0. Vorbemerkungen

Ziel der VL: Grundlegendes Verständnis der QM, wobei Ingenieure u. Informatiker sowohl hinsichtlich Physik und Mathematik auf ihrem „normalen" Kenntnisstand „abgeholt" werden, d.h. die VL sollte für jeden interessierten Studenden klar nachvollziehbar sein.

Anspruch: Die vermittelten Kenntnisse sollen auf möglichst ähnlichem Niveau liegen, wie in der Physik üblich

⇒ Auch Notation der Physik wird übernommen, so dass

a) leicht eine Verständigung mit Physikern möglich ist und

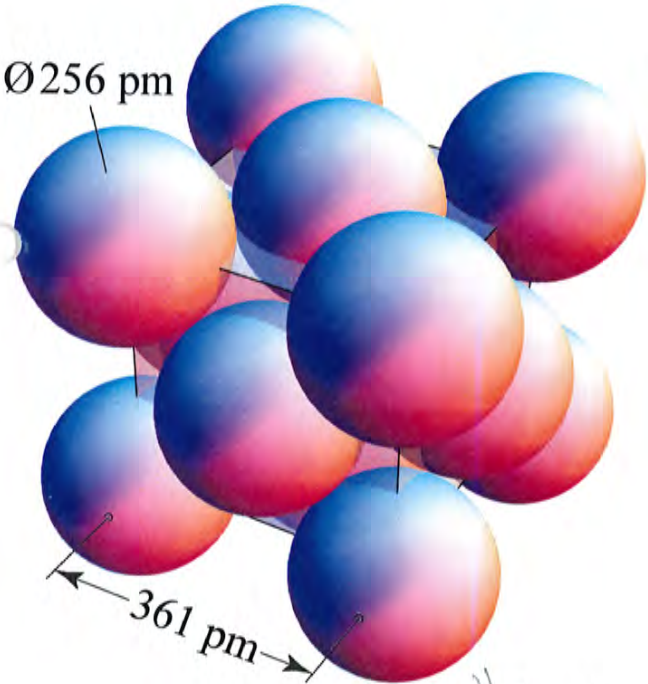
b) es keine Probleme bereiten sollte, die für die Theoretische Physik vorhandene Fachliteratur zu lesen und zu verstehen.

Einschränkung: Da Grundlagen (Mathe, Physik) i. Allg. fehlen, kann – allein aus Zeitgründen – nur eine eingeschränkte Stoffauswahl möglich sein (also sicher keine QED und auch keine technischen Anwendungen).

1. „Warum Quantenmechanik?" oder „Weshalb Max Planck etwas finden musste, was er nie finden wollte"

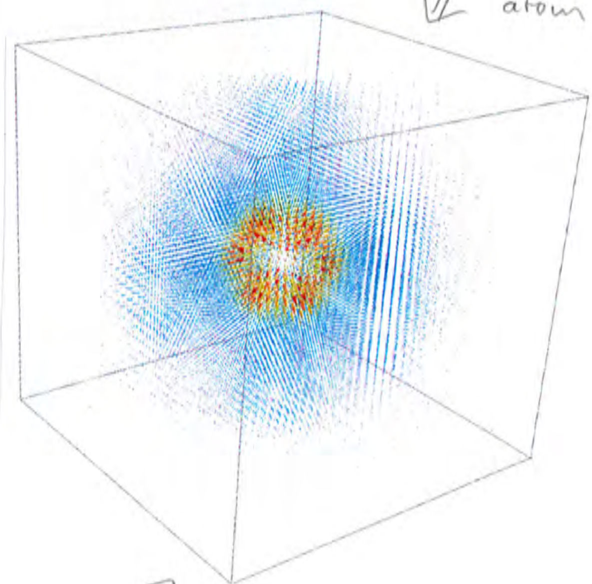
1.1 Warum Quantenmechanik (QM)?

1. Beispiel: Elektrische Leitfähigkeit: d.h. maximale Packungsdichte



Cu-Atom, kubisch flächenzentriert (kfz), 29 Protonen, 29 Elektronen, 34 Neutronen, meist ein- bis zweiwertig (maximal 3-wertig)

Einzelatom



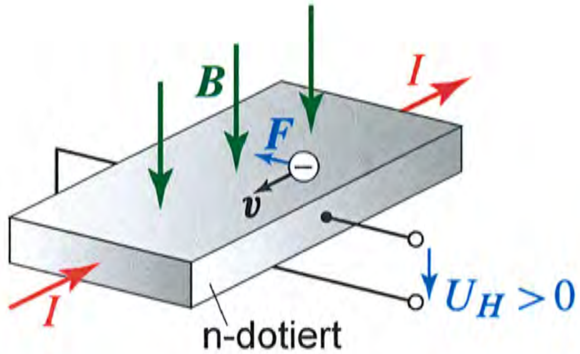
Feld exemplarisch bei nur 6 Elektronen und 6 Protonen im Kern

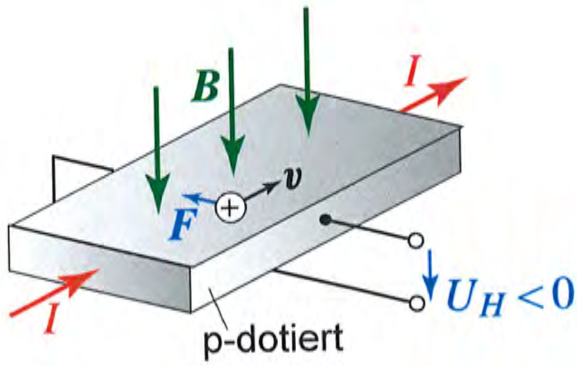
Auch bei klassischer Betrachtung (kleiner, nahezu punktförmiger Atomkern, darum herum „kreisend" die ebenfalls punktförmigen Elektronen und ansonsten fast nur „leerer" Raum):
$\vec{E}$-Felder im Atom so stark, dass freies Elektron kaum ungehindert durchdringen kann

$\rightsquigarrow$ Cu müsste schlechter Leiter sein

$\Rightarrow$ Widerspruch!

2. Beispiel: Hall-Effekt





$\Uparrow$ $\Uparrow$

bewegte Elektronen ($e<0$) in Gegenrichtung zur technischen Stromrichtung; Ablenkung durch Lorentz-Kraft $\vec{F} = Q(\vec{v} \times \vec{B})$ derart, dass $U_H > 0$

bewegte Löcher ($e>0$) in Richtung zu technischen Stromrichtung $\Rightarrow U_H < 0$

$\Uparrow$

$\Leftarrow$ messtechnisch verifiziert!

Problem: klassische Vorstellung vom Löcherstrom ist, dass „tatsächlich" Elektronen von Loch zu Loch „hüpfen", so dass sich „scheinbar" das Loch bewegt.
D.h. in „Wirklichkeit" „bewegen" sich auch bei p-Dotierung Elektronen, so dass bei n- und p-dotierten Materialien stets $U_H > 0$ gelten müsste

$\Rightarrow$ Widerspruch!

