektronen ein Atom besitzt und, da es insgesamt ladungsneutral sein muss, wie viele positiv geladene Protonen es besitzt.

Aus der Chemie ist jedoch bekannt, dass die Masse von Elementen mit ähnlicher Ordnungszahl sehr unterschiedlich sein kann: Wasserstoff : Helium : Lithium geht in der Ordnungszahl 1:2:3, in der Masse aber wie 1:4:7.

Thomsons Experimente zur Masse geladener Ionen zeigten, dass chemisch identische Elemente mit unterschiedlichen Massen auftreten. Neon z.B. überwiegend mit der 20-fachen Masse des Wasserstoffs, in geringen Anteilen aber auch mit der 22-fachen und noch seltener mit der 21-fachen Masse.

Erst die Entdeckung des Neutrons im Jahr 1932 brachte Klarheit. Neutronen sind ungeladene Teilchen mit einer sehr ähnlichen Masse wie die Protonen. Die chemischen Elemente existieren in verschiedenen *Isotopen*, die den gleichen Platz im Periodensystem einnehmen (gleiche Ordnungszahl  $Z$ , d.h. gleiche Elektronen- bzw. Protonenzahl), aber unterschiedliche Massen, d.h. unterschiedliche Neutronenzahlen haben.

Man unterscheidet die Isotope nach ihrer Massenzahl  $A = Z + N$  mit der Neutronenzahl  $N$ . Die oben genannten Neonisotope sind also  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{22}\text{Ne}$  und  $^{21}\text{Ne}$ . Die Ordnungszahl verbirgt sich im chemischen Symbol Ne, da alle Neonatome immer 10 Protonen besitzen. Dieses  $Z = 10$  definiert den Namen 'Neon'.

### Zum Weiterdenken

5. Vollziehen Sie die hier angegeben Zahlenwerte im Periodensystem und in einer Isotopentafel nach!
6. Welche anderen Isotope von Neon gibt es?

## Grenzen der klassischen Physik

Die Ende des 19. und Anfang des 20. Jahrhunderts durchgeführten Experimente waren beeindruckend und zeigten den Aufbau der Atome. Vieles konnte jedoch nicht erklärt werden. Das Problem der diskreten Atomspektren und des breiten Schwarzkörperspektrums wurde bereits erwähnt. Aber auch das Rutherford'sche Atommodell hat einen Pferdefuß: Nach der Maxwell-schen Theorie der Elektrodynamik müsste eine Ladung, die sich beschleunigt bewegt, eine Quelle elektromagnetischer Strahlung sein. Eine Kreisbewegung

ist eine beschleunigte Bewegung, ein kreisendes Elektron müsste also Energie verlieren und in kürzester Zeit in den Atomkern stürzen. Dies scheint nicht der Fall zu sein, aber warum nicht?

## Zusammenfassung

Schreiben Sie hier ihre persönliche Zusammenfassung des Kapitels auf. Konzentrieren Sie sich auf die wichtigsten Aspekte.

## Literatur

- Demtröder, Wolfgang (2016). *Experimentalphysik. Atome, Moleküle und Festkörper*. 5., neu bearbeitete und aktualisierte Auflage. Bd. 3. Berlin [u.a.]: Springer. [↗](#).
- Haken, H. und H.C. Wolf (2001). *Atom- und Quantenphysik*. Springer.
- Halliday, David (2020). *Halliday Physik für natur- und ingenieurwissenschaftliche Studiengänge*. Hrsg. von Robert Resnick, Jearl Walker und Stephan W. Koch. Weinheim: Wiley-VCH. [↗](#).
- Knight, Randall Dewey (2023). *Physics for scientists and engineers*. Fifth edition. Pearson. [↗](#).



# Kapitel 2

## Quantisierung

Markus Lippitz  
9. Oktober 2024

### Überblick

Verschiedene Experimente haben gezeigt, dass die Energie eines Atoms oder eines Lichtstrahls *quantisiert* ist, d.h. nur diskrete, wohldefinierte Werte annehmen kann. Die allermeisten Energien sind nicht möglich. In diesem Kapitel diskutieren wir diese Experimente und interpretieren ihre Ergebnisse:

- Der *Photoeffekt*, also das Herauslösen einzelner Elektronen aus einem Metall durch Licht, ist der zentrale Schritt zur Quantenhypothese des Lichts. Für seine Erklärung erhielt Einstein den Nobelpreis.
- Historisch gesehen hatte bereits Max Planck die Quantisierung eingeführt, um die *Schwarzkörperstrahlung* zu erklären.
- Über Louis de Broglie kommen wir zu den *Materiewellen*, also zu einer wellenartigen Beschreibung von Objekten, die wir sonst als Teilchen auffassen.
- Schließlich verwenden wir diese Materiewellen im *Bohrschen Atommodell*, um endlich das Wasserstoffspektrum zu erklären.

Leider funktioniert das nur für Wasserstoff gut, so dass wir ein noch besseres Modell brauchen, was dann in den nächsten Kapiteln folgt. Dieses Kapitel entspricht in seinem Aufbau dem Kapitel 38 von Knight, 2023. Gute andere Darstellungen finden sich in Halliday, 2020, Demtröder, 2016 und Haken und Wolf, 2001. Populärwissenschaftliche Darstellungen finde sich in Tegmark und Wheeler, 2001 und Albert und Galchen, 2009.

### Der Photoelektrische Effekt

Das zentrale und wichtige Experiment, das zur Quantenhypothese der Photonen führte, war der photoelektrische Effekt<sup>1</sup>. Bereits 1887 war bekannt, dass ultraviolettes Licht eine negativ geladene Platte eines Elektrometers entlädt, wobei Elektronen aus der Platte austreten.<sup>2</sup> Phillip Lenard hat dieses Experiment verfeinert. Die ehemals negativ geladene Platte bildet als



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](#) Lizenz.

<sup>1</sup> Auch Photoeffekt bzw. genauer äußerer Photoeffekt genannt

<sup>2</sup> Diese austretenden Elektronen werden manchmal Photoelektronen genannt, sind aber völlig identisch mit allen anderen Elektronen.

Kathode zusammen mit einer Anode und einer Spannungsquelle einen Stromkreis. Die beiden Elektroden sind in einem Vakuumkolben eingeschlossen. Ein Gas spielt also keine Rolle. Wenn Licht auf die Kathode fällt, fließt ein Strom durch den Stromkreis, der gemessen werden kann. Dieser Strom muss also von den Elektronen getragen werden, die sich im Glaskolben von links nach rechts und damit im Uhrzeigersinn durch den Aufbau in Abbildung 2.1 bewegen<sup>3</sup> (technische Stromrichtung entgegen dem Uhrzeigersinn). Ohne Licht gibt es keine austretenden Elektronen und damit keinen Strom.

Lenard untersuchte 1902 den Zusammenhang zwischen der Potentialdifferenz  $\Delta V$  der Spannungsquelle und der Stromstärke  $I$  im Stromkreis und den Einfluss der Lichtintensität und -frequenz  $\nu = c/\lambda$ . Er fand

1. Der Strom  $I$  ist proportional zur Lichtintensität.
2. Es gibt keine Verzögerung zwischen dem Einschalten des Lichtes und dem Beginn des Stromflusses.
3. Es gibt eine minimale Frequenz  $\nu_0$  des Lichts, bzw. eine maximale Wellenlänge. Nur wenn das Licht diese Frequenz überschreitet (also blauer ist) fließt Strom. Dies kann nicht durch eine höhere Intensität kompensiert werden.
4. Die minimale Frequenz  $\nu_0$  hängt von der Art des Metalls in der Kathode ab.
5. Die Stromstärke  $I$  nimmt bei kleinen positiven Spannungen etwas zu. Bei großen Spannungen nimmt sie nicht mehr zu. Bei negativer Spannung wird die Stromstärke kleiner, bis bei einer Spannung  $V = -V_{stop}$  kein Strom mehr fließt ( $V_{stop}$  ist hier also als positiv definiert).
6. Diese Grenzspannung  $V_{stop}$  ist unabhängig von der Lichtintensität.

Aus Sicht der klassischen Physik liefert die elektromagnetische Welle Energie, die im Metall in Form von Wärme gespeichert wird. Dies führt dazu, dass einige Elektronen die Austrittsarbeit überwinden und das Metall verlassen können. Dies wird als Glühemission bezeichnet und wurde beispielsweise in Röhrenfernsehgeräten genutzt.

Die Austrittsarbit  $W$  ist für jedes Metall unterschiedlich. Die meisten Metalle schmelzen, bevor eine nennenswerte Anzahl von Elektronen die Austrittsarbit überwinden kann. Wolfram<sup>4</sup> besitzt eine geeignete Kombination aus Austrittsarbit und hohem Schmelzpunkt und wird daher häufig als Glühwendel verwendet.

Einfache Berechnungen zeigen, dass die Energie eines Lichtstrahls auf zu viele Elektronen verteilt wird, so dass jedes Elektron sehr lange Energie sammeln müsste, um die Austrittsarbit zu überwinden. Oder die Lichteinstrahlung konzentriert sich auf wenige Atome, die dann zu heiß werden. Es muss sich also beim Photoeffekt um etwas anderes als eine Glühemission handeln.

### Bedeutung der Stop-Spannung

Welche Information kann aus der Stopspannung  $V_{stop}$  gewonnen werden? Die Austrittsarbit  $W$  ist die Energie, die mindestens aufgewendet werden

<sup>3</sup> Simulation 'Photoelectric\_Effect'

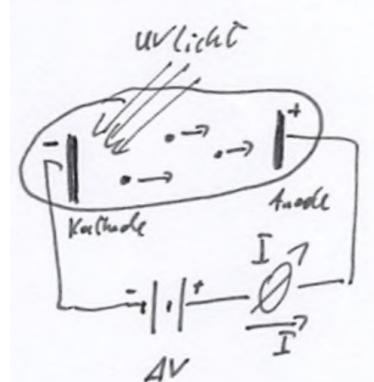


Abbildung 2.1: Skizze des Versuchsaufbaus zum Photoeffekt

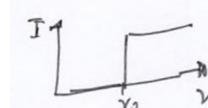


Abbildung 2.2: Es gibt eine Grenzfrequenz  $\nu_0$ , unterhalb derer kein Strom detektiert wird.



Abbildung 2.3: Es gibt eine Stop-Spannung  $-V_{stop}$ , unterhalb derer kein Strom detektiert wird.

<sup>4</sup> Schmelzpunkt 3422 °C, Austrittsarbit 4.5 eV, mit Thorium 3.4 eV

muss, um ein Elektron aus dem Metall zu entfernen. Wird einem Elektron die Energie  $E_{elec}$  zugeführt, so hat es außen maximal die Energie

$$E_{kin}^{max} = E_{elec} - W \quad (2.1)$$

die allein in der Bewegung des Elektrons steckt. Die freigesetzten Elektronen haben also eine Geschwindigkeitsverteilung, deren obere Grenze durch die Austrittsarbeit  $W$  bestimmt wird.

