

## 2 Quantenphysik

---

### Lernziele

- Sie kennen die Ursprünge der Quantentheorie.
  - Sie verstehen das Postulat von Max Planck.
  - Sie können den photoelektrischen Effekt erklären und berechnen.
  - Sie können die Herleitung der Compton-Wellenlänge nachvollziehen und verstehen dessen neue Interpretation der Streuung.
  - Sie verstehen das Bohr'sche Atommodell und kennen seine drei Postulate.
  - Sie wissen was unter dem Wellen-Teilchen-Dualismus gemeint ist.
  - Sie kennen ansatzweise die Grundbausteine der Quantenmechanik.
  - Sie kennen die Unschärferelation und können sie anwenden.
  - Sie können die Herleitung der Schrödinger-Gleichung nachvollziehen.
  - Sie können die wesentlichsten Größen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden berechnen.
- 

In diesem Kapitel geht es um die Quantenphysik. Sie gehört zweifellos zu den grössten Errungenschaften der Menschheit. In unzähligen Experimenten wurde die Theorie immer wieder eindrucksvoll bestätigt, und zwar mit einer nie zuvor erreichten Genauigkeit.

Der Ursprung der Quantenphysik geht auf Max Planck<sup>1</sup> zurück und ist um 1900 zu suchen. Ironischerweise geschah dies zu einer Zeit, in der die Physiker selbst davon überzeugt waren, dass die Physik ihre Entwicklung abgeschlossen hatte, wie das folgende Zitat des Münchner Physikprofessors Philipp von Jolly zeigt: *in dieser Wissenschaft ist schon fast alles erforscht, und es sind nur noch einige unbedeutende Lücken zu schliessen.* [63]. Obwohl der Physikprofessor dies dem jungen Planck mit auf den Weg gab, liess er sich glücklicherweise nicht davon abbringen, Physik zu studieren.

In diesem Kapitel werden wir den *Ursprüngen der Quantentheorie* auf den Grund gehen, um dann das *Bohrsche Atommodell* zu studieren. Bevor wir uns der *Quantenmechanik* selbst zuwenden, gehen wir auf den *Wellen-Teilchen-Dualismus* ein. Wir schliessen dieses Kapitel mit einer ersten Anwendung, dem *Wasserstoffatom*.

### 2.1 Ursprünge der Quantenphysik

Wie bereits erwähnt, gehen die Ursprünge der Quantenphysik auf das Jahr 1900 zurück. Einige Jahre zuvor begann Max Planck im Alter von knapp 40 Jahren, sich mit dem Problem der Wärmestrahlung schwarzer Körper zu beschäftigen.



M. Planck  
(1858-1947)

Max Planck war ein bedeutender deutscher Physiker des späten 19. und frühen 20. Jahrhunderts. Er ist am bekanntesten für seine Entwicklung der Quantenmechanik und die Einführung des Planckschen Strahlungsgesetzes und die damit verbundene Quantenhypothese, welche er selbst nur als Hilfskonstruktion entfand. Planck erhielt 1918 den Nobelpreis für Physik für seine bahnbrechenden Arbeiten auf diesem Gebiet. Seine Arbeit revolutionierte das Verständnis der physikalischen Welt auf atomarer und subatomarer Ebene und legte den Grundstein für viele Entwicklungen in der modernen Physik.

Im Gegensatz zur Relativitätstheorie, die im Wesentlichen auf einer Person beruht, ist die Quantenphysik das Produkt vieler Arbeiten verschiedener Physiker dieser Zeit.

Die Deutung des bereits seit einigen Jahren bekannten Phänomens des photoelektrischen Effekts geht auf Albert Einstein zurück und stammt aus dem Jahr 1905, also aus seinem Annus mirabilis (Wunderjahr). Damit war erstmals bewiesen, dass sich Licht nicht nur wie eine Welle verhält sondern auch als Teilchen interpretiert werden muss. Es dauerte fast 20 Jahre bis Arthur Compton 1922 einen weiteren Nachweis erbrachte, dass Licht

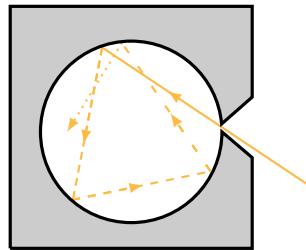
<sup>1</sup>Max Karl Ernst Ludwig Planck (\* 23. April 1858 in Kiel, Herzogtum Holstein; † 4. Oktober 1947 in Göttingen) war ein deutscher Physiker auf dem Gebiet der theoretischen Physik.

sich auch als Teilchen verhalten kann. In den folgenden drei Abschnitten wird nacheinander auf jede dieser bahnbrechenden Entdeckungen eingegangen.

### 2.1.1 Schwarzkörperstrahlung

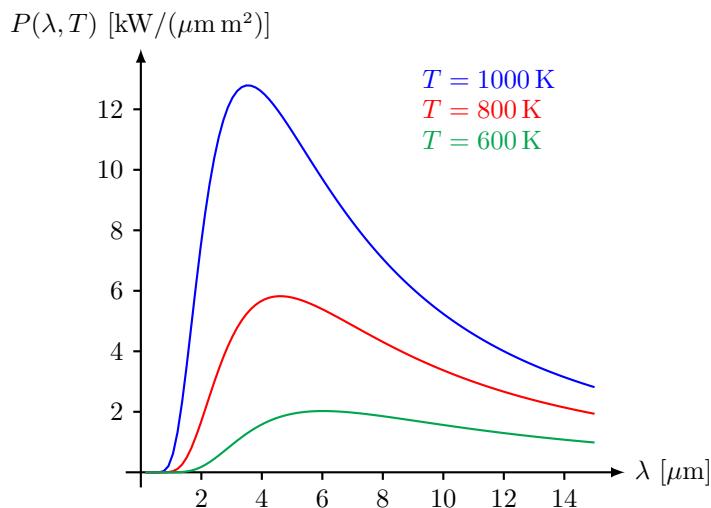
Bevor wir uns mit dem Problem und anschliessend mit Plancks Lösung beschäftigen, müssen wir den Begriff Schwarzkörperstrahlung etwas klären, da er im Grunde sehr irreführend ist.

Ein idealer schwarzer Körper<sup>2</sup> kann durch einen gut isolierten Hohlraum mit einer kleinen Öffnung nach aussen dargestellt werden (siehe Abbildung). Die gute Isolierung sorgt dafür, dass sich die Wände und der Innenraum im thermischen Gleichgewicht befinden. Diese Strahlung, die übrigens von jedem Körper ausgeht, ist für das menschliche Auge erst ab einer Temperatur von über 600°C sichtbar.