Diese Betrachtungen lassen sich fortsetzen ...

M. Planck

1.2 Es begann mit Max Planck

Ende des 19. Jahrhunderts: Physik schien weitgehend abgeschlossen (man verstand natürlich noch nicht alles, glaubte aber, den „Rest" mit den zur Verfügung stehenden Mitteln bewältigen zu können).

Beispiel: Als Max Planck 1874 sein Physikstudium begann, riet der mit der Familie befreundete Phillip von Jolly ihm vom Studium ab, „weil die Theoretische Physik keine weitreichenden Perspektiven mehr bietet".

Es ist bekannt, dass Max Planck nicht auf ihn hörte...

Tatsächlich waren schon 1874 Erscheinungen bekannt, von denen sich später erwies, dass sie sich klassisch eben nicht erklären ließen. Eine solche Erscheinung war die

1.2.1 Wärmestrahlung (

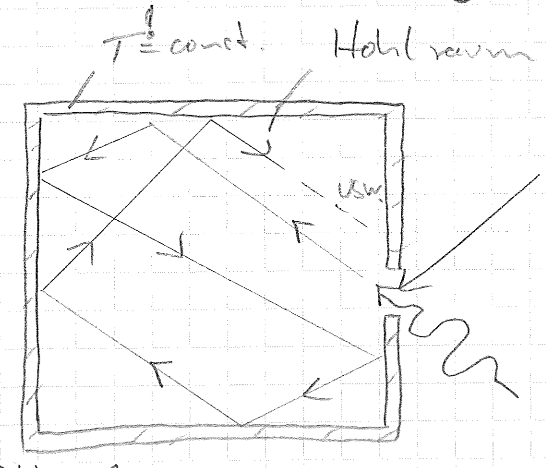


Abb. 1

„kleines" Loch: repräsentiert angenähert einen „schwarzen Körper"

||

„alle" einfallende Strahlung wird absorbiert

Alle Strahlung, die vom schwarzen Körper (= Loch) ausgesandt wird (= „Schwarze Strahlung"), ist lt. Kirchhoff (1859, Beweis mit Hilfe des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik) identisch mit Strahlung im Innern des Hohlraums, welche isotrop (= richtungsunabhängig) und homogen (= ortsunabhängig) u. unabh. v. Material u. Form ist.

Erläuterung:

a) el.-magn. Energiedichte: $w = \frac{1}{2}(\vec{E}\vec{D} + \vec{H}\vec{B})$

$\downarrow$ Energie / Volumen

$[w] = \frac{Ws}{m^3} = \frac{J}{m^3}$

b) $\underbrace{\text{spektrale Energiedichte}}_{\text{Energiedichte / Frequenzanteil}}$: $w_\nu := \frac{dw}{d\nu}$; $\nu = 0 \dots \infty$ (↑ Frequenz)

$[w_\nu] = \frac{Ws^2}{m^3}$

Kirchhoff (1859) zeigt: $\boxed{w_\nu = f(\nu, T)}$ (hier ohne Beweis) (1.1)

↳ lies: ist nur eine Funktion von...

↝ Wien (1896) zeigt: $\boxed{w_\nu = \nu^3 \, g\left(\frac{\nu}{T}\right)}$ (") (1.2)

$[w_\nu] = Ws^2$

Problem: f bzw. g unbekannte Funktionen!

wieder Wien: mit Hilfe vereinfachender Annahmen (= theoretisch nicht gut begründet)

„educated guessing" → $\boxed{g\left(\frac{\nu}{T}\right) \approx a \cdot e^{-b\frac{\nu}{T}}}$ (1.3)

mit a, b = Konstanten aus dem Experiment

↝ gute Arbeitsformel (für Ingenieure), liefert aber keine physikalische Erklärung!

$[a] = [g(\frac{\nu}{T})] = \left[\frac{w_\nu}{\nu^3}\right] = \frac{Ws^2}{m^3 s^{-3}} = Ws^5/m^3$

$[b] = \left[\frac{T}{\nu}\right] = \frac{K}{s^{-1}} = Ks$ = Kelvinsekunde

↳ Kelvin

a, b : Naturkonstanten; heute üblicherweise in Form zweier anderer Naturkonstanten geschrieben:

$$a := \frac{8\pi h}{c_0^3}, \qquad b := \frac{h}{k_B}$$

h → Plancksches Wirkungsquantum ($\approx 6{,}63 \cdot 10^{-34}$ Js)

k_B ↳ Boltzmann-Konstante ($\approx 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ J/K)

$$\rightsquigarrow \boxed{w_\nu = \frac{8\pi}{c_0^3} \cdot \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h \cdot \nu}{k_B T}}}} \quad (1.4)$$

übliche Darstellung als Funktion der Wellenlänge

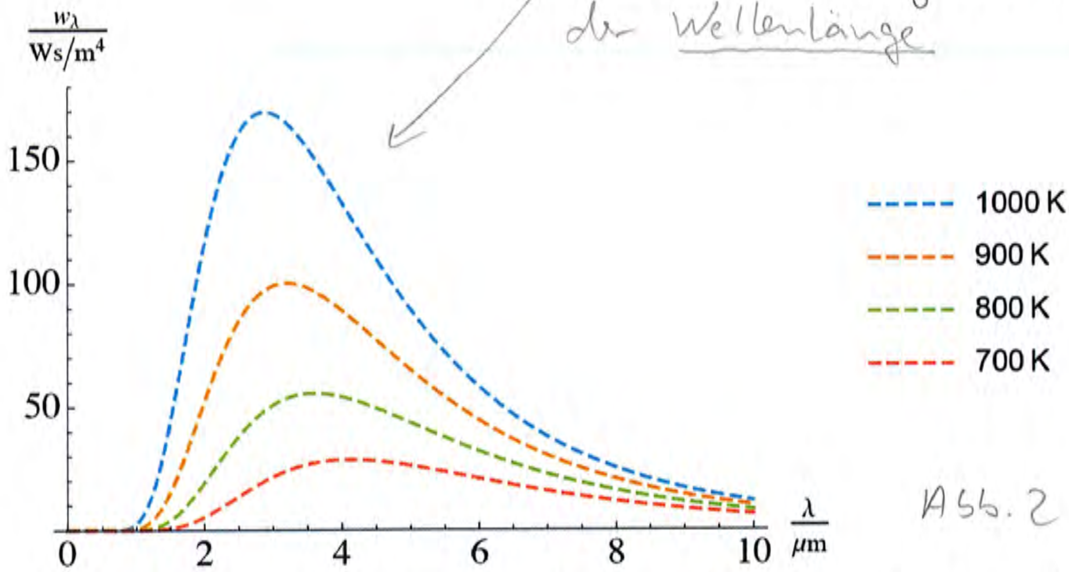


Abb. 2

(Umrechnung: $w_\nu = \frac{dw}{d\nu} = \frac{dw}{d\lambda} \cdot \frac{d\lambda}{d\nu}$ mit $\lambda = \frac{c_0}{\nu}$

$$\rightsquigarrow \frac{d\lambda}{d\nu} = c_0 \cdot \frac{d(1/\nu)}{d\nu} = -\frac{c_0}{\nu^2} \; ; \text{ mit } w_\nu := -\frac{dw}{d\lambda}:$$

$$w_\lambda := -\frac{dw}{d\lambda} = \frac{\nu^2}{c_0} w_\nu = \frac{c_0}{\lambda^2} w_\nu \quad)$$

jetzt Planck: kennt die Wiensche Gleichung (1.4) (in etwas anderer Darstellung) und will diese (exakt) herleiten.