Je nach Potentialunterschied zwischen Kathode und Anode bewegen sich die austretenden Elektronen auf unterschiedlichen Bahnen. Eine positive Anode zieht Elektronen an. Mit zunehmender Anziehungs kraft wandern auch Elektronen zur Anode, die sich ursprünglich in eine andere Richtung bewegt haben. Ab einer bestimmten Potentialdifferenz werden jedoch alle Elektronen gesammelt und der Strom erreicht einen Maximalwert.

Eine negative Anode stößt die Elektronen ab. Die Elektronen müssen gegen den Potentialberg laufen. Je negativer die Potentialdifferenz, d.h. je positiver  $V_{stop}$ , desto weniger Elektronen gelangen zur Anode. Die letzten Elektronen, die es noch zur Anode schaffen, sind die mit der maximalen kinetischen Energie, eben die mit  $E_{kin}^{max}$ . Die Stoppspannung  $V_{stop}$  ist also durch die Austrittsarbeit  $W$  gegeben, wenn man die zugeführte Energie  $E_{elec}$  kennt:

$$V_{stop} = \frac{E_{kin}^{max}}{e} = \frac{E_{elec} - W}{e} \quad . \quad (2.2)$$

Dies nennt man darum Gegenfeldmethode.

## Klassische Deutung des Photoeffekts

Aus Sicht der klassischen Physik ist Beobachtung 1, d.h. die Intensitätsabhängigkeit, gut erklärbar. Beobachtung 5 kann ebenfalls mit der Austrittsarbeit erklärt werden. Für die Grenzfrequenz  $\nu_0$  des Lichts und die Tatsache, dass diese auch durch hohe Lichtintensitäten nicht verschoben werden kann, gibt es kein klassisches Modell. Auch die Stoppspannung sollte klassischerweise von der Lichtintensität und damit von der Temperatur der Elektronen abhängen. Schließlich kann, wie oben diskutiert, das sofortige Einsetzen des Stromflusses nicht klassisch erklärt werden.

### Zum Weiterdenken

1. Schätzen Sie ab, wie groß die Energie pro Elektron wäre, wenn die Energie eines Lichtstrahls gleichmäßig auf alle Elektronen eines Metalls innerhalb der Eindringtiefe verteilt wäre.
2. Schätzen Sie ab, wie heiß ein Metall sein muss, damit eine nennenswerte Anzahl von Elektronen durch Glühemission freigesetzt wird.

## Einstins Quantenhypothese

Im Jahr 1905, dem 'annus mirabilis', veröffentlichte Albert Einstein 4 wichtige Artikel:

1. Die Erklärung des photoelektrischen Effekts, die wir hier besprechen werden und für die er 1921 den Nobelpreis erhielt (Einstein, 1905b).

2. Die Erklärung der Brownschen Bewegung mit der Diffusionskonstante  $D = \mu k_b T$  (Einstein, 1905a).
3. Die spezielle Relativitätstheorie (Einstein, 1905c)
4. Die Masse-Energie-Äquivalenz mit  $E = mc^2$  (Einstein, 1905d)

Der entscheidende Punkt bei der Erklärung des Photoeffektes war die Annahme, dass die Energie einer Lichtwelle quantisiert ist. Es gibt eine kleinste mögliche Energiemenge und alles andere sind ganzzahlige Vielfache davon. Dieses Lichtquantum nennt man heute *Photon*. Es bewegt sich mit Lichtgeschwindigkeit. Die Energie  $E$  eines Photons hängt von der Frequenz  $\nu$  der Lichtwelle ab

$$E = h\nu \quad \text{mit} \quad h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 4,14 \cdot 10^{-15} \text{ eV s} \quad (2.3)$$

mit der Planckschen Konstanten  $h$ .

Neben dieser Annahme der Quantelung der Energie sind noch zwei weitere nötig: Die Absorption und Emission von Licht erfolgt immer in ganzen Quanten, die bei der Absorption vernichtet und bei der Emission erzeugt werden. Und die Energie wird immer auf genau ein Elektron übertragen, nicht auf mehrere.

*Für diese Quantenhypothese gibt es keine klassische Entsprechung.* Wie wir sehen werden, reicht sie aber aus, um den Photoeffekt zu erklären.

Auf das Metall trifft Licht der Frequenz  $\nu$ . Jedes Photon hat dabei die Energie  $E = h\nu$ . Bei der Absorption wird diese Energie auf genau ein Elektron übertragen. Wenn sie ausreicht, um die Austrittsarbeit zu leisten ( $h\nu > W$ ), kann das Elektron das Metall verlassen. Für die Grenzfrequenz des Lichtes gilt dann

$$\nu > \nu_0 = \frac{W}{h} \quad . \quad (2.4)$$

Dies ist eine scharfe Grenze, wie im Experiment beobachtet.

Höhere Lichtintensität bedeutet mehr Photonen, nicht Photonen mit höherer Energie. Es können also mehr Elektronen austreten, es kann mehr Strom fließen, aber nur, wenn die Grenzfrequenz überschritten wird, der Prozess also für ein einzelnes Photon ablaufen kann.

Die Stoppspannung  $V_{stop}$  ergibt sich aus der Energiedifferenz des Photons und der Austrittsarbeit, d.h.

$$V_{stop} = \frac{h\nu - W}{e} \quad . \quad (2.5)$$

Sie ist also insbesondere nicht von der Lichtintensität abhängig.

Schließlich ist die Absorption instantan. Das Elektron nimmt die Energie des Photons sofort auf, es kann sofort austreten und es gibt keine Zeitverzögerung zwischen dem Einfangen des Lichtes und dem Beginn des Stromflusses.

Die Quantenhypothese von Albert Einstein kann also den Photoeffekt vollständig erklären. Sie gilt als Startschuss für die moderne Physik.

Nebenbemerkung Auch nach unserer heutigen Überzeugung ist die Energie in einem Lichtstrahl in Photonen quantisiert, und auch alle anderen Annahmen finden heute noch Zustimmung. Wenn man aber genau ist, braucht man



Abbildung 2.4: Ein Photon wird vernichtet und ein Elektron tritt aus dem Metall aus.

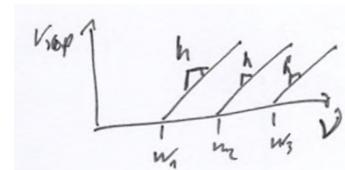


Abbildung 2.5: Stop-Spannung als Funktion der Frequenz  $\nu$  für 3 verschiedene Metalle.

die Annahme der Quantisierung des *Lichtfeldes* nicht zur Erklärung des Photoeffekts. Es genügt, dass das *Elektron* der Quantenmechanik unterliegt. In den üblichen Vorlesungen und Büchern über Quantenmechanik wird das Elektron als quantenmechanisches Objekt mit Operatoren beschrieben, aber das Lichtfeld bleibt klassisch. Dies wird als '1. Quantisierung' bezeichnet und führt z.B. zu Fermis Goldener Regel, die auch den Photoeffekt beschreibt. Erst in der '2. Quantisierung' wird auch das Lichtfeld quantisiert und es werden Effekte beschrieben, die nur durch Photonen erklärt werden können, z.B. 'Anti-Bunching'.

## Plancks Erklärung der Schwarzkörperstrahlung

Hier reiche ich Max Plancks Erklärung der Schwarzkörperstrahlung nach. Er hat sie 1900 veröffentlicht und sie war die Grundlage für Einsteins Quantenhypothese. Max Planck nahm auch an, dass die Energie einer Lichtwelle gequantelt ist, ohne jedoch wirklich von Quanten als Objekten zu sprechen.

### Modendichte eines Resonators

Zunächst müssen wir die Modendichte einführen und berechnen. Diese Art der Berechnung wird später in der Festkörperphysik an verschiedenen Stellen immer wieder vorkommen.

Wir betrachten einen verspiegelten quaderförmigen Hohlraum der Kantenlänge  $L$ . In ihm bilden sich wie in einem Resonator stehende Lichtwellen aus. Für die Wellenlänge  $\lambda$  muss gelten

$$L = n_x \frac{\lambda}{2} \quad \text{bzw.} \quad k_x = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n_x \pi}{L} \quad (2.6)$$

mit  $n_x > 0$ . Der Wellenvektor  $\mathbf{k}$  hat drei Komponenten

$$k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad . \quad (2.7)$$

Im dreidimensionalen  $k$ -Raum sind die möglichen Werte von  $\mathbf{k}$  also die Punkte auf einem kubischen Gitter mit dem Abstand der Gitterpunkte  $\pi/L$ , wobei nur der positive Oktant erlaubt ist, also  $n_{x,y,z} > 0$ . Diese Punkte sind die *Moden* des Resonators bzw. der Hohlraums. Um jeden Punkt gibt es ein würfelförmiges Volumen  $(\pi/L)^3$ , bzw. die Dichte der Punkte im  $k$ -Raum ist  $(L/\pi)^3$ .

Die Frequenz  $\nu$  der Lichtwelle ist proportional zu  $k$ :

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c k}{2\pi} \quad . \quad (2.8)$$

Alle Moden im Frequenzintervall  $(\nu, \nu + d\nu)$  liegen also in einer achtel 'Orangenschale' mit Radius  $k = 2\pi\nu/c$  und Dicke  $dk = 2\pi d\nu/c$  (Abb. 2.6). Die Anzahl der Moden ist damit Volumen geteilt durch Dichte, also

$$Nd\nu = \frac{4\pi k^2 dk}{8(L/\pi)^3} \quad (2.9)$$

und die *Modendichte* im Frequenzraum, normiert auf das Volumen,

$$n(\nu)d\nu = \frac{Nd\nu}{V} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu \quad (2.10)$$

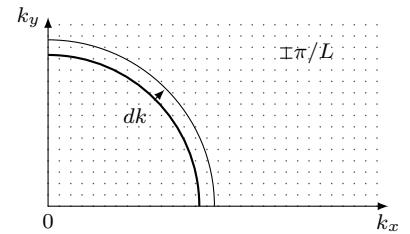


Abbildung 2.6: Moden sind im  $k$ -Raum äquidistant und können so leicht gezählt werden.

wobei ein zusätzlicher Faktor 2 wegen den beiden Polarisationsrichtungen des Lichts hinzugekommen ist. Für höhere Frequenzen  $\nu$  bzw. kürzere Wellenlängen  $\lambda$  gibt es also quadratisch mit  $\nu$  mehr Möglichkeiten, stehende Wellen in einem gegebenen Frequenzintervall  $(\nu, \nu + d\nu)$  zu finden.

### Rayleigh-Jeans-Modell

Ein verspiegelter Hohlraum ist ein Schwarzkörper, wenn das Loch im Hohlraum klein genug ist. Das Lichtfeld im Inneren befindet sich dann im thermischen Gleichgewicht mit den Wänden der Temperatur  $T$ . Das vom Hohlraum emittierte Spektrum ist gleich der Modendichte multipliziert mit der mittleren Energie pro Mode.

In der klassischen Physik beträgt die mittlere Energie  $k_b T$  pro Mode<sup>5</sup>, das Spektrum ist also

$$w(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_b T d\nu . \quad (2.11)$$

Dies ist das Rayleigh-Jeans-Gesetz, das den langwelligen Teil des Spektrums des schwarzen Körpers gut beschreibt. Problematisch ist aber die  $\nu^2$ -Abhängigkeit, die zur Divergenz der emittierten Leistung führt.