Durch diese Konstruktion kann Licht zwar einfallen und im Hohlkörper eingefangen und fast vollständig absorbiert werden, aber nicht oder nur sehr selten austreten. Die Strahlung, die austritt, nennt man Schwarzkörperstrahlung oder auch Hohlraumstrahlung. Warum ist das so interessant? Die Antwort liegt nicht auf der Hand. Man kann in vielen Fällen zeigen, dass dieses Schwarzkörpermodell auch auf beliebige Körper, wie z.B. Sterne, angewendet werden kann. Unsere Sonne zum Beispiel strahlt wie ein Hohlraum mit einer Temperatur von etwa 5780 K.

Schon vor Planck haben sich Physiker mit dieser Hohlraumstrahlung beschäftigt und sie in vielen Experimenten gemessen. Dabei ergaben sich die folgenden Kurven für die abgestrahlte spezifische Leistung. Hier nun drei Kurven für die Temperaturen 600 K, 800 K und 1000 K in Abhängigkeit von der Wellenlänge der emittierten Strahlung.



Das Problem war, dass keine Theorie diese Kurve vorhersagen konnte. Es gab mehrere klassische Gesetze, die Teile der Kurve oder Abhängigkeiten vorhersagen konnten. Aber alle versagten, wenn es darum ging, die gesamte Kurve wiederzugeben.

Im Bereich für grosse Wellenlängen (resp. kleinen Frequenzen) haben John Rayleigh<sup>3</sup> und James Jeans<sup>4</sup> das

<sup>2</sup>Lassen Sie sich von dem Begriff schwarz nicht irritieren. Damit ist nur die Eigenschaft von Schwarz gemeint, Licht zu absorbieren und nicht zu reflektieren. Dies kann aber auch anders erreicht werden und ist nicht an die Farbe Schwarz gebunden.

<sup>3</sup>John William Strutt, 3. Baron Rayleigh (12. November 1842 in Langford Grove, Maldon, England - 30. Juni 1919 in Terlings Place bei Witham, England), war ein englischer Physiker. Er erhielt 1904 den Nobelpreis für Physik für die Bestimmung der Dichte der wichtigsten Gase und für die Entdeckung des Argons. Er erklärte die blaue Farbe des Himmels anhand der Streuung des Lichtes an kleinen Partikeln (Rayleigh-Streuung).

<sup>4</sup>Sir James Hopwood Jeans (11. September 1877 in Ormskirk, Lancashire - 16. September 1946 in Dorking, Surrey) war ein englischer Physiker, Astronom und Mathematiker.

Abstrahlungsverhalten von Schwarzen Körper beschrieben, wobei die erste Beschreibung von Rayleigh veröffentlicht und erst später durch Jeans leicht korrigiert wurde. Dieses Gesetz wird heute *Rayleigh-Jeans-Gesetz* genannt. Es lautet:

**Ges. 1:** (*Rayleigh-Jeans-Gesetz*) Das Rayleigh-Jeans-Gesetz beschreibt die Abhängigkeit der spezifische Leistung  $P(\lambda, T)$  eines Schwarzen Körpers von der Lichtwellenlänge  $\lambda$  bei einer gegebenen Temperatur  $T$  im Rahmen der klassischen Elektrodynamik. Es gilt:

$$P(\lambda, T) = \frac{2ck_B T}{\lambda^4}.$$

Man erkennt, dass für grosse Wellenlängen die  $\lambda^4$ -Abhängigkeit die Funktion bestimmt, und man erhält den schnell abfallenden Verlauf der Funktion. Wollte man dagegen die gesamte abgestrahlte Leistung bestimmen, so müsste man diese Funktion für alle Wellenlängen aufaddieren, also auch für  $\lambda$  gegen Null, was unweigerlich zu einer Katastrophe (Wert geht gegen Unendlich) führt, der sogenannten *Ultraviolettkatastrophe*.

Wilhelm Wien<sup>5</sup> erkannte, dass die Maxima der verschiedenen Verteilungen einem sehr einfachen Gesetz gehorchen, das heute nach ihm benannt ist und *Wiensches Verschiebungsgesetz* heisst.

**Ges. 2:** (*Wiensches Verschiebungsgesetz*) Das Wiensche Verschiebungsgesetz gibt an, bei welcher Wellenlänge  $\lambda_{\max}$  ein schwarzer Körper mit der Temperatur  $T$  die grösste Strahlungsleistung abgibt. Es gilt:

$$\lambda_{\max} = \frac{2.898 \text{ mm K}}{T}.$$

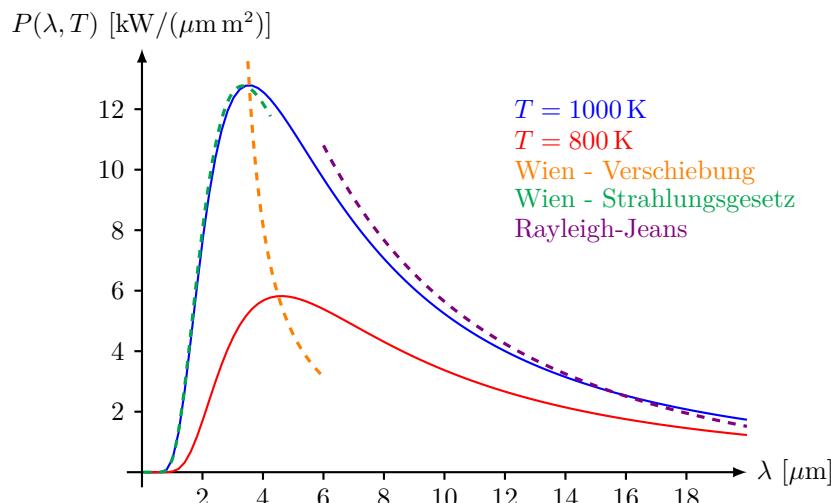
Kombiniert man diese beiden Ergebnisse, so erhält man zwar eine bessere Beschreibung der Kurve, aber noch lange nicht das gewünschte Ergebnis. Darüber hinaus konnte Wien 1896 eine weitere Näherung für die Strahlungsleistung angeben, die bei kurzen Wellenlängen gut mit den Daten übereinstimmte, bei grossen Wellenlängen jedoch versagte.

**Ges. 3:** (*Wiensches Strahlungsgesetz*) Das Wiensche Strahlungsgesetz beschreibt die Abhängigkeit der spezifischen Leistung  $P(\lambda, T)$  eines Schwarzen Körpers von der Lichtwellenlänge  $\lambda$  bei einer gegebenen Temperatur  $T$  im Rahmen der klassischen Elektrodynamik. Es gilt:

$$P(\lambda, T) = \frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{K_2}{\lambda T}}},$$

wobei  $K_1$  die 1. und  $K_2$  die 2. Strahlungskonstante sind.