Plancks (geniale) Vorgehensweise:

Ansatz: lt. Kirchhoff sind die Eigenschaften des schwarzen Strahlers unabhängig von seiner Realisierung

↷ Man kann irgendein Wandmaterial annehmen (auch ein real nicht existierendes), wenn es nur den bekannten Gesetzen der Physik folgt.

Wahl: Planck stellt sich Wandmaterial als kleine el. Ladungen vor, die elastisch (z.B. mit Hilfe von Federn) in einer Ruhelage befestigt sind → Resonatoren *)

↷ Wenn Resonatoren von el.-magn. Welle erreicht werden, wirken Kräfte, und die Ladungen bewegen sich → nehmen die Energie auf – und geben auch el.-magn. Welle ab (beschleunigte Ladung): Über Gesetze der Elektrodynamik und Mechanik komplett beschreibbar

vernünft. Annahme: Im thermodynamischen Gleichgewicht nehmen Ladungen im Mittel stets ebensoviel Energie auf, wie sie abgeben!

---

*) Bereits 1897 hatte Thomson – der 1903 ein Atommodell entwickelte („Plumpudding-Modell") – entdeckt, dass in Atomen el. geladene Teilchen, die Elektronen, vorhanden sein müssen.

Unter Anwendung der Maxw. Theorie*) sowie der Gesetze der Mechanik findet Planck so

$$w_\nu(\nu,T) =: \frac{8\pi\nu^2}{c_0^3} E(\nu,T) . \qquad (1.5)$$

Hierin ist $E(\nu,T)$ die (mittlere) Energie des einzelnen Resonators (also der schwingenden Ladung). Diese bestimmte M.P. jetzt auf etwas abenteuerliche Weise: Da er die Lösung (1.4) von Wien (die war messtechnisch überprüft) für richtig hielt, „bastelte" er sich einen Ausdruck für die Entropie $S(E)$ des einzelnen Resonators, der da lautete:

$$S(E) = \frac{k_B \cdot E}{h\nu}\left[1 + \ln\left(\frac{h}{E\nu^2}\right)\right] . \qquad (1.6)$$

Dass dieser Ausdruck richtig war, glaubte er dadurch beweisen zu können, dass (1.6) in der Tat den 2. Hauptsatz der Thermodynamik erfüllte. Dann wendete er die aus der Thermodynamik bekannte Beziehung (ohne Beweis)

$$\frac{1}{T} \stackrel{!}{=} \frac{dS(E)}{dE} \qquad (1.7)$$

an und erhielt hieraus $E(\nu,T)$. Eingesetzt in (1.5) ergab sich so (1.4) (bitte nachrechnen!).

Was er dabei übersah: (1.6) ist <u>nicht die einzige Lösung</u>, die hier den 2. Hauptsatz erfüllt.

---

*) Planck glaubte damals, dass der Begriff der Entropie (und entsprechend der 2. Hauptsatz) letztlich aus d. Maxw. Theorie herleitbar sei (das war sein Forschungsprogramm) — was nur Unsinn sein kann, weil die Maxw. Theorie symm. in der Zeit ist.

Nachdem Planck voller Stolz die von ihm endlich gefundene „Herleitg" der Wienschen Gleichg (1.4) der Deutschen Physikalischen Gesellschaft vorstellen wollte, erfuhr er recht zeitig (7. Oktober 1900) von dem Experimentator Heinrich Rubens, dass das Wiensche Gesetz <u>nicht stimmte</u>: bei niedrigen Frequenzen (bei denen man aus technischen Gründen bisher die Strahlg nur sehr ungenau messen konnte) war die Wiensche Gleichg (1.4) <u>völlig falsch</u>!!

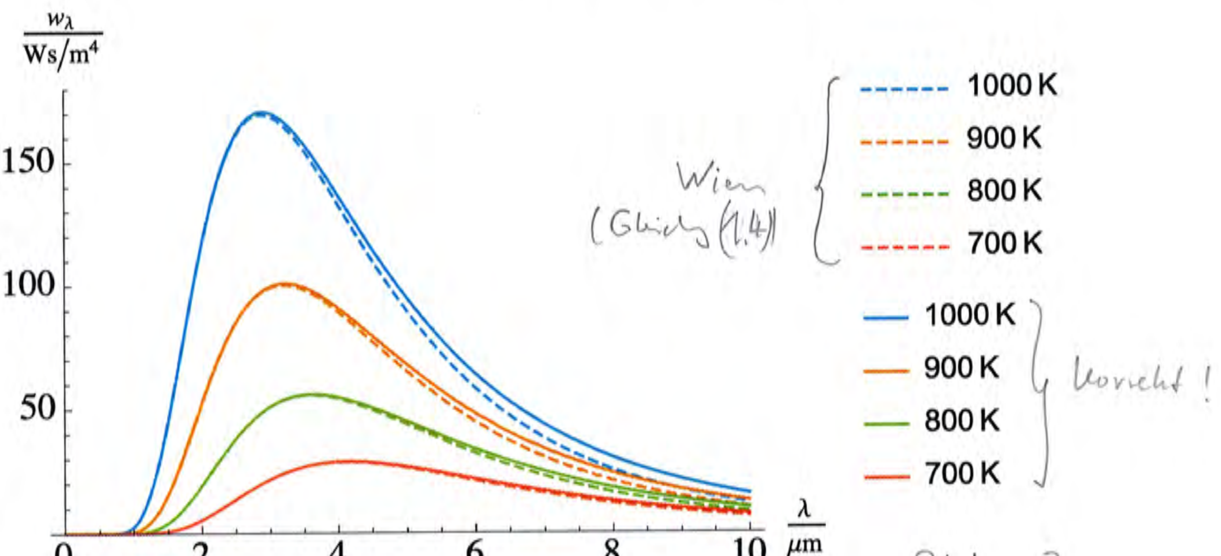


Abb. 3

Der sehr erschrockene Planck fand noch am selben Abend (durch geschicktes Probieren) eine leicht von (1.4) abweichende, die neuen Messresultate (Abb. 3) befriedigende Lösg, nämlich

$$\boxed{w_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c_0^3}\underbrace{\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_BT}}-1}}_{\text{korrektes } E(\nu,T)}} \quad . \qquad (1.8)$$

<u>Problem:</u> Plancks tolle Ableitung ergab (1.4), <u>nicht</u> (1.8)!