<sup>5</sup> weil 2 Freiheitsgrade

### Planck: Quantisierung !

Max Planck nahm an, dass die Energie pro Mode ein Vielfaches von  $h\nu$  sein muss, also

$$E = n h \nu \quad (2.12)$$

mit der von ihm eingeführten Konstanten  $h$ . Es handelt sich also um eine Leiter äquidistanter Zustände. Die Besetzungswahrscheinlichkeit  $p(E)$  ist wie in der Thermodynamik durch die Boltzmann-Verteilung gegeben.

$$p(E) = \frac{e^{-\frac{E}{k_b T}}}{Z} \quad (2.13)$$

wobei die Zustandssumme  $Z$  so gewählt wird, dass das Integral über  $p$  eins ergibt. Damit ist das Spektrum

$$w(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu \sum_n n h \nu p(nh\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_b T}} - 1} d\nu . \quad (2.14)$$

Dieses *Plancksche Strahlungsgesetz* beschreibt die Schwarzkörperstrahlung vollständig.

Nebenbemerkung Heute bezeichnet man Photonen als Bosonen, also als Quantenteilchen mit ganzzahligem Spin, die der Bose-Einstein-Statistik unterliegen. Für solche Teilchen gilt anstelle der Boltzmann-Statistik die Besetzungswahrscheinlichkeit

$$p_{BE}(E) = \frac{1}{Z} \frac{1}{e^{\frac{E}{k_b T}} - 1} . \quad (2.15)$$

Damit kann das Spektrum als Zustandsdichte mal Besetzungswahrscheinlichkeit mal Energie pro Photon geschrieben werden, d.h.

$$w(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h \nu p_{BE}(h\nu) d\nu . \quad (2.16)$$

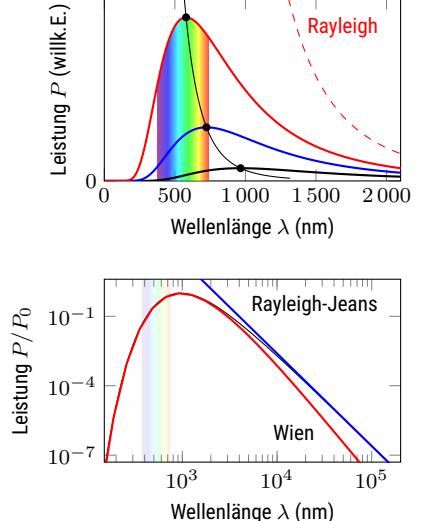


Abbildung 2.7: Schwarzkörperspektren in linearer und logarithmischer Darstellung.

## Wiensches Strahlungsgesetz

Das Wiensche Strahlungsgesetz ergibt sich historisch rückblickend aus dem Planckschen Strahlungsgesetz für Photonenergien viel größer als die thermische Energie, also  $\hbar\nu \gg k_b T$  und damit

$$w(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-\frac{\hbar\nu}{k_b T}} d\nu \quad . \quad (2.17)$$

Wien hat dies natürlich ohne die Plancksche Konstante geschrieben, sondern mit der Wienschen Verschiebungskonstante  $b$ :

$$b = \frac{hc}{xk_b} \quad (2.18)$$

und  $x \approx 4.965$  der Nullstelle eine Gleichung, die das Maximum des Spektrums bestimmt.<sup>6</sup>

<sup>6</sup> siehe engl. Wikipedia

## Photonen

Photonen sind die Quanten des Lichtfeldes. Aber was bedeutet das? Eine der bemerkenswertesten Eigenschaften elektromagnetischer Wellen ist die Möglichkeit der Interferenz. Für Licht zeigt sich dies zum Beispiel im Young'schen Doppelspalteperiment. Auf einem Schirm in einem Abstand hinter zwei eng benachbarten Spalten findet man ein charakteristisches Interferenzmuster.<sup>7</sup> Dieses Muster ist unabhängig von der Intensität des einfallenden Lichtstrahls. Weniger intensives Licht erzeugt nur ein dunkleres Muster. Es kann sein, dass man mit der Kamera länger belichten muss, um noch etwas erkennen zu können.

Inzwischen gibt es Kameras, die einzelne Photonen detektieren können. Immer dann, wenn innerhalb der Belichtungszeit ein Photon detektiert wurde, erscheint an dieser Stelle im Bild ein heller Bildpunkt. Alle anderen Pixel, an denen kein Photon absorbiert wurde, bleiben dunkel. Abbildung 2.8 zeigt (simulierte) Bilder mit unterschiedlichen Belichtungszeiten. Bei kurzen Belichtungszeiten werden insgesamt nur wenige Photonen detektiert. Diese scheinen zufällig über das Bild verteilt zu sein. Mit zunehmender Belichtungszeit erkennt man jedoch, dass sich die Detektionspunkte gruppieren und somit das typische Interferenzmuster entsteht.

Für jedes einzelne Photon ist es also zufällig, wo wir es nachweisen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist jedoch nicht konstant, sondern wird durch das Interferenzmuster bestimmt. Es gibt Orte, an denen es viel wahrscheinlicher ist, ein Photon zu detektieren, als an anderen. An einigen Stellen ist die Wahrscheinlichkeit sogar Null, an den Nullstellen des Interferenzmusters.

Man kann das Experiment auch bei so geringer Lichtintensität durchführen, dass sich zu jedem Zeitpunkt höchstens ein Photon im Versuchsaufbau befindet, das nächste also erst dann die Lichtquelle verlässt, wenn das letzte bereits detektiert wurde. Trotzdem entsteht das Interferenzmuster. Dieses eine Photon muss also irgendwie wissen, dass es zwei Spalte gibt, obwohl es als Teilchen nur durch einen Spalt fliegen kann. Das ist nicht wirklich intuitiv und wird *Welle-Teilchen-Dualismus* genannt. Ein Photon ist sowohl eine Welle als auch ein Teilchen. Unsere Bilder 'Welle' und 'Teilchen' reichen nicht aus, um Photonen wirklich zu beschreiben. Aber wir haben keine besseren.

<sup>7</sup> Simulation 'Quantum\_Wave\_Interference'

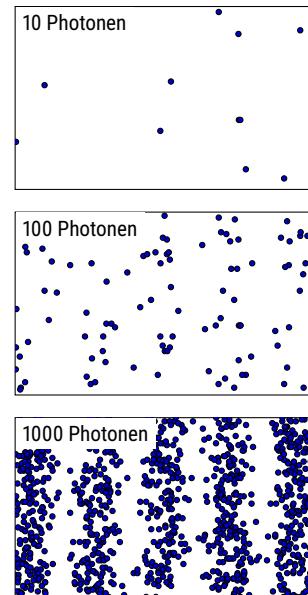


Abbildung 2.8: Ein Interferenzmuster baut sich aus einzelnen Detektionsereignissen auf.

## Compton-Streuung

Ob es Photonen wirklich 'gibt' oder ob sie nur ein gutes Modell sind, um die Absorption von Lichtwellen zu beschreiben, ist eine fast philosophische Frage, die auch in der Physik unterschiedlich beantwortet wird. Das wohl überzeugendste Argument für die Existenz des Photons als Teilchen ist das Streuexperiment von Arthur Compton. Er untersuchte 1922 die Ablenkung hochenergetischer Röntgenphotonen beim Auftreffen auf einen Festkörper. Dabei stellte er fest, dass sich nicht nur die Richtung, sondern auch die Wellenlänge der Photonen zu längeren Wellenlängen hin ändert. Das ist so, als ob ein grüner Laserpointer plötzlich rot wird, nachdem er an eine Wand gestrahlt wurde.

Dieser Effekt kann als Kollision zweier punktförmiger Teilchen 'Photon' und 'Elektron' mit Energie- und Impulserhaltung unter Berücksichtigung des relativistischen Energie-Impulssatzes beschrieben werden. Vor dem Stoß ist das Elektron in Ruhe, danach hat es (relativistische) kinetische Energie. Die Energieerhaltung ist somit

$$h\nu_0 = h\nu_s + E_{kin} = h\nu_s + \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} - m_0 c^2 = h\nu_s + (m - m_0)c^2 \quad . \quad (2.19)$$

Eine elektromagnetische Welle hat auch nach klassischem Verständnis einen Impuls. Dieser muss sich also in den Photonen wiederfinden. Der Impuls  $p$  eines Photons ist

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad \text{bzw.} \quad p = \hbar k = \frac{\hbar}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} \quad . \quad (2.20)$$

Die Impulserhaltung schreibt sich also als

$$\hbar \mathbf{k}_0 = \hbar \mathbf{k}_s + \mathbf{p}_e = \hbar \mathbf{k}_s + \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \quad . \quad (2.21)$$

Man quadriert die Energie- und die Impulsgleichung und setzt sie ineinander ein. Mit den Winkel  $\phi$  zwischen Einfalls- und Streurichtung erhält man

$$\nu_0 - \nu_s = \frac{h}{m_0 c^2} \nu_0 \nu_s (1 - \cos \phi) \quad (2.22)$$

bzw. durch Umschreiben nach Wellenlängen die *Compton-Streuformel*

$$\lambda_s - \lambda_0 = \lambda_C (1 - \cos \phi) \quad \text{mit} \quad \lambda_C = \frac{h}{m_0 c} = 2.42 \cdot 10^{-12} \text{m} \quad . \quad (2.23)$$

Die Konstante  $\lambda_C$  nennt man *Compton-Wellenlänge* des Elektrons.

## Materiewellen

Der Welle-Teilchen-Dualismus funktioniert auch umgekehrt. Wir können nicht nur einer klassischen Welle Teilcheneigenschaften zuschreiben, wie es bei Photonen der Fall ist, sondern wir können auch bei klassischen Teilchen Welleneigenschaften finden. Diese Symmetriedecke hatte Louis de Broglie im Jahre 1924. Ohne experimentelle Belege, rein aus der Analogie zu den 19 Jahren zuvor von Einstein eingeführten Photonen, postulierte er eine heute *de-Broglie-Wellenlänge* genannte Größe, ausgehend von Gl. 2.20

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_{kin}}} \approx \frac{hc}{E} \quad (2.24)$$



Abbildung 2.9: Versuchsaufbau zur Compton-Streuung

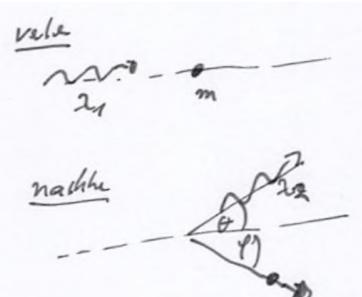


Abbildung 2.10: Kollision von Photon und Elektron.

wobei im letzten Schritt für relativistische Teilchen angenommen wird, dass ihre Energie  $E$  viel größer als die Ruheenergie ist.

Lassen Sie uns ein paar Zahlen einsetzen. Ein Elektron, das in einem Kondensator mit einer Potentialdifferenz von 1V beschleunigt wird, hat eine Energie von 1 eV und eine Geschwindigkeit von etwa  $5.9 \cdot 10^5$  m/s. Das ist schnell für unsere Verhältnisse. Aber für ein Elektron sind sowohl die Energie als auch die Geschwindigkeit klein. Die zugehörige de Broglie-Wellenlänge ist 1.2 nm, ähnlich der Wellenlänge von Röntgenstrahlen und immer noch zehnmal größer als die typischen Abstände in einem Kristallgitter.