Diese Konstanten waren Wien noch nicht bekannt und konnten daher nur zur Annäherung von Theorie und Messung verwendet werden. Diese Konstanten werden sowohl von Wien als auch später von Planck mit  $C$  und  $c$  bezeichnet, was ich aus didaktischen Gründen nicht tun möchte, da in der folgenden Herleitung auch die Lichtgeschwindigkeit mit  $c$  bezeichnet wird. In der folgenden Abbildung sind diese Näherungen dargestellt, wobei zum Vergleich auch zwei Messkurven eingezeichnet sind, und zwar für 1000 K und 800 K.



<sup>5</sup>Wilhelm Carl Werner Otto Franz Wien (13. Januar 1864 in Gaffken bei Fischhausen im Samland, Ostpreussen - 30. August 1928 in München) war ein deutscher Physiker. Er erforschte vor allem die Gesetzmäßigkeiten der Wärmestrahlung und erhielt dafür 1911 den Nobelpreis für Physik.

Man erkennt, dass das Wiener Strahlungsgesetz den gemessenen Werten bereits sehr nahe kommt, insbesondere für kleine Werte von  $\lambda$ . Für grosse Werte von  $\lambda$  nähert sich das Gesetz dem von Rayleigh-Jeans an. Plancks Aufgabe war es nun, diese beiden Funktionen zu kombinieren.

Max Planck versuchte zunächst, aus thermo- und elektrodynamischen Überlegungen eine konsistente Formel für beide Grenzwerte abzuleiten. Alle Versuche scheiterten, bis er aus purer Verzweiflung, wie er später selbst zugab, den umgekehrten Weg einschlug. Er versuchte, rein algebraisch einen Term zu finden, der sowohl die Daten gut beschrieb als auch die beiden bekannten Gesetze in den Grenzwerten enthielt. Wie er dies annähernd erreicht hat, soll nun erläutert werden.

Es sei darauf hingewiesen, dass dies zu einer Zeit geschah, in der über die Natur der Materie heftig gestritten wurde. Atome galten als theoretische Konstrukte, die bei Berechnungen halfen, aber nicht real waren. Im Grunde ging man davon aus, dass die Materie und alles, was mit ihr zusammenhängt, kontinuierlich ist. Auch Max Planck gehörte zu den Gegnern des Atomismus. Nichtsdestotrotz versuchte er eine Formel zu finden und sein Ausgangspunkt war das *Wiensche Strahlungsgesetz*:

$$P(\lambda, T) = \frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{K_2}{\lambda T}}}$$

Als erstes fiel ihm auf, dass die Temperatur im Exponenten natürlich etwas mit der inneren Energie der Materie zu tun haben musste. Im Gegensatz zum *Rayleigh-Jeans-Gesetz* trat die Temperatur ohne die Boltzmann-Konstante  $k_B$  auf. Da die Funktion mit der Konstanten  $K_2$  ohnehin eine Konstante hatte, konnte er dies schnell ändern. Das war die erste Verbesserung:

$$P(\lambda, T) = \frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{K'_2}{\lambda k_B T}}},$$

wobei  $K_2 = \frac{K'_2}{k_B}$  ist. Weiter musste in  $K'_2$  auch die Lichtgeschwindigkeit stecken, da so, dieser Term durch die Substitution mit der Frequenz  $f = c/\lambda$  eine reine Frequenzabhängigkeit bekam<sup>6</sup>. Er substituierte also  $K'_2 = hc$ , wobei er  $h$  Hilfsgrösse nannte, womit wir auch wieder bei der ursprünglichen Notation sind. Planck erhielt also den Term:

$$P(\lambda, T) = \frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}}}.$$

Für grosse  $\lambda$  sollte sich dieser Term dem Rayleigh-Jeans Gesetz nähern, was er aber noch nicht tat. Die Exponentialfunktion lässt sich für einen kleinen Exponenten annähern<sup>7</sup> durch:

$$e^x \approx 1 + x.$$

Für grosse  $\lambda$  ist der Term  $\frac{hc}{\lambda k_B T}$  klein, womit gilt:

$$e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} \approx 1 + \frac{hc}{\lambda k_B T}.$$

Da der Term klein ist, konnte er die 1 nicht einfach vernachlässigen. Aber der zweite Streich brachte schliesslich die Lösung. Im Nenner subtrahierte er die 1 von der Exponentialfunktion, was für die Wien-Näherung keine Auswirkung hatte, da diese für kleine  $\lambda$  gilt und die Exponentialfunktion somit riesig ist. Für die Rayleigh-Jeans-Näherung wurde erst durch diesen Trick eine Approximation möglich. Er schrieb daher:

$$P(\lambda, T) = \frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}.$$

Die Näherung ( $\lambda \rightarrow \infty$ ) dieser Funktion konnte nun mit dem Rayleigh-Jeans Gesetz verglichen werden:

$$\frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \approx \frac{K_1}{\lambda^5} \cdot \frac{\lambda k_B T}{hc} = \frac{K_1}{\lambda^4} \cdot \frac{k_B T}{hc} \equiv \frac{2ck_B T}{\lambda^4} \Rightarrow K_1 = 2hc^2.$$

Die grösste Überraschung war wohl, dass dieser aus der Verzweiflung heraus gefundene Term die Messungen genauer vorhersagen konnte als alles, was man vorher gemacht hatte. Da der Exponent ein Verhältnis von Energien darstellt (thermisch:  $E_{\text{term}} = k_B T$  und elektromagnetisch:  $E_{\text{em}} = \frac{hc}{\lambda} = hf$ ), konnte er daraus im Laufe des Jahres 1900 die beiden folgenden Hypothesen formulieren:

<sup>6</sup>Dieses Argument ist offensichtlich nicht ganz stringent. Dennoch gab ihm das Resultat recht. Vermutlich liess er sich einerseits vom Rayleigh-Jeans Gesetz inspirieren und andererseits aber fehlte nur noch die Lichtgeschwindigkeit in diesem Exponenten und damit waren die wichtigsten Konstanten der Elektro- und Thermodynamik vertreten.

<sup>7</sup>Diese Näherung erhält man, wenn man für die Exponentialfunktion eine Taylor-Entwicklung aufschreibt und diese nach der 1. Ordnung abbriicht.

1. Von den Wänden des Hohlraumes kann Energie nicht in beliebigen Mengen absorbiert und emittiert werden, sondern nur in Form ganz bestimmter, kleiner diskreter Energie-Portionen, sogenannte *Energiequanten*.
2. Die Energie  $E$  von einem solchen Quantum ist proportional zur Frequenz  $f$  der dabei absorbierten oder emittierten elektromagnetischen Strahlung, d. h.

$$E = hf,$$

wobei  $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34}$  Js der Proportionalitätsfaktor ist.