Auch jetzt beschloss Planck, wieder die (richtige) Entropie zu finden, hatte er jetzt doch immerhin erkannt, dass sein Ausdruck (1.6) nicht der einzig mögliche war. Damit entfiel aber die Möglichkeit, eine neue Entropie zu „basteln", die dann via (1.7) schließlich auf (1.8) führte, denn das Argument, dass diese Entropie den 2. Hauptsatz erfüllt und damit richtig sein müsse, entfiel: Er musste die gesuchte Entropie <u>nachvollziehbar herleiten</u>. Das wollte ihm aber einfach nicht gelingen! So verfiel er auf den (verzweifelten) Ausweg, es mit der von ihm bisher stets bekämpften, von Boltzmann stammenden Methode der <u>statistischen Interpretation der Entropie</u> zu versuchen![*]

Die statistische Interpretation der Entropie nach Boltzmann formulierte Planck gemäß

$$S = k_B \cdot \ln W \qquad (1.9)$$

(so ist die Gleichung noch heute auf Boltzmanns Grabstein zu finden). Hierin ist W das „statistische Gewicht" des Zustands eines zu betrachtenden Systems der Entropie S, was bedeutet, dass W die Anzahl der Möglichkeiten ist, den <u>makroskopischen</u> Zustand auf verschiedene <u>mikroskopische</u> Arten zu realisieren (wird gleich im Detail erläutert).

---

[*] Diese Methode bekämpfte er deshalb, weil er ja fest daran glaubte, eine Interpretation der Entropie mit Hilfe der streng kausalen Maxw. Gleichungen finden zu können.

Mit anderen Worten: Plancks Aufgabe bestand darin, herauszufinden, wieviele Möglichkeiten es gab, die Energie (pro Volumen und Frequenz) w_ν auf N Oszillatoren (also die von Planck angenommenen schwingenden Ladungen der Wände des schwarzen Strahlers) zu verteilen!

Dabei war klar: ließ man zu, dass w_ν in beliebig kleine Portionen aufteilbar war (m.a.W.: ∞ viel Portionen), dann gab es auch ∞ viele Möglichkeiten, dies zu tun, d.h. $W \to \infty$. Damit wäre aber auch $S \to \infty$, was (sicher) völliger Unsinn war.

So verfiel M.P. auf die Idee, dass er eine untere Grenze (ε) an Energieportionen wählen müsste, damit W (und damit S) endlich wird. Planck empfand das damals als schlimme Heuristik, von der er hoffte, dass man dies irgendwann werde eliminieren oder zumindest rechtfertigen zu können.
In einem Brief von 1931 an Robert Williams Wood (be)schrieb M.P. rückschauend die Annahme kleinster Energieportionen als einen „Akt der Verzweiflung".

Im Einzelnen waren Plancks Überlegungen zur Bestimmung von W wie folgt:

Bezeichnet man die zur Verfügung stehende Gesamtenergie in einem Volumenelement dV und in einem Frequenzintervall $d\nu$ mit $U := w_\nu \cdot dV \cdot d\nu$, dann entfällt bei N Resonatoren auf jeden Resonator die Energie $\boxed{E = \frac{U}{N}}$. Nimmt man weiterhin eine kleinste Energieportion ε an, dann gibt es insgesamt $\boxed{n = \frac{U}{\varepsilon}}$ Energieportionen, die <u>beliebig</u> auf die N Resonatoren zu verteilen sind.

Aus der Kombinatorik bekannt: Verteilung von n Kugeln auf N Urnen, wenn die Kugeln nicht voneinander unterscheidbar sind, ergibt

$$W = \binom{N+n-1}{n} = \frac{(N+n-1)!}{n!\,(N-1)!} \qquad (1.10)$$

Möglichkeiten. Für „große" Werte von N (bzw. n) gilt die Stirlingsche Näherungsformel

$$\boxed{n! \approx \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n} \quad (\text{exakt für } n \to \infty)$$

$$\curvearrowright \ln n! \approx \frac{1}{2}\ln(2\pi n) + n \ln \frac{n}{e}$$

Da für große n $\frac{1}{2}\ln(2\pi n) \ll n \ln\frac{n}{e}$ gilt:

$$\curvearrowright \boxed{\ln n! \approx n \ln n - n} \qquad (1.11)$$

Tatsächlich weist (1.11) bereits für $n > 751$ einen Fehler von $< 0{,}1\%$ auf.

Angewandt auf (1.10):

$$\ln W = \ln \underbrace{(N+n-1)}_{\approx N+n}! - \ln(n!) - \ln \underbrace{(N-1)}_{\approx N}!$$

$$\approx (N+n)\ln(N+n) - (N+n)$$

$$- n\ln n + n \quad - N\ln N + N$$

$$= (N+n)\ln(N+n) - n\ln n - N\ln N$$

Multipliziert mit k_B ergibt dies also gemäß (1.9) die Entropie des Gesamtsystems (also der Summe aller N Resonatoren). Damit erhält man die gesuchte Entropie eines Resonators der Energie E durch Division durch N, also

$$\frac{\ln W}{N} = \left(\frac{n}{N}+1\right)\ln\left[N\left(\frac{n}{N}+1\right)\right] - \frac{n}{N}\ln\left(N\frac{n}{N}\right)$$

$$- \ln N$$

$$= \left(\frac{n}{N}+1\right)\ln N + \left(\frac{n}{N}+1\right)\ln\left(\frac{n}{N}+1\right)$$

$$- \frac{n}{N}\ln N - \frac{n}{N}\ln\frac{n}{N} - \ln N$$

$$= \left(\frac{n}{N}+1\right)\ln\left(\frac{n}{N}+1\right) - \frac{n}{N}\ln\frac{n}{N}$$

$$+ \cancel{\frac{n}{N}\ln N} + \cancel{\ln N} - \cancel{\frac{n}{N}\ln N} - \cancel{\ln N} \quad ✓$$

$$= \left(\frac{n}{N}+1\right)\ln\left(\frac{n}{N}+1\right) - \frac{n}{N}\ln\frac{n}{N} \quad ✓$$