1926 konnten Clinton Davisson und sein Assistent Lester Germer zeigen, dass Elektronen tatsächlich Welleneigenschaften besitzen. Ein Elektronenstrahl trifft auf einen Nickelkristall. Die Reflexion zeigt ein Interferenzmuster, das aus der Wellenlänge des Elektrons und dem Gitterabstand des Nickels berechnet werden kann. Letzterer war damals aus der Röntgenbeugung gut bekannt. Davisson erhielt dafür 1937 den Nobelpreis.

Mit zunehmender Masse wird die de Broglie-Wellenlänge kleiner. Bei massereicheren Objekten wird es daher schwieriger, Welleneigenschaften zu beobachten. Man kann aber Atome, Moleküle und Proteine durch eine Art Doppelpalt schicken und dann ihre Interferenz beobachten. Einige Forschungsgruppen verfolgen die Idee, kleine Viren mit sich selbst zur Interferenz zu bringen.



Abbildung 2.11: Beugung eines Elektronenstrahls an einem Nickel-Kristall. Daten aus Davisson und Germer, 1927.

## Teilchen im Kasten

Materiewellen, also die Welleneigenschaften von Teilchen, haben eine wichtige Konsequenz: Damit sind auch die Energien, die ein Teilchen annehmen kann, quantisiert und nicht mehr kontinuierlich wählbar. So wie ein Lichtstrahl aus einer ganzzahligen Anzahl von Photonen bestehen muss und damit die Energie quantisiert ist, kann ein Teilchen (in sehr vielen Situationen) nur bestimmte Energien annehmen.

Betrachten wir das einfachste Beispiel: ein Teilchen in einem Kasten. Wir nehmen einen Kasten der Länge  $L$  an, in dem sich ein Teilchen befinden soll. Die Wände des Kastens sind undurchlässig. Die beiden anderen Raumrichtungen spielen keine Rolle, es handelt sich also um einen eindimensionalen Kasten. Im klassischen Fall bewegt sich das Teilchen im Kasten mit einer bestimmten Geschwindigkeit und wird an jeder Wand reflektiert. Dabei soll es keine Energie verlieren, so dass sich nur das Vorzeichen der Geschwindigkeit ändert. Die Gesamtenergie bleibt erhalten und kann im klassischen Fall einen beliebigen Wert annehmen.

Nimmt man jedoch eine Materiewelle zur Beschreibung des Teilchens, so hat diese Welle die de Broglie Wellenlänge  $\lambda_{dB}$ . Diese Welle wird an den Wänden des Kastens reflektiert und es bilden sich Knoten an den Wänden und eine stehende Welle. Dies ist nur bei bestimmten Wellenlängen  $\lambda_n$  möglich

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad . \quad (2.25)$$

Die de Broglie-Wellenlänge muss dieser Wellenlänge entsprechen:  $\lambda_{dB} = \lambda_n$ , woraus sich eine Bedingung für die Geschwindigkeit ergibt

$$v_n = n \frac{\hbar}{2Lm} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.26)$$

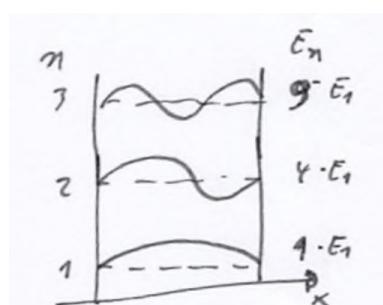


Abbildung 2.12: Teilchen im Kasten: Wellenfunktionen und Energien

und das Teilchen nur diskrete Energien annehmen kann

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 = n^2 \frac{\hbar^2}{8mL^2} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots . \quad (2.27)$$

Die Energie ist quantisiert

$$E_n = n^2 E_1 \quad \text{mit} \quad E_1 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} . \quad (2.28)$$

Die  $E_n$  werden als Energieniveaus und  $n$  als Quantenzahl bezeichnet. Für das Teilchen im Kasten gibt die Quantenzahl die Anzahl der Bäuche der stehenden Welle an.

Was ist passiert? Durch die Einschränkung der Bewegung (engl. confinement) des Teilchens auf den Kasten der Länge  $L$  sind diskrete Energieniveaus entstanden. Das Teilchen kann nun nur noch bestimmte Geschwindigkeiten annehmen. Ein freies Teilchen, das sich nicht in einem Kasten befindet, kann weiterhin beliebige Energien annehmen. Die fundamentale Energie ist  $E_1 \propto 1/L^2$ . Je größer der Kasten, desto näher liegen die Energieniveaus beieinander. Für makroskopische Kästen ist die Quantisierung also nicht mehr erkennbar.

## Bohrsches Atommodell

Im letzten Kapitel haben wir gesehen, wie das Rutherford-Modell den Aufbau eines Atoms beschreibt und damit die Streuexperimente mit Alphateilchen erklärt. Einsteins Vorstellung von Photonen als Lichtquanten erklärt den Photoeffekt, aber die diskreten Linien in den Absorptions- und Emissionsspektren atomarer Gase waren noch nicht verstanden. Eigentlich lag die Idee auf dem Tisch: Wenn Licht nur als Quanten existiert und Atome Licht absorbieren und emittieren, dann muss auch die Energie im Atom quantisiert sein. Das war die Idee von Niels Bohr im Jahr 1913.

Im Bohrschen Atommodell machte er folgende Annahmen

1. Im Rutherford-Modell sind nur bestimmte Bahnen erlaubt, auf denen ein Elektron den Atomkern umkreist. Diese erlaubten Bahnen sind stationär, d.h. für immer stabil. Insbesondere strahlt ein Elektron auf einer solchen Bahn keine Energie ab.
2. Jede stationäre Bahn hat eine wohldefinierte, diskrete Energie  $E_n$ . Man kann die Bahnen nach dieser Energie sortieren und so  $n$  als Quantenzahl verwenden.
3. Ein Atom macht einen *Quantensprung*, wenn es von einem stationären Zustand in einen anderen übergeht. Die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen entspricht der Energie des Photons, das dabei emittiert oder absorbiert wird. Energie kann aber auch in Form von Stößen auf andere Atome übertragen werden.

Für die Energie  $\hbar\nu$  der absorbierten oder emittierten Photonen, d.h. für die Frequenz  $\nu$  der Linien in den Spektren gilt also

$$\hbar\nu = \Delta E_{Atom} = |E_f - E_i| \quad (2.29)$$

wenn das Atom zwischen Zuständen mit den Quantenzahlen  $i$  nach  $f$  wechselt.

Diese Postulate haben weitreichende Konsequenzen:

*Materie ist stabil* Im Grundzustand gibt es keine energetisch niedrigeren Zustände. Das Atom kann seine Energie nicht weiter absenken und bleibt für immer in diesem Zustand.

*Diskretes Spektrum* Die absorbierten oder emittierten Photonen müssen mit ihrer Energie zu den Abständen zwischen den Energieniveaus des Atoms passen. Alles andere würde die Energieerhaltung verletzen.

*Emissionsspektrum* In einer Gasentladungsrohre werden die Atome durch Kollisionen untereinander angeregt. Aus einem solchen angeregten Zustand emittiert das Atom Photonen mit Frequenzen, die den Sprüngen in tiefere Zustände entsprechen.

*Absorptionsspektrum* Damit ein Atom ein Photon mit der Frequenz  $\nu = |E_f - E_i|$  absorbieren kann, muss es sich im Zustand mit der Quantenzahl  $i$  befinden. Im Dunkeln befindet es sich aber früher oder später immer im Grundzustand  $i = 1$ . Absorptionsübergänge gehen daher nur von diesem Zustand aus. Emissionsübergänge führen ebenfalls auf diesen Zustand zurück, aber auch auf viele andere Zustände. Daher sind die Linien in Absorption eine Untermenge der Linien in Emission.

*Elemente* Die erlaubten Bahnen und ihre Energien sind für jedes Element charakteristisch und damit auch die Spektrallinien.

## Energiezustandsdiagramm

Ein Energieniveau-Diagramm ist ein wichtiges Hilfsmittel, um den Überblick über die Energieniveaus eines Quantensystems und die möglichen Übergänge zwischen den Niveaus zu behalten. Es besteht nur aus einer Achse, der Energie, die vertikal aufsteigend aufgetragen wird. Die horizontale Richtung ist ohne Bedeutung. Die Energieniveaus werden als horizontale Linien gezeichnet und mit ihrer Quantenzahl beschriftet. Das niedrigste Niveau ist immer der Grundzustand, alle anderen sind angeregte Zustände. Übergänge (Quantensprünge) werden als senkrechte Pfeile vom Anfangszustand zum Endzustand gezeichnet.

## Die stationären Zustände des Wasserstoffatoms

Was können wir über die von Bohr postulierten stationären Zustände sagen? Ein einzelnes Elektron umkreist ein Proton. Sowohl das Elektron als auch das Proton können als Welle oder als Teilchen betrachtet werden. Nehmen wir zunächst an, dass beide Teilchen sind. Dann haben wir ein klassisches Zweikörperproblem. Die Coulombsche Anziehungskraft muss gerade die Zentripetalkraft ergeben, also

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2.30)$$

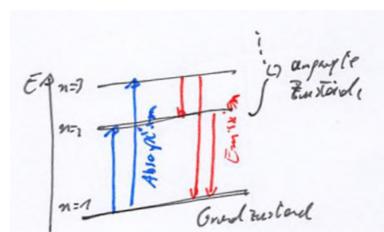


Abbildung 2.13: Beispiel eines Energiezustandsdiagramms

wobei die Ladungen des Elektrons und des Kerns  $\mp e$  sind und  $m$  die Masse des Elektrons beschreibt. Wir nehmen an, dass der Kern unendlich schwer ist und sich daher in Ruhe befindet. Damit haben wir einen Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit  $v$  und dem Bahnradius  $r$  des Elektrons, ähnlich wie bei den Bahnen eines Planeten um die Sonne.

Wenn wir das Elektron als Materiewelle auffassen, dann muss der Umfang der Kreisbahn gerade ein ganzzahliges Vielfaches der de Broglie-Wellenlänge sein, damit die Bahn stabil ist, also

$$2\pi r = n\lambda_{dB} = n \frac{\hbar}{mv} \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots . \quad (2.31)$$

Damit haben wir zwei Beziehungen zwischen  $r$  und  $v$ , die wir nach dem Bahnradius  $r$  auflösen können.

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = n^2 a_B . \quad (2.32)$$

Wir haben die häufig verwendete Abkürzung  $\hbar = h/(2\pi)$  verwendet und den Bohrschen Bahnradius  $a_B$  des Grundzustands mit  $a_B = 0.0529 \text{ nm}$  eingeführt. Der Bahnradius wächst quadratisch mit der Quantenzahl. Andere Radien als  $r_n$  sind nicht möglich. Dies sind die stationären Zustände des Wasserstoffs im Bohr-Modell.