Planck selbst hat den Faktor "Hilfsgrösse" genannt. Heute wird es ihm zu Ehren als *Plancksches Wirkungsquantum* bezeichnet. Verbreiteter ist jedoch die äquivalente Formel:

$$E = \hbar\omega,$$

wobei  $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.05 \cdot 10^{-34}$  Js ist. Damit lautet das Plancksche Strahlungsgesetz:

**Ges. 4:** (*Plancksches Strahlungsgesetz*) Das Plancksche Strahlungsgesetz beschreibt die abgestrahlte spezifische Leistung  $P(\lambda, T)$  eines Schwarzen Körpers als Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  für eine bestimmte Temperatur  $T$ , d. h.

$$P(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{k_B T \lambda}} - 1}.$$

Nun versuchen wir die Hypothese von Planck zu verstehen. Dazu schauen wir uns den folgenden Kurzfilm von *minutephysics* an (vgl. Video: [Minutephysics: Max Plancks Hypothese](#)).

Damit ist dieser Abschnitt über den Ursprung der Quantenhypothese abgeschlossen. Diese Annahme, dass die Energie des Lichts quantisiert ist, genügte Einstein, um den photoelektrischen Effekt zu erklären.

### 2.1.2 Photoelektrische Effekt

Nur fünf Jahre nach Max Plancks bahnbrechendem Ansatz erklärte Albert Einstein den photoelektrischen Effekt, der mehr als 60 Jahre auf eine plausible Erklärung gewartet hatte. Im Gegensatz zu Planck, der seiner eigenen Hypothese kaum Glauben schenkte, war Einstein davon überzeugt, damit eine neue Eigenschaft des Lichts entdeckt zu haben. Planck selbst war der Meinung, dass diese Quantisierung des Lichts nur im Zusammenhang mit der Hohlraumstrahlung eine Rolle spielt und sonst keine Anwendung finde.

Bevor wir uns der Erklärung von Einsteins Effekt zuwenden, für den er 1921 den Nobelpreis für Physik erhielt und nicht, wie viele meinen, für seine Allgemeine Relativitätstheorie, wollen wir uns das Experiment dazu ansehen. Es entspricht zwar nicht dem Aufbau, der für eine quantitative Betrachtung notwendig ist, aber es hilft, den Effekt zu verstehen.

---

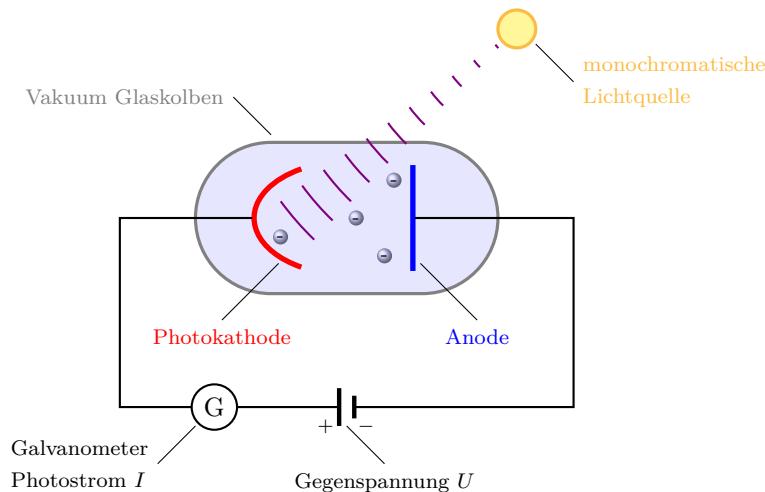
#### Exp. 1: Photo-Effekt

Die Zinkplatte wird unmittelbar vor dem Experiment mit feinem Schmiegelpapier gründlich angeschliffen. Eine dünne Schicht Zink-Zinn-Amalgam wird aufgetragen, um die Austrittsarbeit der Elektronen zu verringern (siehe quantenmechanische Erklärung). Die Platte wird an ein statisches Voltmeter angeschlossen. Einerseits wird die Zinkplatte negativ geladen (gelber Stab) und mit Licht aus der Quecksilberhochdrucklampe bestrahlt. Zum anderen wird die Zinkplatte positiv geladen (durchsichtiger Stab) und ebenfalls mit dem Licht der Quecksilberhochdrucklampe bestrahlt. Da die Lampe auch im UV-Bereich leuchtet und dieser für den Effekt verantwortlich ist, kann man diesen Anteil mit einer Glasplatte absorbieren.



Etwas überrascht stellt man fest, dass nur in einem Fall Strom fliesst, nämlich dann, wenn die Platte negativ geladen ist, mit der Quecksilberhochdrucklampe bestrahlt wird und sich keine Glasscheibe dazwischen befindet.

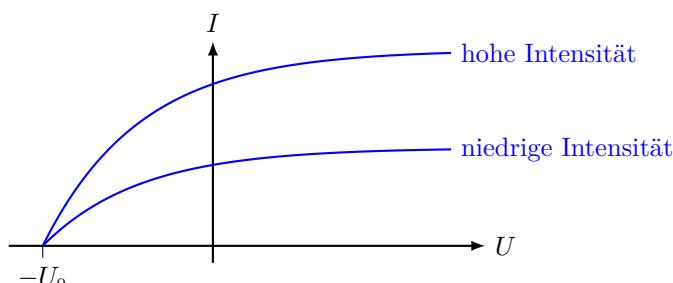
Um das Experiment etwas genauer zu erklären, betrachten wir diese schematische Darstellung einer Apparatur, die eine quantitative Messung des photoelektrischen Effekts ermöglicht.



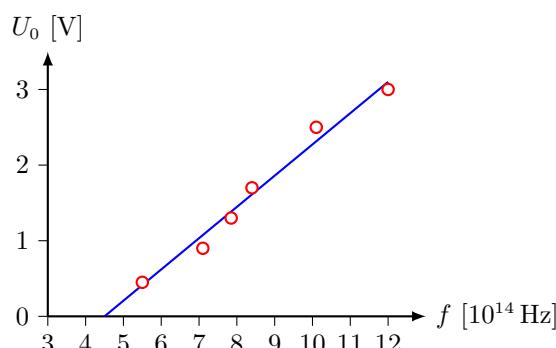
Das einfallende Licht schlägt Elektronen aus dem Metall heraus. Diese haben eine Anfangsgeschwindigkeit  $v_0$  und kommen so an der Anode an. Das Galvanometer  $G$  misst nun einen kleinen so genannten *Photostrom*  $I$ . Nun kann man aber eine Spannung  $U$  anlegen, so dass die Elektronen abgebremst werden und damit der Photostrom immer kleiner wird, bis er schliesslich bei einer Spannung  $U_0$  ganz verschwindet. Dann gilt aufgrund der Energieerhaltung, dass die kinetische Energie der Elektronen gleich der elektrischen Energie ist.