Gesamtenergie ~~(Vol x Frequenz)~~ in dV und dν

Wegen $E = \frac{U}{N}$, $n = \frac{U}{\varepsilon} \curvearrowright E\cdot N = \varepsilon\cdot n \Leftrightarrow \frac{n}{N} = \frac{E}{\varepsilon}$:

pro Resonator

N = Anzahl Resonatoren   n = Anzahl möglicher Energiepartition

$$\rightsquigarrow S(E) = k_B \frac{\ln W}{N} = k_B \left[\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right)\ln\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right) - \frac{E}{\varepsilon}\ln\frac{E}{\varepsilon}\right] \quad (1.12)$$

Bestimmt man hieraus gemäß (1.7)

$$\frac{1}{T} = \frac{dS(E)}{dE} = \frac{k_B}{\varepsilon}\left[\ln\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right) - \ln\frac{E}{\varepsilon}\right]$$

den Wert $E\,(= E(\nu, T))$, so erhält man (ausprobieren!)

$$= \frac{k_B}{\varepsilon}\ln\left(1+\frac{\varepsilon}{E}\right)$$

$$E = \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} - 1} \qquad \rightsquigarrow \frac{\varepsilon}{k_B T} = \ln\left(1+\frac{\varepsilon}{E}\right)$$

was gerade auf (1.8) führt, unter Berücksichtigung von (1.5) wenn man

$$\boxed{\varepsilon = h \cdot \nu} \quad (1.13)$$

$$\frac{1}{k_B}\frac{dS}{dE} = \frac{d\left[\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right)\ln\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right)\right]}{d\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right)}\cdot\frac{1}{\varepsilon} - \frac{d\left[\frac{E}{\varepsilon}\ln\frac{E}{\varepsilon}\right]}{d\frac{E}{\varepsilon}}\cdot\frac{1}{\varepsilon} = \left[\ln\left(\frac{E}{\varepsilon}+1\right) - \ln\frac{E}{\varepsilon}\right]\frac{1}{\varepsilon}$$

setzt! $\quad \frac{d(x\cdot\ln x)}{dx} = 1 + \ln x$

Diese Herleitung stellte Planck am 14.12.1900 der Deutschen Physikalischen Gesellschaft vor.

Daher gilt dieses Datum als die Geburtsstunde der Quantenmechanik!

Planck glaubte dann weiterhin, dass man zumindest im Vakuum (also ohne Wechselwirkung mit Materie) alle Effekte mit Hilfe der Maxw. Theorie erklären könnte – was Einstein widerlegte.

M.P. akzeptierte die durch ihn angestoßene QM nie – und auch A.E. hatte schließlich bis zu seinem Lebensende Probleme mit der dann 1926 entwickelten „modernen" QM.

Planck

2. Die „alte" Quantentheorie

Die sog. „alte Quantentheorie" begann 1900 mit der Entdeckung Max Plancks, dass die Energie gequantelt ist (vgl. Kap. 1.2):

$$\boxed{E = h \cdot f = \hbar \cdot \omega} \quad (2.1)$$

Sie setzte sich mit Einsteins Erklärung des „lichtelektrischen Effekts" (Photoeffekt) 1905 fort (vgl. Kap. 2.2) und mündete schließlich im Bohrschen Atommodell (1913, vgl. Kap. 2.3). Nachdem de Broglie 1924 seine Hypothese von den Materiewellen aufgestellt hatte (vgl. Kap. 2.4) wurde die „alte" QM aufgrund verschiedener, noch zu diskutierender Unzulänglichkeiten schließlich 1925 durch die Arbeiten Heisenbergs (Matrizenmechanik) bzw. 1926 Schrödingers (Wellenmechanik) von der sog. „neuen Quantenmechanik" abgelöst.

Die Betrachtungen zur Quantenmechanik wurden schon früh im Zusammenhang mit Atommodellen durchgeführt, wovon hier zunächst die Rede sein soll.

2.1 Atommodelle: Von der Historie bis Rutherford

a) Demokrit (ca. 400 v. Chr.): Es gibt unteilbare (átomos = unteilbar) Grundbausteine, aus denen alle Substanzen bestehen (werden f. versch. Substanzen nur unterschiedlich zusammengesetzt)

b) Dalton-Modell (1803): Wie Demokrit, wobei sich Teilchen (= Atome) aber je nach (chem.) Element in ihren Massen unterscheiden und sich bei chem. Reaktion lediglich umordnen

c) Thomson-Modell (1903): T. konnte durch Experimente mit Kathodenstrahlen nachweisen, dass diese aus geladenen Teilchen – den Elektronen – bestehen. Schloss daraus, dass die Elektronen schon vorher in der Kathode = Materie vorhanden waren. Da Atom (el.) neutral: Nahm gleichmäßig verteilte, masselose pos. Ladung an, in der Elektronen (die allein Masse besaßen) wie Rosinen in einem Kuchen verteilt waren (deshalb: Plumpudding-Modell).

d) Rutherford-Modell (1911): R. stellte durch Streuversuche an dünnen Goldfolien (10^{-3} mm dick) mit Hilfe von den schweren α-Teilchen = 2 Protonen + 2 Neutronen (wie man erst später herausfand) fest, dass diese selten gestreut wurden, aber manchmal doch, und dann sehr massiv. Schloss daraus, dass Atom (bzw. Materie) weitgehend „leer" ist und sich die Masse im wesentlichen an einem Punkt, dem Atomkern, konzentriert (nur dort erfolgt Streuung der α-Teilchen): Im Kern pos. Ladung, während Elektronen den Kern wie Planeten die Sonne umkreisten.

2.2 Einsteins Lichtquantenhypothese

1887 entdeckt Heinrich Hertz den sog. „Lichtelektrischen Effekt": Metalloberfläche wird mit UV-Licht bestrahlt ⇒ hierdurch werden Elektronen frei, die sich in einem elektrischen Feld beschleunigen oder abbremsen lassen. Experimentelle Resultate:

a) Photoeffekt tritt erst oberhalb einer Grenzfrequenz f_g des UV-Lichtes auf, also

$$f \overset{!}{\geq} f_g \qquad (2.2)$$

f_g hängt vom verwendeten Metall ab.

b) Kinetische Energie der befreiten Elektronen wird nur durch Frequenz f bestimmt und nicht von der Intensität (= Helligkeit) des Lichtes. Dabei gilt

$$E_{kin} \sim f \qquad (2.3)$$

c) Erst für $f \geq f_g$ ist die Anzahl der befreiten Elektronen proportional der Intensität des Lichtes

d) Photoeffekt erfolgt instantan (also innerhalb von $\Delta t < 10^{-9}\,s$)

<u>Klassischer Deutungsversuch</u>: Feldstärkevektor $\vec{E}$ des einfallenden Lichts (= el.-magn. Welle) lässt Metallelektronen schwingen, wobei bei Resonanz des Systems Elektron – Materie (vgl. Modellierung des schwarzen Strahlers durch M. Planck) nach und nach so viel Energie zugeführt wird, dass Elektron frei wird.

⇝ Es müsste ein Zusammenhang zwischen Intensität ($\sim \vec{E}^2$) und kin. Energie der Elektronen bestehen.