## Energieniveaus im Wasserstoffatom

Die diesen Bahnradien zugeordneten Energien  $E_n$  ergeben sich aus der Summe der kinetischen Energie und der Coulomb-Energie

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = -\frac{1}{n^2} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2a_B} \right) = \frac{R_y}{n^2} \quad (2.33)$$

mit der Rydberg-Energie  $R_y = hc R_\infty = -13.60 \text{ eV}$ , und der Rydberg-Konstanten  $R_\infty$ . Mit steigender Quantenzahl rücken die Zustände energetisch immer näher zusammen und nähern sich der Null.  $E = 0$  beschreibt ein ruhendes Elektron (kinetische Energie Null), das unendlich weit vom Kern entfernt ist (Coulombpotential Null). Dies ist das freie Elektron.

Das gebundene Elektron-Proton-Paar hat eine niedrigere Energie, weil wir Energie aufwenden müssen, um es in den freien Zustand zu überführen. Daher bezeichnet man  $|E_n|$  als *Bindungsenergie*, also die Energie, die in der Bindung steckt. Die Bindungsenergie des Grundzustandes  $|E_1|$  wird auch als *Ionisierungsenergie* bezeichnet. Will man ein Elektron aus einem Atom entfernen, also das Atom ionisieren, so muss man diese Energie aufbringen, da sich Atome eigentlich immer im Grundzustand befinden.

## Quantisierung des Drehimpulses

Der Drehimpuls  $L$  eines klassischen Teilchens auf einer Kreisbahn mit dem Radius  $r$  ist  $L = mvr$ . Da die Coulombkraft als Zentralkraft kein Drehmoment auf das Teilchen ausüben kann, bleibt der Drehimpuls konstant. Setzt man die oben berechneten Parameter  $r_n$  und  $v_n$  der Bohr'schen Bahnen ein, so erhält man

$$L = mv_n r_n = m \frac{n\hbar}{mr_n} r_n = n\hbar \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots . \quad (2.34)$$

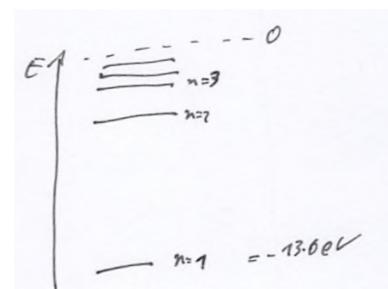


Abbildung 2.14: Zustände des Wasserstoffatoms im Bohr-Modell

Der Drehimpuls ist also ebenfalls quantisiert und kann nur ganzzahlige Vielfache von  $\hbar$  annehmen.

Nebenbemerkung Historisch gesehen ist es genau umgekehrt, als ich es hier dargestellt habe (Knight folgend). Bohr postulierte die Quantisierung des Drehimpulses. Die de Broglie Wellenlänge kam erst ca. 10 Jahre später.

## Das Spektrum von Wasserstoff

Abbildung 2.14 zeigt das Energiezustandsdiagramm von Wasserstoff im Bohr'schen Modell. Absorptionslinien müssen vom Grundzustand ausgehen. Emissionslinien können aus jedem Zustand stammen, solange die Energie des Atoms abnimmt.

Für den Übergang von  $n$  nach  $m$  berechnet sich die Frequenz  $\nu$  des emittierten ( $n > m$ ) bzw. absorbierten ( $n < m$  und damit hier  $\nu < 0$ ) Lichts

$$h\nu = E_n - E_m = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2a_B} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_y \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad . \quad (2.35)$$

Zum Vergleich mit der Balmer-Formel schreiben wir dies nach Wellenlängen um

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}} \quad \text{mit} \quad \lambda_0 = \frac{8\pi\epsilon_0 h c a_0}{e^2} \approx 91.12 \text{ nm} \quad . \quad (2.36)$$

Bei näherer Betrachtung fällt auf, dass die Konstante leicht abweicht. Balmer (und das Experiment) finden  $\lambda_0 = 91.18 \text{ nm}$ . Der Grund dafür ist, dass wir bisher die Kernmasse als unendlich angenommen haben. Bei korrekter Berücksichtigung der Kernmasse ändert sich in allen Gleichungen nur die Elektronenmasse  $m$  zu einer effektiven Masse  $\mu$  mit

$$\mu = \frac{Mm}{M+m} \quad (2.37)$$

mit der Kernmasse  $M$  bzw. die Rydberg-Konstante  $R_M$  für einen Kern der Masse  $M$  zu

$$R_M = \frac{\mu}{m} R_\infty \quad . \quad (2.38)$$

Damit findet auch das Bohrmodell die experimentell beobachtete Konstante  $\lambda_0 = 91.18 \text{ nm}$ .

Zum Weiterdenken

3. In diesem und im vorigen Kapitel haben wir die Emissionsspektren atomarer Gase beschrieben und erklärt. In einem Experiment würde man das Licht einer Gasentladungsrohre mit einem Spektrometer beobachten. Der Franck-Hertz-Versuch ist technisch einfacher: Man beobachtet periodische Änderungen der Helligkeit entlang der Gasentladungsrohre. Erkläre Sie diese Effekt mit der Quantisierung der atomaren Zustände.

## Wasserstoffähnliche Systeme

Das Bohr'sche Atommodell funktioniert bis zu gewissen Grenzen recht gut. Sprechen wir zunächst über einen Fall, der gut funktioniert. Im nächsten Abschnitt kommen die Grenzen.

Unter wasserstoffähnlichen Systemen versteht man im allgemeinsten Fall zwei Teilchen, die durch die Coulombkraft aneinander gebunden sind. Neben dem Proton und dem Elektron des Wasserstoffatoms sind dies auch hochionisierte kleine Atome, z.B.  $\text{He}^+$  oder  $\text{Li}^{2+}$ . Entzieht man einem Atom alle Elektronen bis auf eines, so umkreist dieses eine Elektron einen  $Z$ -fach geladenen Kern. Der Bahnradius ist dann proportional zu  $1/Z$ , die Zustandenergie proportional zu  $Z^2$ , sonst ändert sich nichts. Diese Ionen werden also durch das Bohr'sche Modell gut beschrieben.

Es funktioniert auch relativ gut für Ionen, die nur ein Elektron plus Edelgaskonfiguration haben, z.B.  $\text{Ca}^+$ . Man kann sich die Edelgashülle zusammen mit dem Kern als effektiv einfach positiv geladenen großen Kern vorstellen. Bei näherer Betrachtung erweist sich diese Größe als problematisch. Sogenannte Rydberg-Zustände in Atomen lassen sich auch als Wasserstoff beschreiben. Hier wird ein einzelnes Elektron zu einer sehr hohen Quantenzahl  $n$  angeregt, also sehr weit weg vom Rest des Atoms, der dann wie eine Punktladung aussieht.

Andere Beispiele sind Muonium (ein Elektron, das ein Antimuon umkreist), Positronium (ein Elektron und ein Positron) oder Exzitonen (gebundene Paare von Elektronen und Löchern in Halbleitern).

### Zum Weiterdenken

- Experimentieren Sie mit der Simulation<sup>8</sup> des Neon-Atoms in einer Gasentladungsrohre! Erklären Sie Ihre Beobachtungen.

<sup>8</sup> [Simulation 'Neon\\_Lights\\_and\\_Other\\_Discharge\\_Lamps'](#)

## Grenzen des Bohr'schen Modells

Der große Erfolg des Bohrschen Atommodells bestand darin, stabile Materie erklären zu können. Nach dem Rutherford-Modell hätte das Elektron sehr schnell in den Kern fallen müssen. Die Wasserstofflinien konnten erklärt und nicht nur mit der Balmer-Formel ohne Begründung berechnet werden.

Das Problem tritt bei größeren Atomen auf, und Helium ist in diesem Fall schon groß. Das Bohrsche Modell kann die Heliumlinien nicht richtig beschreiben. Das liegt nicht so sehr an den Postulaten von Bohr. Es ist immer noch richtig, dass das Elektron in stationären Zuständen bleibt, die sich nur durch Photonen oder Stöße ändern. Das Problem ist, wie man diese stationären Zustände findet. Die Drehimpulsquantisierung bleibt gültig, aber die Methode mit der de Broglie-Wellenlänge, die den Umfang der Bahn ergeben soll, muss durch etwas Besseres ersetzt werden. Das ist die Quantenmechanik.

## Zusammenfassung

Schreiben Sie hier ihre persönliche Zusammenfassung des Kapitels auf. Konzentrieren Sie sich auf die wichtigsten Aspekte.

## Literatur

- Albert, David Z. und Rivka Galchen (2009). "Bedroht die Quantenverschränkung Einsteins Theorie?" In: *Spektrum der Wissenschaft*. [↗](#)
- Davisson, Clinton und Lester H Germer (1927). "Diffraction of electrons by a crystal of nickel". In: *Physical review* 30.6, S. 705. [↗](#)
- Demtröder, Wolfgang (2016). *Experimentalphysik. Atome, Moleküle und Festkörper*. 5., neu bearbeitete und aktualisierte Auflage. Bd. 3. Berlin [u.a.]: Springer. [↗](#)
- Einstein, A. (1905a). "Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen". In: *Annalen der Physik* 322.8, S. 549–560. [↗](#)
- (1905b). "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt". In: *Annalen der Physik* 322.6, S. 132–148. [↗](#).
  - (1905c). "Zur Elektrodynamik bewegter Körper". In: *Annalen der Physik* 322.10, S. 891–921. [↗](#).
  - (1905d). "Ist die Trägheit eines Körpers von seinem Energieinhalt abhängig?" In: *Annalen der Physik* 323.13, S. 639–641. [↗](#).
- Haken, H. und H.C. Wolf (2001). *Atom- und Quantenphysik*. Springer.
- Halliday, David (2020). *Halliday Physik für natur- und ingenieurwissenschaftliche Studiengänge*. Hrsg. von Robert Resnick, Jearl Walker und Stephan W. Koch. Weinheim: Wiley-VCH. [↗](#)

- Knight, Randall Dewey (2023). *Physics for scientists and engineers*. Fifth edition. Pearson. [↗](#).
- Tegmark, Max und John Archibald Wheeler (2001). "100 Jahre Quantentheorie". In: *Spektrum der Wissenschaft*. [↗](#).

# Kapitel 3

## Wellenfunktionen

Markus Lippitz  
9. Oktober 2024

### Überblick

In diesem und im nächsten Kapitel werden wir uns mit den Grundlagen der Quantenmechanik beschäftigen. Die Quantenmechanik ist eine Theorie, die manchmal etwas unanschaulich ist, manchmal eher einem Kochrezept ähnelt, aber erstaunlich gut funktioniert. Die größte ungeklärte Frage ist derzeit wohl, wie sich die Quantenmechanik mit der Allgemeinen Relativitätstheorie vereinbaren lässt. Aber das braucht uns hier nicht zu interessieren. Die Quantenmechanik beschreibt Objekte durch eine *Wellenfunktion*, die wir in diesem Kapitel einführen. Im nächsten Kapitel geht es um die *Schrödinger-Gleichung*, mit der man Wellenfunktionen findet. Wenn Sie schon einmal eine Vorlesung über Quantenmechanik gehört haben, wird Ihnen vieles bekannt vorkommen. Im Rest der Vorlesung werden wir die Quantenmechanik benutzen, um Atome und Moleküle zu beschreiben.