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv_0^2 = eU_0 = E_{\text{el}}.$$

Mit dieser Anordnung kann der Photostrom als Funktion der Spannung  $U$  gemessen werden, der für verschiedene Lichtintensitäten wie folgt aussieht:



Die Grafik zeigt deutlich, dass eine höhere Intensität zu einem höheren Strom führt. Das bedeutet, dass mehr Licht pro Sekunde auf die Platte trifft und somit mehr Elektronen pro Sekunde herausgeschlagen werden. Gleichzeitig kann mit dem gleichen Aufbau auch die maximale Gegenspannung  $U_0$  bei verschiedenen Frequenzen gemessen werden. Das Ergebnis ist in der folgenden Grafik dargestellt<sup>8</sup>:



<sup>8</sup>Beachten Sie, dass diese Grafik erst in den Jahren 1914 und 1916 entstand, als es R.C. Millikan gelang, dieses Experiment durchzuführen.

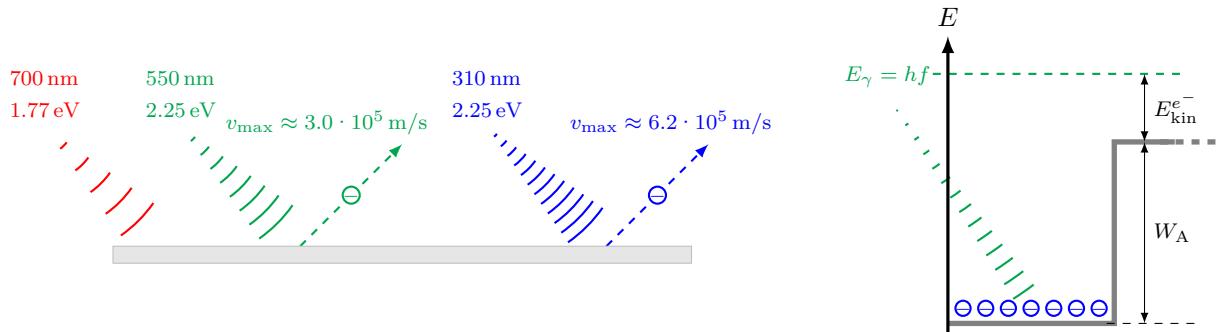
Betrachtet man beide Ergebnisse, so ergeben sich im Rahmen der klassischen Physik einige Unstimmigkeiten, die hier kurz im Detail aufgelistet werden sollen:

- Die kinetische Energie der austretenden Elektronen ist unabhängig von der Lichtintensität. Es spielt also keine Rolle, wie stark die Platte belichtet wird, solange die Frequenz des Lichts gleich ist, haben die Elektronen immer die gleiche kinetische Energie.
- Die kinetische Energie nimmt linear mit der Frequenz zu. Es gibt keinen klassischen Grund, warum sich die kinetische Energie der Elektronen ändern sollte, wenn sich die Farbe des Lichts ändert.
- Die minimale Frequenz, bei der Elektronen gerade noch austreten, hängt nur vom Material ab. (Aus den Daten nicht ersichtlich).

Wollte man Einsteins Leistung, die er übrigens bereits in seiner Dissertation erbrachte, herabsetzen, so könnte man sagen, dass er lediglich die Plancksche Hypothese auf dieses Problem anwandte, was wir gleich tun werden. Man darf jedoch nicht vergessen, dass diese Hypothese erst fünf Jahre alt war, was für die damalige Zeit sehr jung war, und dass fast die gesamte physikalische Gemeinschaft davon überzeugt war, dass es sich um ein reines Hohlraumstrahlungssphänomen handelte. Niemand glaubte an die diskrete Eigenschaft der Natur, man war überzeugt, dass alles kontinuierlich sei. Einer der wenigen Physiker, die davon überzeugt waren, dass die Materie aus Atomen besteht und dass diese real sind, war Ludwig Boltzmann. Er wurde deshalb als Spinner abgestempelt und beging nur ein Jahr nach der Veröffentlichung von Einsteins Deutung des Photoeffekts Selbstmord, ohne - wahrscheinlich - davon erfahren zu haben.

Doch nun zur Lösung des Problems mit der Quantenhypothese. Die Quantenhypothese besagt, dass die Energie  $E$  von monochromatischem Licht, also Licht einer bestimmten Frequenz  $f$ , durch die Beziehung  $E = hf$  gegeben ist. Das bedeutet, dass jedes Elektron, das die Oberfläche verlässt, unabhängig von der Intensität des Lichts die gleiche Menge an Energie erhält, die kinetische Energie der Elektronen also von der Intensität unabhängig ist. Sie hängt nur von der Energie des Lichtteilchens - des so genannten *Photons* - und von der *Austrittsarbeit*  $W_A$  ab, also der Arbeit, die notwendig ist, um das Elektron von der Metallocberfläche zu lösen.

Die beiden folgenden Bilder zeigen links den Vorgang schematisch für verschiedene Lichtarten und rechts den Effekt im Energiediagramm aus der Sicht des Atoms.



Aus dieser zweiten Darstellung lässt sich unmittelbar Einsteins photoelektrische Gleichung ableiten. Sie gilt:

**Ges. 5:** (Einstiens photoelektrische Gleichung) Die maximale kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  eines Photoelektrons, welches durch Licht der Frequenz  $f$  von einem Festkörper mit der Austrittsarbeit  $W_A$  gelöst wird, ist

$$E_{\text{kin}} = hf - W_A.$$

Wie oben gezeigt, entspricht im Experiment die maximale kinetische Energie der elektrischen Energie  $qU_0$  und man erhält

$$E_{\text{kin}} = eU_0 = hf - W_A,$$

wobei  $U_0$  die Bremsspannung ist. Löst man diese Beziehung nach der Spannung auf, erhält man:

$$U_0(f) = \frac{h}{e} \cdot f - \frac{W_A}{e},$$

was einer linearen Funktion entspricht. Die Steigung ist also für alle Materialien gleich ( $\frac{h}{e}$ ), es ändert sich nur der Achsenabschnitt ( $-\frac{W_A}{e}$ ). Erst rund zehn Jahre nach Einsteins Vorhersage gelang es Millikan, das Experiment durchzuführen und die Gleichung zu bestätigen. Damit konnte er auch die Steigung und damit die Plancksche Konstante auf andere Weise bestimmen. Dies war die erste Bestätigung der Quantenhypothese, die nicht von der Hohlraumstrahlung abhing.