⇒ steht in krassem Widerspruch zu (2.3) und zu d) !

<u>Richtige Deutung</u> durch A. Einstein 1905:

Licht verhält sich wie Teilchen = Photonen jeweils mit der Ruhemasse Null, die aber stets Lichtgeschwindigkeit aufweisen und (jeweils) über die Energie

$$E_{Photon} = h \cdot f \qquad (2.4)$$

verfügen. Sind v die Geschwindigkeit und m die Masse des befreiten Elektrons und W_A die (materialspezifische) Ablösearbeit des Elektrons von der Materie, dann gilt die <u>Einsteinsche Formel</u>:

$$\boxed{h \cdot f = \frac{1}{2} m v^2 + W_A} \qquad (2.5)$$

2.3. Bohrsches Atommodell

2.3.1 Versagen des Rutherford-Modells

a) Von vornherein klar: beschleunigt bewegte Ladungen (Elektronen auf Bahnen um den Atomkern) strahlen el.-magn. Wellen ab (so funktionieren Antennen), so dass die Elektronen ihre kin. Energie verlieren und in den Kern stürzen müssten (innerhalb von $0{,}1\,\mu s$!) → Widerspruch zur Erfahrung, dass Atome i. Allg. sehr stabil sind.

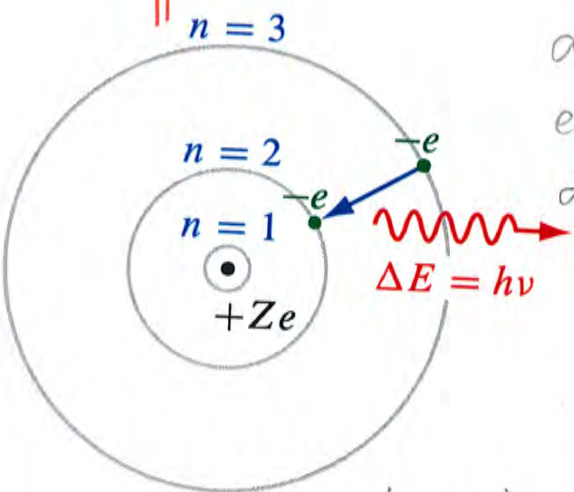
b) Regt man ein Atom – z.B. im einfachsten Fall ein Wasserstoffatom – energetisch an, indem man es z.B. hochenergetisch bestrahlt, dann sendet es nach kurzer Zeit verschiedene Strahlungen (d.h. el.-magn. Wellen) diskreter Frequenzen aus, die charakteristisch für das entsprechende Atom ist (wird heute als Spektralanalyse benutzt) → Mit Rutherford-Modell gar nicht erklärbar.

2.3.2 Atommodell nach Bohr

Modifikation des Rutherford-Modells durch willkürliche Annahmen (von denen Bohr wusste, dass sie physikalisch – zunächst – nicht befriedigend begründbar sind, die aber das Verhalten der Atome – wie oben beschrieben – erklären können sollten:

1. Postulat: Es gibt (nur) diskrete, stationäre „Bahnen"*) der Elektronen mit den dann ebenfalls diskreten Energien $E_n, E_{n+1}, \dots, n \in \mathbb{N}$, bei denen keine Abstrahlung erfolgt.

2. Postulat: Übergänge zwischen den stationären Zuständen (d.h. Elektron begibt sich von Bahn mit $E_n > E_m$ auf Bahn mit E_m) führt zur el.-magn. (Ab)strahlung mit der Frequenz f_{nm} gemäß



$$\boxed{h \cdot f_{nm} = \underbrace{E_n - E_m}_{\Delta E_{nm}}} > 0 \qquad (2.6)$$

Gleichung (2.6) wurde dabei induziert von der Arbeit von Planck (1900) zur Wärmestrahlung und von Einstein (1905) zum Photoeffekt.

Hieraus war noch nicht klar, welche Radien diese stationären Bahnen denn nun haben müssten. Hierzu diente dann die genialste Idee Bohrs, das Korrespondenzprinzip, welches dann Inhalt des letzten, 3. Bohrschen Postulates wurde.

---

*) Bohr nahm zunächst – der Einfachheit halber – Kreisbahnen an.

2.3.3 Korrespondenzprinzip

Zunächst die völlig klassischen Überlegungen Bohrs:

d.h. neg. Ladung

a) Gesamtenergie des kreisenden Elektrons*):

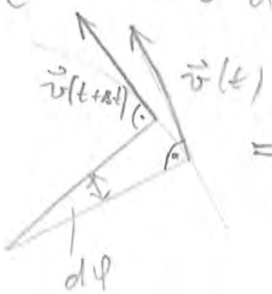
$$\boxed{E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}} \qquad (2.7)$$

$$E_{kin} \rightarrow \frac{1}{2} m v^2 \rightarrow \left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \left(r \frac{d\varphi}{dt}\right)^2 = r^2 \omega^2$$

$$E_{pot} \rightarrow \text{Coulomb: } F(r) = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \leadsto E_{pot} = \int_r^\infty F(r')\,dr' = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(-\frac{1}{r'}\right)\Bigg|_r^\infty$$

b) Kräftegleichgewicht:

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \overset{!}{=} m_e \frac{dv}{dt} = m_e v \cdot \omega = m_e \cdot r \cdot \omega^2 \qquad (*)$$



$$\Longrightarrow \frac{dv}{v} = d\varphi \qquad \left(d\vec{v} := \vec{v}(t+\Delta t) - \vec{v}(t)\right)$$

(*) nach r aufgelöst: $r = \dfrac{e^{2/3}}{(4\pi\varepsilon_0)^{1/3} m_e^{1/3} \omega^{2/3}}$

In (2.7) eingesetzt:

$$E = \frac{1}{2} m_e \omega^2 \frac{e^{4/3}}{(4\pi\varepsilon_0)^{2/3} m_e^{2/3} \omega^{4/3}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{(4\pi\varepsilon_0)^{1/3} m_e^{1/3} \omega^{2/3}}{e^{2/3}}$$

$$\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^{2/3}}$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^{2/3}} \left[\underbrace{\frac{m_e \omega^2 e^{4/3}}{m_e^{2/3} \omega^{4/3}}}_{m_e^{1/3} \omega^{2/3} e_e^{4/3}} - 2 \underbrace{\frac{e_e^2 m^{1/3} \omega^{2/3}}{e_e^{2/3}}}_{e_e^{4/3} m_e^{1/3} \omega^{2/3}} \right]$$

---

*) Bohr ging zunächst von nur einem Elektron aus, behandelte also das Wasserstoffatom.

$$\curvearrowright \boxed{E = -\frac{1}{2}\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^{2/3}}\left(m_e \cdot \omega^2 \cdot e^4\right)^{1/3}} \qquad (2.8)$$