Wir beginnen wieder mit dem Doppelspaltexperiment, da hier die Wellenfunktion der Photonen mit dem bereits bekannten elektrischen Feld verwandt ist. Wir werden sehen, dass wir nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen können. Das ist vergleichbar mit der Messunsicherheit, aber es ist eine fundamentale Eigenschaft der Theorie, die technisch nicht eliminiert werden kann. Sie ist so fundamental, dass mit der Heisenbergschen Unschärferelation sogar ein Zusammenhang zwischen den Unsicherheiten zweier komplementärer Größen besteht. Schließlich beschreiben wir Wellenpakete, die ein Modell für ein Teilchen im Wellenbild sein können.

Die Gliederung folgt wiederum Kapitel 39 von Knight, 2023. Weiterhin finden sich gute andere Darstellungen in Halliday, 2020, Demtröder, 2016 und Haken und Wolf, 2001.

### Das Doppelspaltexperiment mit Lichtwellen

Kommen wir noch einmal auf das Doppelspaltexperiment von Young zurück, das Sie bereits in der Optik behandelt haben. Wir behandeln Licht als Welle und nicht als Teilchen. Eine ebene Welle fällt auf zwei (sehr dünne) Spalten in einem ansonsten undurchlässigen Schirm. Man kann sich vorstellen, dass



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](#) Lizenz.

von jedem Punkt in den Spalten eine Huygenssche Elementarwelle  $E_{1,2}$  ausgeht, die man schreiben kann als

$$E_i = a_i \sin(k r_i - \omega t) \quad \text{mit} \quad i = 1, 2 \quad (3.1)$$

mit der Amplitude  $a$  und dem Abstand  $r$  vom Spalt.  $k = 2\pi/\lambda$  ist die Länge des Wellenvektors, auch Wellenzahl genannt. Die Kreisfrequenz ist  $\omega = ck$ .

Auf dem Schirm überlagern sich die Wellen. Das Superpositionsprinzip besagt, dass das resultierende elektromagnetische Feld genau die Summe der beiden Felder ist, also  $E = E_1 + E_2$ . In der Optik haben Sie gesehen, dass sich daraus die folgende Amplitude  $A(x)$  am Ort  $x$  des Schirms ergibt

$$A(x) = 2a \cos\left(\frac{\pi d}{\lambda L} x\right) \quad (3.2)$$

mit dem Abstand  $L$  zwischen Spaltebene und Schirm und dem Abstand  $d$  zwischen den beiden Spalten.<sup>1</sup> Die Amplitude  $A$  ist maximal ( $A = 2a$ ), wenn sich zwei Wellenberge am Schirm treffen, und minimal ( $A = -2a$ ), wenn sich zwei Täler treffen. Dazwischen gibt es Nulldurchgänge.

Im Experiment wird nicht die Amplitude der Wellen beobachtet, sondern ihre Intensität  $I \propto A^2$ , d.h.

$$I(x) = C \cos^2\left(\frac{\pi d}{\lambda L} x\right) \quad (3.3)$$

mit einer Proportionalitätskonstanten  $C$ . Die Nulldurchgänge der Amplitude ergeben somit ein Minimum der Intensität (destruktive Interferenz). Die Maxima der Amplitude ergeben unabhängig vom Vorzeichen ein Maximum der Intensität (konstruktive Interferenz). Nur die Intensität beschreibt also die experimentell beobachtbare Realität.

## Wahrscheinlichkeit

Bevor wir zur Beschreibung durch Photonen kommen, müssen wir kurz über Wahrscheinlichkeiten sprechen. In einem Gedankenexperiment werfen Sie mit verbundenen Augen Dartpfeile auf eine Wand. Jeder Pfeil trifft die Wand, aber nicht immer an der gleichen Stelle. Nach 100 Würfen ergibt sich ein Muster wie in Abbildung 3.2. Wo wird der nächste Wurf treffen? Das können wir nicht mit Sicherheit sagen. Aber wir können eine Wahrscheinlichkeit angeben. Bisher sind  $N_A = 45$  von  $N = 100$  Würfen im Bereich A gelandet. Ob von den nächsten 100 Würfen wieder genau 45 Würfe hier landen, ist eher unwahrscheinlich. 100 Würfe sind einfach zu wenig. Deshalb definiert man die Wahrscheinlichkeit  $P_A$  als Grenzwert für sehr viele Versuche:

$$P_A = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_A}{N} \quad . \quad (3.4)$$

Für Abbildung 3.2 können wir also nur  $P_A \approx 0.45$  schreiben.

Die Wahrscheinlichkeiten für sich ausschließende Ergebnisse addieren sich. Die Wahrscheinlichkeit, im Bereich A oder B zu landen, beträgt also

$$P_{A \text{ oder } B} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_A + N_B}{N} = P_A + P_B \quad (3.5)$$

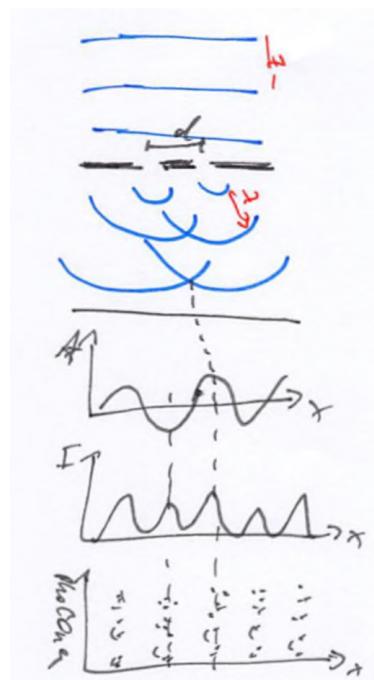


Abbildung 3.1: Beugung am Doppelspalt. Die Amplitude  $A(x)$  am Schirm bestimmt die Intensität  $I$  und die Wahrscheinlichkeit, Photonen am Ort  $x$  zu detektieren.

<sup>1</sup> Oben haben wir angenommen, dass die Spalten sehr dünn sind. Daher geht die Spaltweite nicht ein und die Gleichung wird einfacher.

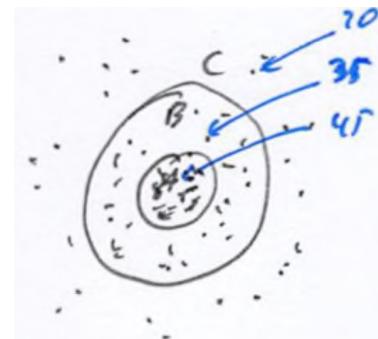


Abbildung 3.2: Ergebniss der Dart-Würfe

und die Summe aller Wahrscheinlichkeiten ist eins, also

$$P_A + P_B + P_C = 1 \quad . \quad (3.6)$$

Der erwartete Wert  $N_{erw}$  für die Anzahl der Treffer im Bereich A ergibt sich durch Umformung zu

$$N_{A,erw} = P_A N \quad . \quad (3.7)$$

Unsere beste Vorhersage für die Anzahl der Treffer nach 60 Versuchen ist also  $0.45 \cdot 60 = 27$ . Die tatsächlich beobachtete Anzahl der Treffer kann davon abweichen. Je mehr Versuche  $N$  durchgeführt werden, desto geringer wird die Abweichung sein.

## Interpretation des Interferenzmusters von Photonen

Im letzten Kapitel haben wir bereits gesehen, welches Punktmuster Photonen auf einem Schirm hinter einem Doppelspalt hinterlassen (siehe Abb. 3.1). Dieses wollen wir nun etwas genauer betrachten. Wie ein Foto in der Zeitung besteht das Bild auf dem Schirm aus vielen Punkten, die mehr oder weniger dicht beieinander liegen. Und wie bei den Dartpfeilen können wir nicht sagen, wo das nächste Photon detektiert wird. Aber es gibt Regionen, in denen dies mehr oder weniger wahrscheinlich ist.

Wir definieren entlang der Ortskoordinaten  $x$  einen schmalen Streifen der Breite  $\delta x$  und Höhe  $H$  und zählen alle Photonen, die in diesen Streifen gefallen sind. Diese Zahl nennen wir hier  $N(x, \delta x)$ . Sie hängt natürlich von der Position  $x$  ab, ob es sich um eine hellere oder dunklere Stelle des Sinterferenzmusters handelt. Wir definieren die Wahrscheinlichkeit  $WK$  wieder als Grenzwert für eine Gesamtzahl von Photonen  $N$

$$WK(x, \delta x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(x, \delta x)}{N} \quad . \quad (3.8)$$

Von einer guten Theorie erwarten wir, dass sie diese Wahrscheinlichkeit  $WK(x, \delta x)$  vorhersagt, so dass wir die erwartete Anzahl von Photonen in diesem Intervall berechnen können, d.h.

$$N(x, \delta x)_{erw} = WK(x, \delta x) N \quad . \quad (3.9)$$

Wir werden nicht in der Lage sein, den Auftreffpunkt des nächsten Photons vorherzusagen. Aber wir werden in der Lage sein, die Wahrscheinlichkeit und damit die Anzahl der zu erwartenden Photonen in einem schmalen Streifen zu berechnen.

## Photonen- und Wellenbild vereinigen

Wie erhält man die Wahrscheinlichkeit  $WK(x, \delta x)$ ? Hier hilft uns die Energie des Lichts auf dem Schirm. Die Energie, die in dem Streifen mit der Breite  $\delta x$  und der Höhe  $H$  an der Position  $x$  einfällt, sei  $E(x, \delta x)$ . Für sie gilt

$$E(x, \delta x) = I(x) \delta x H \quad . \quad (3.10)$$

wobei angenommen wird, dass  $\delta x$  so klein ist, dass sich die Intensität  $I(x)$  über die Breite des Streifens nicht wesentlich ändert. Im Photonenbild trägt jedes Photon die Energie  $h\nu$  bei. Die Anzahl der Photonen, die pro Sekunde<sup>2</sup> auf dem Streifen ankommen, ist also

$$\tilde{N}(x, \delta x) = \frac{E(x, \delta x)}{h\nu} \quad (3.11)$$

<sup>2</sup> Die Tilde bezeichnet hier Raten (pro Sekunde) im Gegensatz zu Gesamtzahlen.

und damit die Wahrscheinlichkeit

$$WK(x, \delta x) = \frac{\tilde{N}(x, \delta x)}{\tilde{N}} = \frac{E(x, \delta x)}{h\nu \tilde{N}} = \frac{I(x) H \delta x}{h\nu \tilde{N}} \quad . \quad (3.12)$$

Inbesondere ist  $I(x) \propto |A(x)|^2$  und damit

$$WK(x, \delta x) \propto |A(x)|^2 \delta x \quad . \quad (3.13)$$

Die Wahrscheinlichkeit, ein Photon im Intervall  $(x, x + \delta x)$  zu treffen, ist also proportional zum Quadrat der Wellenamplitude an diesem Ort. Diese Gleichung verbindet das Wellenbild mit dem Photonenbild. Sie bildet die Grundlage für die Interpretation der Quantenmechanik.