Betrachten wir ein einfaches Beispiel zur Einsteinschen Gleichung des photoelektrischen Effekts:

Bsp. i.

Die Grenzwellenlnge (maximale Wellenlnge, bei der gerade noch Elektronen die Oberfche verlassen) fr Kalium liegt bei 564 nm. a) Wie gross ist die Austrittsarbeit  $W_A$ ? b) Wie gross ist die maximale Bremsspannung  $U_0$  fr einfallendes Licht der Wellenlnge 440 nm? Lsg: a)  $W_A \approx 2.2 \text{ eV}$ , b)  $U_0 \approx -0.6 \text{ V}$

Lsg: a)  $W_A \approx 2.2 \text{ eV}$ , b)  $U_0 \approx -0.6 \text{ V}$

## Lösung:



Zeigen Sie, dass  $hc \approx 1.24 \text{ keV} \cdot \text{nm}$  entspricht, wobei  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit sind.

Bevor wir diesen Abschnitt abschliessen, hier noch ein etwas aufwändigeres Beispiel.

## Bsp. ii.

Eine Kaliumphotozelle (Austrittsarbeit  $2.25 \text{ eV}$ , Grenzfrequenz  $5.44 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ ) wird zum Aufladen eines Kondensators der Kapazität  $10 \text{ nF}$  verwendet. Die Bestrahlung der Fotokathode mit Licht (656 nm) bewirkt keine Aufladung des Kondensators, auch wenn die Bestrahlungsstärke erhöht wird. Wird dagegen Licht der Wellenlänge 434 nm verwendet, lädt sich der Kondensator merklich auf.

a) Erkläre diesen Sachverhalt. Im folgenden wird Licht der Wellenlänge 434 nm verwendet. b) Berechne die maximal erreichbare Ladung des Kondensators. c) Bei einer auftreffenden Lichtleistung von 5.0 mW ist die anfängliche Ladestromstärke  $2.1 \cdot 10^{-7} \text{ A}$ . Berechne damit das Verhältnis aus der Zahl  $N_{\text{Ph}}$  der pro Zeiteinheit auf die Kathode auftreffenden Photonen und die Zahl  $N_e$  der anfänglich pro Zeiteinheit aus der Kathode ausgelösten Elektronen.

Lsg: a) —, b)  $Q \approx 6.14 \cdot 10^{-9} \text{ C}$ , c)  $\frac{\dot{N}_{\gamma}}{\dot{N}_e} \approx 8.3 \cdot 10^3$

Lsg: a) -, b)  $Q \approx 6.14 \cdot 10^{-9} \text{ C}$ , c)  $\frac{\dot{N}_\gamma}{N_\text{e}} \approx 8.3 \cdot 10^3$

## Lösung:

Die nächste Bestätigung der Quantenhypothese erfolgte 1921 durch Compton. Damit ist die Einführung der Quantentheorie abgeschlossen.

### 2.1.3 Compton-Streuung

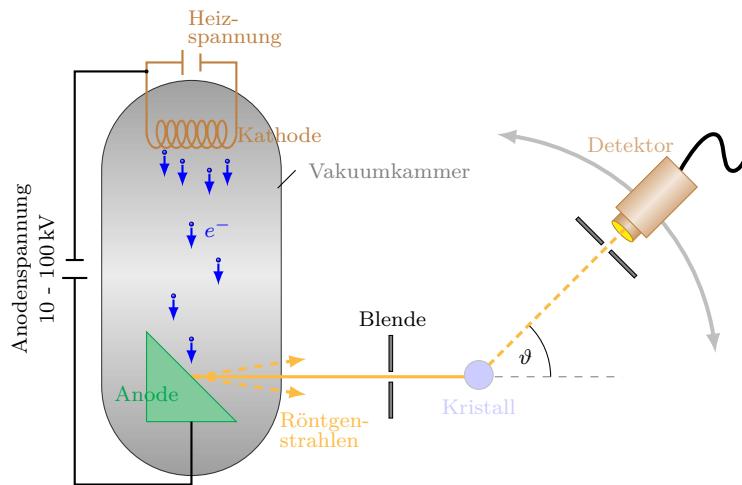
Bevor Arthur Compton<sup>9</sup> den nach ihm benannten Effekt entdeckte, war der äussere Photoeffekt der einzige Nachweis für die Teilchennatur des Lichts.



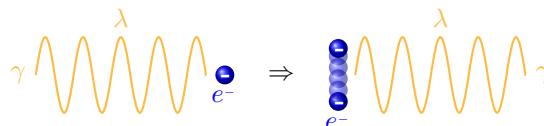
A. Compton  
(1892-1962)

Arthur Holly Compton war ein herausragender amerikanischer Physiker des 20. Jahrhunderts, der für seine Arbeiten auf dem Gebiet der Quantenmechanik und der Kernphysik bekannt ist. Die Entdeckung des Compton-Effekts lieferte den überzeugenden experimentellen Beweis für die Wellen-Teilchen-Dualität des Lichts und trug wesentlich zum Verständnis der Quantennatur von Licht bei. Comptons Arbeit ebnete den Weg für weitere Untersuchungen im Bereich der Quantenphysik und hatte auch wichtige Anwendungen in der Kernphysik und der Medizin. Sein Beitrag zur Wissenschaft ist von bleibender Bedeutung und sein Name bleibt eng mit der Entdeckung des Compton-Effekts verbunden.

Bei Streuversuchen mit hochenergetischer Röntgenstrahlung an Graphit konnte er 1922 nachweisen, dass die Wellenlänge der gestreuten Strahlung grösser ist als die der einfallenden Strahlung. Schauen wir uns mal den experimentellen Aufbau von Compton etwas genauer an:

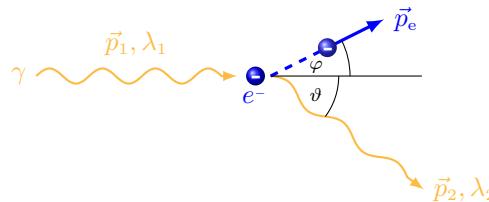


Bevor wir uns dem Compton-Effekt auf der theoretischen Ebene zuwenden, wollen wir kurz erklären, warum dieses Ergebnis aus klassischer Sicht überraschend war. Betrachten wir ein freies Elektron und einfallendes monochromatisches Licht. Damit das Licht ein Elektron anregen kann, muss es hochenergetisch sein, also im Röntgenbereich liegen.



Wie die Abbildung zeigt, wird das Elektron durch die Strahlung zum Schwingen angeregt. Dies führt nach der Elektrodynamik dazu, dass das Elektron wieder Licht mit der gleichen Frequenz aussendet. Die gemessene Strahlung müsste also die gleiche Wellenlänge haben wie die einfallende Strahlung. Wie bereits erwähnt, hat Compton eine Wellenlängenverschiebung gemessen.