Bis auf (2.6) alles noch komplett klassisch!

c) Die eingangs erwähnten Spektrallinien (Strahlung diskreter Frequenzen) wurden schon, beginnend mit Ångström 1853, durch Balmer 1885 gemessen und beschrieben. Der schwedische Physiker Rydberg verallgemeinerte die Beschreibung Balmers dahingehend, dass die Wellenlängen λ_{nm} der ausgesandten diskreten Strahlungen beim Übergang eines Elektrons von der Bahn mit der Energie E_m zur Bahn mit der Energie E_n *) proportional zu ganzen Zahlen sein sollten gemäß

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} \sim \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \qquad , n, m \in \mathbb{N}$$

bzw. durch Einführung einer Proportionalitätskonstante R (die zu Ehren von Rydberg „Rydberg-Konstante" genannt wird)

$$\boxed{\frac{1}{\lambda_{nm}} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)} \quad (> 0, \text{ d.h. } n > m) \quad (2.9)$$

Der (damals) gemessene Wert (von R) (also Resultat des Experimentes) beträgt 109 677,5810 cm^{-1}. Überhaupt ist (2.9) zunächst allein Resultat von Messungen.

*) Davon, dass das etwas mit Elektronenbahnen zu tun haben könnte, wussten natürlich weder Balmer noch Rydberg etwas.

Mit $\lambda_{nm} = \frac{c}{f_{nm}}$ und $E = h \cdot f$ lässt sich (2.9) wie folgt umschreiben:

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{f_{nm}}{c} = \frac{f_{nm} \cdot h}{h \cdot c} \overset{(2.6)}{=} \frac{E_n - E_m}{hc} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) > 0$$

Man kann also den Energien E_n und E_m die folgenden Ausdrücke zuordnen:

$$\boxed{E_n = -\frac{R \cdot h \cdot c}{n^2}}, \quad \boxed{E_m = -\frac{R \cdot h \cdot c}{m^2}} \qquad (2.10)$$

Man nennt die Zahlen n bzw. m – weil sie gemäß (9.1.5) diskrete Energien beschreiben, die Energien also gequantelt sind – Quantenzahlen (genau: Hauptquantenzahlen).

Da $n, m \in \mathbb{N}$, beträgt die kleinstmögliche Energiedifferenz

$$\Delta E_{min} = R \cdot h \cdot c \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

d.h. man gelangt zu einem Energiekontinuum entweder, wenn $h \to 0$ *) oder für hohe Quantenzahlen, also $n \to \infty$: Dann befindet man sich in der klassischen Physik, wo alle Energiewerte prinzipiell auftreten können, also keine Quantelung gilt.

---

*) h ist ja in der Tat sehr klein, weshalb Quanteneffekte im Alltag nicht zu beobachten sind.

Dies führte Bohr zu seinem sehr wichtigen **Korrespondenzprinzip**:

3. Postulat: Für große Quantenzahlen (d.h. große Bahnradien**)) muss die klassische Physik gelten!*)

2.3.4 Übergang zur klassischen Physik

Aus (2.9) folgt bei minimaler Differenz $\Delta n = 1$ der Quantenzahlen, also $m = n - \Delta n = n-1$ und gleichzeitig $n \to \infty$ mit $\lambda_{nm} = \frac{c}{f_{nm}}$:

$$\lim_{n\to\infty} f_{n,n-\Delta n} = R\cdot c \lim_{n\to\infty}\left[\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2}\right]$$

$$= R\cdot c \lim_{n\to\infty}\left[\frac{n^2-(n-1)^2}{n^2(n-1)^2}\right]$$

$$= R\cdot c \lim_{n\to\infty} \frac{2n-1}{n^4-2n^3+n^2} = R\cdot c\,\frac{2n}{n^4}$$

$$= \frac{2Rc}{n^3} =: f_{\text{klassisch}} =: f$$

$$\rightsquigarrow \boxed{\omega := 2\pi f = \frac{4\pi R c}{n^3}} \qquad (2.11)$$

---

*) Dies kennen wir natürlich auch aus der Relativitätstheorie.

**) Bei großen Bahnradien $r \to \infty$ geht die potentielle Energie $\to 0$, d.h. auch die Geschwindigkeit kann sehr klein werden, ohne dass das Elektron (klassisch) in den Kern fällt, also (auch) $E_{kin} \to 0$. Dies entspricht gemäß (2.10) einer großen Quantenzahl.

Im klassischen Fall strahlt – wie erwähnt – ein Elektron auf einer Kreisbahn eine el.-magn. Welle mit der Frequenz ω ab, wobei ω gleich der Winkelgeschwindigkeit des Elektrons auf seiner Kreisbahn sein muss (vgl. z.B. magn. Dipol). Der geniale Gedanke Bohrs bestand nun darin, die gemäß (2.11) für große Quantenzahlen gewonnene Kreisfrequenz ω in (2.8) einzusetzen und gleichzeitig E mit E_n aus (2.10) zu identifizieren:

$$\frac{R \cdot h \cdot c}{n^2} \overset{!}{=} \frac{1}{2} \frac{1}{(4\pi \varepsilon_0)^{2/3}} \left(m_e \cdot \frac{(4\pi)^2 R^2 c^2}{n^6} \cdot e^4 \right)^{1/3}$$

Hieraus lässt sich R – jetzt nicht mehr experimentell, sondern rechnerisch – bestimmen, was für Bohr der Prüfstein dafür war, ob seine Idee funktionierte (der gemessene Wert war ja bekannt):

$$\frac{R^{\cancel{3}} h^3 c^{\cancel{3}}}{\cancel{n^6}} = \frac{1}{8} \frac{1}{\cancel{(4\pi)^2} \varepsilon_0^2} \cdot m_e \cdot \frac{\cancel{(4\pi)^2} \cancel{R^2} \cancel{c^2}}{\cancel{n^6}} e^4$$

$$\rightsquigarrow \boxed{R_{\text{Theorie}} = \frac{1}{8} \frac{m_e \cdot e^4}{\varepsilon_0^2 h^3 c}} \qquad (2.12)$$

Mit den – auch damals schon – bekannten Meßwerten für

$$\left.\begin{aligned}
m_e &= 9{,}109\,383 \cdot 10^{-31}\ \mathrm{kg}\\
e &= -1{,}602\,177 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{As}\\
\varepsilon_0 &= 8{,}854\,188 \cdot 10^{-12}\ \frac{\mathrm{As}}{\mathrm{Vm}}\\
h &= 6{,}626\,070 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{Ws}^2\\
c &= 299\,792\,458\ \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}
\end{aligned}\right\}\ (**)$$