### Wahrscheinlichkeitsdichte

Das Interferenzmuster ändert sich kontinuierlich entlang der Koordinate  $x$ . Eigentlich möchte man die Ereignisse nicht auf einem Streifen der Breite  $\delta x$  zählen, sondern jedem Ort einen Wert zuordnen. Dies ist mit der *Wahrscheinlichkeitsdichte* möglich. Sie ist wie die Massen- oder Ladungsdichte eine Größe, die multipliziert mit einer Länge, einer Fläche oder einem Volumen eine Masse, eine Ladung oder eine Wahrscheinlichkeit ergibt. Um den Unterschied zwischen Länge, Fläche und Volumen deutlich zu machen, schreibt man gerne das Infinitesimale dazu ( $dx, dA, dV$ ). Damit gilt

$$WK(x, \delta x) = \int_x^{x+\delta x} P(x') dx' = P(x) \delta x \quad (3.14)$$

und somit

$$P(x) dx = C' |A(x)|^2 dx \quad (3.15)$$

mit einer Proportionalitätskonstanten  $C'$ . Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $P$  ist im Gegensatz zur Wahrscheinlichkeit  $WK(x, \delta x)$  unabhängig von der Streifenbreite. Diese Gleichung gilt für Photonen in jeder Situation, auch wenn wir sie für das Doppelspaltexperiment hergeleitet haben.

### Die Wellenfunktion

Im letzten Kapitel haben wir im Davidson-Germer-Experiment gesehen, dass Elektronen auch Welleneigenschaften besitzen. Elektronen verhalten sich also an einem Doppelspalt wie Photonen. Auch hier können wir am Schirm die Anzahl der eintreffenden Elektronen pro Flächenintervall bestimmen. Auch hier können wir eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(x)$  messen, die das Interferenzmuster im Doppelspaltexperiment beschreibt und damit die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron in der Nähe des Ortes  $x$  zu finden.

Für Photonen haben wir gerade gesehen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(x)$  mit dem Quadrat der Amplitude  $A(x)$  der optischen Wellen zusammenhängt. Diese Form der Beschreibung wollen wir auch für Elektronen übernehmen. Wir nehmen also an, dass es auch hier eine *Wellenfunktion*  $\Psi(x)$  gibt, die die Wahrscheinlichkeitsdichte analog zur Amplitude  $A(x)$  beschreibt, also

$$P(x)dx = |\Psi(x)|^2 dx \quad . \quad (3.16)$$

Im Gegensatz zum optischen Fall haben wir hier die Proportionalitätskonstante auf Eins gesetzt, da wir  $\Psi(x)$  neu definieren und nicht auf eine aus der Optik bekannte Größe  $A(x)$  zurückgreifen müssen.

Diese Gleichung **definiert** die Wellenfunktionen  $\Psi(x)$ . Das Experiment bestimmt aber nur  $|\Psi(x)|^2$ , nicht  $\Psi(x)$ . Insbesondere können wir nichts über das Vorzeichen von  $\Psi(x)$  sagen<sup>3</sup>

Im Gegensatz zu einer elektromagnetischen Welle schwingt nichts mit der Wellenfunktion  $\Psi(x)$ .  $\Psi$  verhält sich wie eine Welle, ist aber nicht mit einer Auslenkung von irgendetwas verbunden. Wir können auch nicht  $\Psi(x)$  selbst messen, sondern nur  $|\Psi(x)|^2$ . Es hat sich aber gezeigt, dass man mit der Annahme einer wellenartigen Funktion  $\Psi$  den Ausgang von Experimenten sehr gut beschreiben kann.

Mit der Wellenfunktion haben wir aber erst die Hälfte. Wir brauchen noch Regeln, wie wir die Wellenfunktion in einer gegebenen Situation bestimmen können und wie sich eine gegebene Wellenfunktion mit der Zeit verändert. Dazu dient die Schrödinger-Gleichung, die im nächsten Kapitel behandelt wird.

## Normierung

Wie bei den Dartpfeilen muss die Summe aller sich gegenseitig ausschließenden Wahrscheinlichkeiten eins ergeben. Irgendwo muss das Elektron detektiert werden, es kann nicht verschwinden. Für diskrete Bereiche  $A, B, C$  usw. schreibt man dies als

$$\sum_{j=A,B,C,\dots} P_j = 1 \quad . \quad (3.17)$$

Mit der Wahrscheinlichkeitsdichte wird die Summe ein Integral, d.h.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1 \quad . \quad (3.18)$$

Dies hat Konsequenzen für die Wellenfunktion  $\Psi(x)$ . Da  $P(x) = |\Psi(x)|^2$ , muss also

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 \quad . \quad (3.19)$$

Dies wird Normierungsbedingung genannt, oder eine Wellenfunktion ist normiert, wenn sie diese Bedingung erfüllt. Noch einmal: Wir können nur etwas über das Quadrat der Wellenfunktion sagen, aber nichts über die Wellenfunktion selbst, und damit auch nichts über ein Integral der Wellenfunktion selbst.

## Zum Weiterdenken

1. Welche Einheit hat eine Wellenfunktion  $\Psi(x)$  ?

<sup>3</sup> wie wir später sehen werden, kann  $\Psi(x)$  auch komplex sein, so dass uns ein unbekannter Faktor  $\exp(i\phi)$  bleibt.



Abbildung 3.3: Eine Wellenfunktion  $\Psi(x)$  können wir nicht direkt messen, sondern nur ihr Betragsquadrat  $|\Psi(x)|^2$ .

## Korrespondenzprinzip

An verschiedenen Stellen ist uns der Welle-Teilchen-Dualismus begegnet. Objekte auf der atomaren Skala können nicht mehr nur als Welle oder nur als Teilchen beschrieben werden, sondern sind beides oder nichts von beidem. Unsere Bilder sind zu schwach, um diese Objekte zu beschreiben. Es hat sich aber gezeigt, dass man den Übergang von der mikroskopischen zur makroskopischen Welt nutzen kann, um die Konsistenz der mikroskopischen Beschreibung zu überprüfen.

Wir fragen uns also, ob das mikroskopische Modell noch funktioniert, wenn wir alles noch größer machen. Bei den Photonen am Doppelspalt zum Beispiel, indem wir die Anzahl der Photonen pro Fläche stark erhöhen, oder beim Teilchen im Kasten, indem wir die Quantenzahl  $n$  sehr groß machen. Das Korrespondenzprinzip besagt, dass das mikroskopische Modell für große Quantenzahlen in das entsprechende makroskopische Modell übergehen muss. Bei großen Quantenzahlen ist der Effekt der Quantisierung nicht mehr wahrnehmbar, der Unterschied zwischen benachbarten Quantenzahlen ist klein. Dies haben wir in den letzten Abschnitten ausgenutzt, um die Wellenfunktion der Photonen zu konstruieren: für große Photonenzahlen muss alles in die klassische Elektrodynamik übergehen.

## Wellenpakete

Welle und Teilchen sind zwei klassische Konzepte, die sich gegenseitig ausschließen. Keines von beiden kann allein das Doppelspalteperiment beschreiben und den Welle-Teilchen-Dualismus auflösen. Klassische Wellenpakete zeigen jedoch viele Eigenschaften, die wir auch auf der atomaren Skala finden. Sie können deshalb als Modell dienen.

Betrachten wir ein Wellenpaket, wie es in Abbildung 3.4 skizziert ist. Im Gegensatz zu einer Sinuswelle ist das Wellenpaket räumlich und zeitlich begrenzt. Dadurch ähnelt es einem Teilchen. Gleichzeitig hat ein Wellenpaket aber auch eine Wellenlänge und schwingt wie eine Welle in Raum und Zeit. Aber auch Wellenpakete sind kein ideales Modell. Letztlich beschreibt nur die Quantenmechanik Objekte auf atomarer Skala korrekt.

Überlagern sich zwei Sinuswellen mit den Frequenzen  $f_1$  und  $f_2$ , so entsteht eine Schwebung (engl beating). Die Amplitude der Gesamtwellen ändert sich periodisch mit der Schwebungsfrequenz

$$f_{beat} = |f_1 - f_2| = \frac{1}{T_{beat}} . \quad (3.20)$$

Es entsteht also eine Abfolge von Wellenpaketen mit dem Abstand  $T_{beat}$ . Nennen wir die Differenz der beiden Frequenzen  $\Delta f$  und die Länge der Wellenpakete  $\Delta t$  (also ihren Abstand  $T_{beat}$ , also  $T_{beat} = \Delta t$ ), so können wir Gl. 3.20 schreiben als

$$\Delta t \Delta f = 1 . \quad (3.21)$$

Das ist zunächst trivial, aber es ist ein Vorbote von etwas Größerem. Wenn sich die beiden Frequenzen annähern, werden die Wellenpakete länger.

Um nicht einen Zug von Wellenpaketen, sondern ein einziges Paket zu erhalten, müssen viele Sinuswellen überlagert werden. Zum Zeitpunkt  $t = 0$

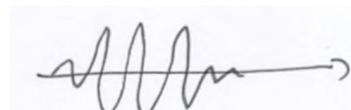


Abbildung 3.4: Skizze eines Wellenpakets

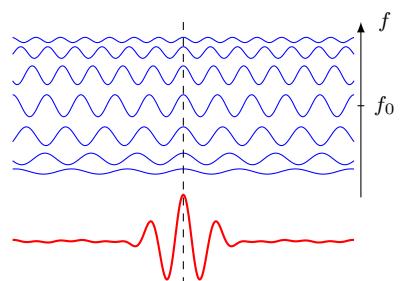


Abbildung 3.5: Synthese eines Wellenpakets

überlagern sich alle konstruktiv (siehe Skizze 3.5), zu allen anderen Zeitpunkten jedoch mehr oder weniger destruktiv. Insbesondere gibt es für große Zeiten zu jeder Welle immer eine andere, die diese gerade auslöscht. Der Zusammenhang zwischen den Frequenzkomponenten und dem zeitlichen Verlauf wird durch die Fourier-Transformation hergestellt. Eine Eigenschaft der Fourier-Transformation ist die Pulsdauer-Bandbreiten-Grenze

$$\Delta t \Delta f \approx 1 \quad . \quad (3.22)$$

Der genaue Wert der Konstanten auf der rechten Seite hängt von der zeitlichen Form des Wellenpakets ab und auch davon, wie genau man die Breiten  $\Delta t$  und  $\Delta f$  definiert. Auf diese Details soll hier nicht eingegangen werden. Ich verstecke alles in 'ungefähr eins'. Die Bedeutung ist unabhängig von diesen Details: Ein Wellenpaket, das aus der Superposition verschiedener Sinuswellen gebildet wird, kann nicht beliebig kurz sein. Es hat eine minimale Länge  $\Delta t$ , die sich aus seiner Breite im Frequenzraum  $\Delta f$  ergibt. Dies ist schon eine Eigenschaft der Fourier-Transformation und gilt daher auch in der klassischen Physik.