Comptons Interpretation dieser Wellenlängenänderung beruht auf der Quantenhypothese und dem Teilchencharakter des Lichts, der sich aus dem Photoeffekt ergibt. Er schloss daraus, dass es sich um einen elastischen Stoß zwischen zwei Teilchen, dem Photon ( $\gamma$ ) und dem Elektron ( $e^-$ ) handelt. Ein solcher Stoß würde wie folgt aussehen



<sup>9</sup>Arthur Holly Compton (10. September 1892 in Wooster, Ohio - 15. März 1962 in Berkeley, Kalifornien) war ein US-amerikanischer Physiker. Compton erhielt 1927 zusammen mit Charles T. R. Wilson den Physiknobelpreis für den nach ihm benannten Effekt.

Nun soll in einer etwas längeren relativistischen Rechnung die Änderung der Wellenlänge berechnet werden. Dazu müssen wir zunächst den Impuls des Photons bestimmen. Dazu verwenden wir die Energie-Impuls-Beziehung und erhalten:

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \Rightarrow E = pc,$$

da  $m = 0$  ist für ein Photon. Mit der Quantenhypothese  $E = hf$  erhalten wir schliesslich für den Impuls:

$$hf = pc \Rightarrow p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Somit gilt:  $p_1 = \frac{h}{\lambda_1}$  und  $p_2 = \frac{h}{\lambda_2}$ . Nun können wir uns der relativistischen Mechanik dieses Prozesses zu wenden. Zuerst betrachten wir den Impulserhaltungssatz und erhalten:

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_e + \vec{p}_2 \Leftrightarrow \vec{p}_e = \vec{p}_1 - \vec{p}_2.$$

Durch Quadrieren der zweiten Beziehung erhalten wir:

$$\begin{aligned} p_e^2 &= (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 \\ &= p_1^2 + p_2^2 - 2\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2 \\ &= p_1^2 + p_2^2 - 2p_1 p_2 \cos \vartheta. \end{aligned}$$

Nun betrachten wir die Energieerhaltung und erhalten:

$$E_1 + E_e = E_2 + E'_e.$$

Wie oben bereits gezeigt, erhalten wir für die Energie der Photonen  $E = pc$ . Für die Energie des Elektrons verschwindet der Massenterm nicht und wir erhalten  $E'_e = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_e c)^2}$ . Vorher hat das Elektron nur die Ruheenergie  $E_e = mc^2$ . Damit erhalten wir:

$$p_1 c + mc^2 = p_2 c + \sqrt{(mc^2)^2 + (p_e c)^2}.$$

Um diese Gleichung weiter zu vereinfachen, müssen wir die Wurzel auf der rechten Seite isolieren, dies geschieht wie folgt:

$$(p_1 - p_2)c + mc^2 = \sqrt{(mc^2)^2 + (p_e c)^2}.$$

Durch Quadrieren dieser Gleichung erhalten wir, nachdem wir  $m^2 c^4$  subtrahiert haben:

$$\begin{aligned} (p_1 - p_2)^2 c^2 + 2(p_1 - p_2)cmc^2 &= p_e^2 c^2 \\ p_1^2 + p_2^2 - 2p_1 p_2 + 2(p_1 - p_2)cm &= p_e^2 \end{aligned}$$

Nun setzen wir aus der Impulserhaltung den Elektronimpuls  $p_e$  ein und erhalten:

$$-p_1 p_2 + (p_1 - p_2)cm = -p_1 p_2 \cos \vartheta.$$

Dies lösen wir nach der Differenz der Impulse auf und bekommen:

$$(p_1 - p_2)cm = p_1 p_2 (1 - \cos \vartheta)$$

Nun dividieren wir durch  $p_1 p_2$ :

$$\frac{1}{p_2} - \frac{1}{p_1} = \frac{1}{mc} (1 - \cos \vartheta)$$

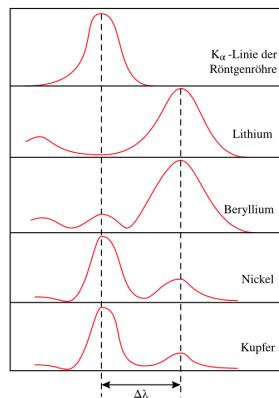
und setzen für  $p_i = \frac{h}{\lambda_i}$  ein:

$$\frac{\lambda_2}{h} - \frac{\lambda_1}{h} = \frac{1}{mc} (1 - \cos \vartheta) \Rightarrow \lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{mc} (1 - \cos \vartheta)$$

Woraus wir schliesslich die Änderung der Wellenlänge im Compton-Effekt erhalten:

$$\boxed{\lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_C (1 - \cos \vartheta)},$$

wobei  $\lambda_C = \frac{h}{mc} \approx 2.43 \text{ pm}$  die Compton-Wellenlänge ist. Beachten Sie, dass die Compton-Wellenlänge nur von Naturkonstanten abhängig ist und damit ist die Änderung der Wellenlänge unabhängig von der Wellenlänge des einfallenden Photons und des Materials, wie das folgende Bild aus [25] zeigt:



Auf dem Bild sind Spektren der Streustrahlung unter konstanter Winkelweite, aber für unterschiedliche Materialien des Streukörpers dargestellt. Man sieht sehr deutlich, dass die Wellenlängenänderung nicht vom Material abhängt, was der Vorhersage entspricht. Nach dieser etwas langen und nicht ganz einfachen Herleitung soll an einem eher einfachen Beispiel der Lohn dafür geerntet werden.

### Bsp. iii.

Berechnen Sie die prozentuale Änderung der Wellenlänge bei Compton-Streuung von 20 keV Photonen in einem Winkel von  $60^\circ$ .  
 Lsg:  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 1.97\%$

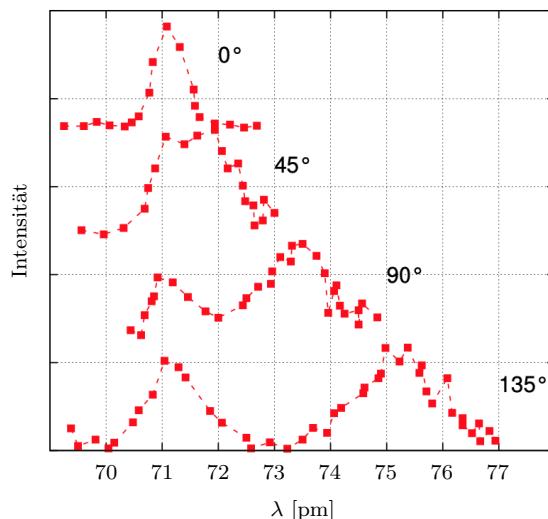
$$\text{Lsg: } \frac{\Delta\lambda}{\lambda_1} \approx 1.97\%$$

## Lösung:

Das folgende Beispiel sollte ein wenig an echte wissenschaftliche Tatigkeit erinnern. So muss sich Compton wohl gefuhlt haben, als er seine Messungen mit seinen Berechnungen verglich. Machen Sie es ihm nach!