(so genau waren die Werte damals natürlich noch nicht bekannt):

$$R_{Theo} \approx \frac{1}{8} \cdot \frac{9{,}109 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}\ (1{,}602)^4 \cdot 10^{-76}\ \cancel{A^4}^{\,A^{-1}}\,\cancel{s^4}\cdot \cancel{V^2}^{\,V^{-1}}\,m^2\,s^{-3}}{8{,}854^2 \cdot 10^{-24}\ \cancel{A^2 s^2} \cdot 6{,}626^3 \cdot 10^{-102}\ W^3\,\cancel{s^6} \cdot 3 \cdot 10^8\,m}$$

$$W^3 = \cancel{V^3}\,\cancel{A^3}$$

$$= \frac{1}{8}\ \frac{9{,}109 \cdot (1{,}602)^4 \cdot 10^{-107}}{8{,}854^2 \cdot 6{,}626^3 \cdot 3 \cdot 10^{-118}}\ \frac{\mathrm{kg\,m}}{\mathrm{s^3\,A\,V}}$$

$$\frac{\mathrm{kg\,m}}{\mathrm{s^2}\cdot \mathrm{VA\cdot s}} \qquad N = \frac{Nm}{m} = \frac{VAs}{m}$$

$$\approx 10\,961\,656\ \mathrm{m}^{-1} = \underline{\underline{109.616{,}56\ \mathrm{cm}^{-1}}}$$

Der Vergleich mit dem Messwert zeigte sehr gute Übereinstimmung (praktisch exakt erhält man den Messwert, wenn man elliptische Bahnen zulässt). Das war für Bohr der Beweis, dass seine Überlegungen richtig waren: Ein großer Triumph!!

Jetzt lassen sich auch die Radien r der Elektronenbahnen bestimmen:

(2.7) und die z.B. 1. Gleichg in (2.10) müssen identische Werte liefern (also die <u>Gesamtenergie</u> des Elektrons):

$$\frac{1}{2} m_e r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \overset{!}{=} -\frac{R\cdot h\cdot c}{n^2}$$

Ferner ergab sich aus dem Kräftegleichgewicht (Fliehkraft $\overset{!}{=}$ elektrostatische Anziehungskraft):

$$r^3 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot m_e \cdot \omega^2} \qquad (3*)$$

Letzte Gleichg nach ω^2 aufgelöst und oben eingesetzt:

$$\frac{1}{2} \cancel{m_e} \cancel{r^2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cancel{m_e}\, r^{\cancel{3}}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{R\cdot h\cdot c}{n^2}$$

$$\frac{1}{2}\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{R\cdot h\cdot c}{n^2}$$

$$\curvearrowright\ r = \frac{e^2\cdot n^2}{8\pi\varepsilon_0 R\cdot h\cdot c} \underset{\substack{\uparrow\\(2.12)}}{=} \frac{\cancel{e^2}\cdot n^2\cdot \cancel{8}\,\varepsilon_0^{\cancel{2}}\, h^{\cancel{3}\,2}\, \cancel{c}}{\cancel{8}\pi\, \cancel{\varepsilon_0}\, \cancel{h}\, \cancel{c}\; m_e\, e^{\cancel{4}\,2}}$$

$$\curvearrowright\ \boxed{r = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi\, m_e\, e^2}} \ \curvearrowright\ \underline{r \text{ gequantelt}} \qquad (2.13)$$

Es soll noch der Betrag des Drehimpulses $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = m_e\cdot\vec{r}\times\vec{v}$ mit $\vec{r}\perp\vec{v}\ \forall t$ bestimmt werden:

$$L = m_e \cdot r \cdot v = m_e r^2 \omega$$

$$v = \frac{ds}{dt} = r\frac{d\varphi}{dt} = r \cdot \omega$$

ω ergibt sich aus (3*):

$$L^2 = m_e^{\cancel{2}} r^{\cancel{4}} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cancel{m_e} \cancel{r^3}} \overset{(2.13)}{=} \frac{\cancel{m_e} \cancel{e^2}}{4\pi\cancel{\varepsilon_0}} \cdot \frac{n^2h^2\cancel{\varepsilon_0}}{\pi \cancel{m_e} \cancel{e^2}} = \frac{n^2h^2}{4\pi^2}$$

$$\curvearrowright \boxed{\boxed{L = \frac{n \cdot h}{2\pi}}} \curvearrowright L \text{ gequantelt} \qquad (2.14)$$

In manchen Textbüchern wird behauptet, dass (2.14) eines der Bohrschen Postulate sei, was aber nicht korrekt ist!
In der Tat wäre Bohr unter Annahme von (2.14) schneller zum Ziel gelangt – jedoch nicht mit der gleichen Universalität wie mit dem Korrespondenzprinzip, welches eine wichtige und sehr allgemeine Aussage zum Wesen der Quantenphysik enthält.

Die von Bohr entwickelte Quantentheorie wird auch als „alte Quantentheorie" bezeichnet. Sie beschreibt viele Eigenschaften des Wasserstoffatoms, aber nicht alle, und wurde 1925 durch Heisenberg, Born und Jordan durch die „moderne Quantenmechanik" abgelöst.

ab hier Tafel

2.4 Materiewellen

2.4.1 Ein Ausflug zu den el.-magn. Wellen (klassisch)

Alle el.-magn. Vorgänge klassisch via Maxwell beschreibbar: (erläutern!)

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{rot}\,\vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}\ ; \quad \mathrm{div}\,\vec{B} = 0 \\ \mathrm{rot}\,\vec{H} &= \vec{S} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}\ ; \quad \mathrm{div}\,\vec{D} = \varrho \end{aligned}\right\} \quad (2.15)$$

mit $\vec{S}$ = Stromdichte (im Vakuum bzw. in Isolatoren: $\vec{S} \equiv \vec{0}$), $\vec{D} = \varepsilon \cdot \vec{E}$ (im Vakuum – dann $\varepsilon = \varepsilon_0$ – oder in isotropem (lin.) Isolator) und $\vec{B} = \mu \vec{H}$ (im Vakuum – dann $\mu = \mu_0$ – oder in isotropem lin. Material).

Im Folgenden: $\varepsilon = \text{const.} \neq \varepsilon(\vec{r})$, $\mu = \text{const.} \neq \mu(\vec{r})$ und $\varrho \equiv 0$, d.h. keine Raumladung!

$$\rightsquigarrow \mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\vec{E} \overset{\text{Vektoranalysis}}{=} \mathrm{grad}\,\underbrace{\mathrm{div}\,\vec{E}}_{= \frac{1}{\varepsilon}\mathrm{div}\,\vec{D} = 0} - \Delta \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\mu\,\mathrm{rot}\,\vec{H}$$

kartesisch: $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\rightsquigarrow -\Delta \vec{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t}\Big(\underbrace{\vec{S}}_{\equiv \vec{0}} + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\Big) = -\mu\varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

bzw. $$\boxed{\left(\Delta - \mu\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{E} = \vec{0}} \quad (2.16)$$

(spezielle) Wellen-Dgl.