### Zum Weiterdenken

2. Erzeugen Sie in der Simulation<sup>4</sup> Wellenpakete.

<sup>4</sup> Simulation 'Fourier\_Making\_Waves'

### Bandbreite

Die Pulsdauer-Bandbreitenbegrenzung der Fourier-Transformation hat verschiedene technische Konsequenzen. Immer dann, wenn die Breite im Frequenzbereich begrenzt ist, ist auch die zeitliche Dauer nach unten begrenzt. Ein Beispiel hierfür sind kurze Laserpulse. Um einen Laserpuls der Länge  $\Delta t = 100\text{ fs} = 100 \cdot 10^{-15}\text{ s}$  zu erzeugen, benötigt man ein Spektrum, das mindestens

$$\Delta f = \frac{1}{100\text{ fs}} = 10 \cdot 10^{12}\text{ Hz} = 10\text{ THz} \quad (3.23)$$

breit ist. Bei einer Zentralwellenlänge von 800 nm entspricht dies einer Breite von etwa 20 nm.

### Unschärfe

Die Breiten  $\Delta t$  und  $\Delta f$  können auch als *Unschärfe* verstanden werden. Bei einem Wellenpaket der Zeitlänge  $\Delta t$  können wir nicht mehr eindeutig sagen, wann es am Detektor eintrifft. Ist die Ankunftszeit der Anfang des Pakets oder das Ende oder das Maximum? Ebenso können wir nicht mehr eindeutig sagen, welche Frequenz und damit welche Wellenlänge es hat, da verschiedene Sinuswellen zum Wellenpaket beitragen. Dies ist eine grundsätzliche Eigenschaft von Wellenpaketen und hat nichts mit experimentellen Unzulänglichkeiten zu tun.

Diese beiden Unschärfen sind miteinander verknüpft. Wenn wir ein Wellenpaket erzeugen wollen, das zeitlich sehr gut definiert ist, also eine kleine zeitliche Unschärfe  $\Delta t$  hat, dann verlangt die Pulsdauer-Bandbreiten-Grenze, dass die Frequenzunschärfe  $\Delta f$  besonders groß ist. Und umgekehrt: Wenn

die Frequenz in einem Wellenpaket sehr genau bekannt sein soll,  $\Delta f$  also klein sein soll, dann kann man nur sehr ungenau angeben, wann dieses Wellenpaket eintrifft.

Technisch ist

$$\Delta t \Delta f \approx 1 \quad (3.24)$$

eine untere Grenze. Aufgrund von Rauschen oder anderen technischen Faktoren kann die zeitliche Dauer oder die Bandbreite noch größer sein. Dieses Produkt aus Pulsdauer und Bandbreite definiert die Grenze des Wissens, das über ein beliebiges Wellenpaket gewonnen werden kann.

## Die Heisenbergsche Unschärfe-Relation

Wir wollen nun ein Teilchen durch ein Wellenpaket beschreiben. Das Teilchen mit der Masse  $m$  bewegt sich mit der Geschwindigkeit  $v_x$  entlang der Achse  $x$ . Seine de Broglie-Wellenlänge ist  $\lambda = h/p_x$  mit  $p_x = mv_x$  der  $x$ -Komponente des Impulses. Die Periodendauer des Wellenpakets sei  $\Delta t$ . Dann ist die räumliche Ausdehnung  $\Delta x$ .

$$\Delta x = v_x \Delta t = \frac{p_x}{m} \Delta t \quad . \quad (3.25)$$

Die Frequenz  $\nu$  der Materiewelle des Teilchens ergibt sich aus dessen de Broglie-Wellenlänge via<sup>5</sup>

$$\nu \lambda = v \quad (3.26)$$

<sup>5</sup> hier ist Phasen- gleich Gruppengeschwindigkeit

also

$$\nu = \frac{v}{\lambda} = \frac{p_x/m}{h/p_x} = \frac{p_x^2}{hm} \quad . \quad (3.27)$$

Durch Ableitung finden wir

$$\Delta \nu = \frac{2p_x}{hm} \Delta p_x \quad . \quad (3.28)$$

Wenn wir all dies in die Gleichung für Pulsdauer und Bandbreite einsetzen (und die Frequenzen auf der atomaren Skala als  $\nu$  schreiben), dann erhalten wir

$$\Delta t \Delta \nu = \frac{m}{p_x} \Delta x \frac{2p_x}{hm} \Delta p_x = \frac{2}{h} \Delta x \Delta p_x \quad . \quad (3.29)$$

Die Pulsdauer-Bandbreiten-Grenze ist ja eine untere Grenze. Darum schreibe ich das  $\approx$  jetzt als  $\geq$  und wir erhalten

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2} \quad . \quad (3.30)$$

Dies ist die *Heisenbergsche Unschärferelation*, in dieser Form auch Orts-Impuls-Uncertainty genannt. Wie oben hängt die rechte Seite der Gleichung von der genauen Definition der beiden Breiten  $\Delta x$  und  $\Delta p_x$  ab. Aber auch hier sind die Details nicht so wichtig, solange ein  $h$  auftaucht.

Was bedeutet das? Die Heisenbergsche Unschärferelation beschreibt die Grenze unseres Wissens über ein quantenmechanisches Teilchen. Wir können nicht gleichzeitig den Ort und den Impuls (oder die Geschwindigkeit) beliebig genau kennen. Je genauer wir den Ort kennen wollen, desto ungenauer muss unser Wissen über den Impuls sein und umgekehrt.

Messunsicherheiten sind ein Charakteristikum der klassischen Physik. Jede Messung ist mit einer Unsicherheit behaftet. In der klassischen Physik ist dies jedoch ein rein technisches Problem. Mit etwas mehr Aufwand könnte man die Unsicherheit reduzieren. Außerdem sind zwei Messungen, z.B. Ort und Geschwindigkeit, voneinander unabhängig, und wir könnten beide Unsicherheiten getrennt voneinander behandeln.

Die Heisenbergsche Unschärferelation besagt, dass dies in der atomaren Welt nicht der Fall ist. Es handelt sich nicht mehr um ein technisches Problem, sondern um eine grundsätzliche Grenze unseres Wissens. Wie auch immer wir es technisch machen, Ort und Impuls können nicht beliebig genau bestimmt werden. In dieser Hinsicht sind atomare Teilchen Wellenpaketen ähnlich.

Nebenbemerkung Wenn Sie eine Vorlesung über Quantenmechanik besucht haben, werden Sie gesehen haben, dass die Heisenbergsche Unschärferelation mit den Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}$  geschrieben wird<sup>6</sup>

<sup>6</sup> Nolting, 2006.

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (3.31)$$

wobei die eckige Klammer  $[\dots]$  den Kommutator darstellt<sup>7</sup> und die spitze Klammer  $\langle \dots \rangle$  den Erwartungswert bezeichnet. Auf diese Weise erhält man die oben hergeleitet Orts-Impuls-Uncertainty.

<sup>7</sup>  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Die Pulsdauer-Bandbreiten-Uncertainty, oder durch Multiplikation mit  $\hbar$  die Energie-Zeit-Uncertainty

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (3.32)$$

ist aber eigentlich keine Heisenbergsche Unschärferelation im engeren Sinne, weil es in der Quantenmechanik keinen Zeitoperator gibt. Sie ist 'nur' eine Eigenschaft der Fourier-Transformation. Diese Unterscheidung wird aber nicht oft gemacht.

## Zum Weiterdenken

3. *Quantenradierer* sind eine Klasse von Doppelspaltexperimenten mit Quanten, bei denen eigentlich der Weg des Photons durch den einen oder anderen Spalt gemessen wird, diese Information dann aber wieder 'ausradiert' wird. Eine (alte) populärwissenschaftliche Darstellung ist Englert, Scully und Walther, 1995, neuere sind Alderamin, 2024 und Hossenfelder, 2022. Ist das jetzt ein Paradoxon, oder nicht?

## Zusammenfassung

Schreiben Sie hier ihre persönliche Zusammenfassung des Kapitels auf. Konzentrieren Sie sich auf die wichtigsten Aspekte.

## Literatur

- Alderamin (2024). "Quantenradieren wider den Zeitstrom". In: *heise.de*. [↗](#).
- Demtröder, Wolfgang (2016). *Experimentalphysik. Atome, Moleküle und Festkörper*. 5., neu bearbeitete und aktualisierte Auflage. Bd. 3. Berlin [u.a.]: Springer. [↗](#).
- Englert, Berthold-Georg, Marlan O. Scully und Herbert Walther (1995). "Komplementarität und Welle-Teilchen-Dualismus". In: *Spektrum der Wissenschaft*. [↗](#).
- Haken, H. und H.C. Wolf (2001). *Atom- und Quantenphysik*. Springer.
- Halliday, David (2020). *Halliday Physik für natur- und ingenieurwissenschaftliche Studiengänge*. Hrsg. von Robert Resnick, Jearl Walker und Stephan W. Koch. Weinheim: Wiley-VCH. [↗](#).
- Hossenfelder, Sabine (2022). "The Delayed Choice Quantum Eraser, Debunked". In: *Youtube*. [↗](#).
- Knight, Randall Dewey (2023). *Physics for scientists and engineers*. Fifth edition. Pearson. [↗](#).
- Nolting, Wolfgang (2006). *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer-Lehrbuch. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. [↗](#).





# Literatur

- Albert, David Z. und Rivka Galchen (2009). "Bedroht die Quantenverschränkung Einsteins Theorie?" In: *Spektrum der Wissenschaft*. [↗](#).
- Alderamin (2024). "Quantenradieren wider den Zeitstrom". In: *heise.de*. [↗](#).
- Davisson, Clinton und Lester H Germer (1927). "Diffraction of electrons by a crystal of nickel". In: *Physical review* 30.6, S. 705. [↗](#).
- Demtröder, Wolfgang (2016). *Experimentalphysik. Atome, Moleküle und Festkörper*. 5., neu bearbeitete und aktualisierte Auflage. Bd. 3. Berlin [u.a.]: Springer. [↗](#).
- Einstein, A. (1905a). "Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen". In: *Annalen der Physik* 322.8, S. 549–560. [↗](#).
- (1905b). "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt". In: *Annalen der Physik* 322.6, S. 132–148. [↗](#).
- (1905c). "Zur Elektrodynamik bewegter Körper". In: *Annalen der Physik* 322.10, S. 891–921. [↗](#).
- (1905d). "Ist die Trägheit eines Körpers von seinem Energieinhalt abhängig?" In: *Annalen der Physik* 323.13, S. 639–641. [↗](#).
- Englert, Berthold-Georg, Marlan O. Scully und Herbert Walther (1995). "Komplementarität und Welle-Teilchen-Dualismus". In: *Spektrum der Wissenschaft*. [↗](#).
- Haken, H. und H.C. Wolf (2001). *Atom- und Quantenphysik*. Springer.
- Halliday, David (2020). *Halliday Physik für natur- und ingenieurwissenschaftliche Studiengänge*. Hrsg. von Robert Resnick, Jearl Walker und Stephan W. Koch. Weinheim: Wiley-VCH. [↗](#).
- Hossenfelder, Sabine (2022). "The Delayed Choice Quantum Eraser, Debunked". In: *Youtube*. [↗](#).
- Knight, Randall Dewey (2023). *Physics for scientists and engineers*. Fifth edition. Pearson. [↗](#).
- Nolting, Wolfgang (2006). *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer-Lehrbuch. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. [↗](#).
- Tegmark, Max und John Archibald Wheeler (2001). "100 Jahre Quantentheorie". In: *Spektrum der Wissenschaft*. [↗](#).



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International" Lizenz](#).