Bsp. iv.

Bestimmen Sie die Wellenlängenverschiebung  $\Delta\lambda$  für die besonderen Streuwinkel  $\vartheta = 0^\circ$ ,  $\vartheta = 45^\circ$ ,  $\vartheta = 90^\circ$  und  $\vartheta = 135^\circ$ !



Überprüfen Sie Ihre Ergebnisse mit der angepassten Messung von Compton aus dem Jahr 1923, veröffentlicht in [64]. Lsg: –

## Lösung:

Damit schliessen wir dieses Kapitel über die Ursprünge der Quantentheorie ab und wenden uns dem Bohrschen Atommodell zu.

## 2.2 Bohrsches Atommodell

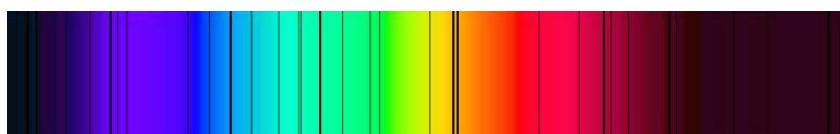
Auch wenn das Bohrsche Atommodell vor dem Compton-Effekt erarbeitet wurde, gehört es nicht mehr so richtig zu den Anfängen der Quantenphysik. Denn Niels Bohr<sup>10</sup> hat bewusst versucht mit den neuen Erkenntnissen von Planck und Einstein die vielen Unklarheiten in der Struktur der Atome zu verstehen.



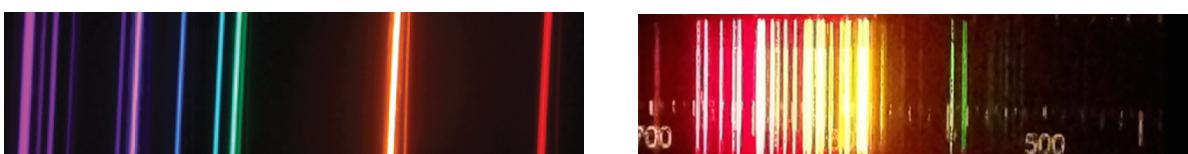
Niels Bohr war ein herausragender dänischer Physiker des 20. Jahrhunderts, der für seine grundlegenden Beiträge zur Atomphysik und Quantenmechanik bekannt ist. Er war eine Schlüsselfigur in der Revolutionierung des physikalischen Verständnisses der Atomstruktur. Neben seinen Beiträgen zur Atomphysik spielte Bohr auch eine wichtige Rolle bei der Entwicklung des Konzepts der Komplementarität in der Quantenmechanik und war einer der Gründerväter des Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik. Für seine herausragenden Leistungen erhielt Niels Bohr 1922 den Nobelpreis für Physik. Seine Arbeit legte die Grundlage für die moderne Atom- und Quantenphysik und hatte einen tiefgreifenden Einfluss auf viele Bereiche der Physik und darüber hinaus.

### 2.2.1 Ausgangslage

Bohrs erste bemerkenswerte Leistung war wohl die Erkenntnis, dass das Licht, das Atome aussenden, etwas über ihren Aufbau aussagt. Deshalb liess er unzählige Spektren verschiedener Atome untersuchen. Das Interessante an Spektren sind die so genannten *Absorptions- und Emissionslinien*. Im Bild aus [65] sind die Absorptionslinien der Sonne als schwarze Linien zu sehen, die bereits von Joseph von Fraunhofer 1814 entdeckt wurden.



Im nächsten Bild sehen Sie die Emissionslinien von einem Helium-Atom (links) und von einem Neon-Atom (rechts).



Man erkennt bereits, dass die Emissionslinien des Neons viel dichter sind als die des Heliums. Bohr erkannte, dass dies etwas mit der Verteilung der Elektronen im Atom zu tun haben musste. Experimentell waren zu dieser Zeit zwei Formeln bekannt, die die Emissionslinien des Wasserstoffs vorhersagen konnten. Beide wurden jedoch aus empirischen Daten abgeleitet und konnten nicht aus der Theorie hergeleitet werden. Die erste war die Balmer-Reihe, die auf den Lehrer Johann Balmer<sup>11</sup> zurückgeht und 1884 aufgestellt wurde. Sie verknüpft die Wellenlänge  $\lambda_B$  der Emissionslinien mit natürlichen Zahlen, also:

$$\lambda_B = 364.5 \text{ nm} \cdot \frac{n^2}{n^2 - 2^2} \quad \text{mit} \quad n = 3, 4, \dots$$

<sup>10</sup>Niels Henrik David Bohr (7. Oktober 1885 in Kopenhagen - 18. November 1962 ebenda) war ein dänischer Physiker.

<sup>11</sup>Johann Jakob Balmer (1. Mai 1825 in Lausen, Kanton Basel-Landschaft - 12. März 1898 in Basel) war ein Schweizer Mathematiker und Physiker. Mit der Balmer-Serie lieferte er eine wichtige Formel zur Spektroskopie.

Mit dieser Formel konnte man einige der Linien im Wasserstoffspektrum berechnen, jedoch nicht alle. Vier Jahre später verallgemeinerte Johannes Rydberg<sup>12</sup> die Balmer Formel und konnte dadurch mehr Linien vorhersagen. Heute nennen wir diese Formel Rydberg-Ritz-Formel, da sie durch den Schweizer Mathematiker Walter Ritz<sup>13</sup> noch etwas erweitert wurde. Sie lautet:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad \text{mit } n_1 = 1, 2, \dots \quad n_2 \geq n_1 + 1,$$

wobei  $R_\infty \approx 10.97 \text{ } (\mu\text{m})^{-1}$  die Rydberg-Konstante ist.

Damit konnte Rydberg zum ersten Mal Linien vorhersagen, die noch nicht bekannt waren. Als Theodore Lyman<sup>14</sup> 1906 eine neue Serie für  $n_1 = 1$  entdeckte, konnte Rydbergs Formel bestätigt werden. In den folgenden Jahren wurden weitere Reihen entdeckt.

Name	Jahr	$n_1$	$n_2$	Spektralbereich
Lyman-Serie	1906	1	2, 3, ...	Vakuum-UV (121 nm → 91 nm)
Balmer-Serie	1884	2	3, 4, ...	rot, blaugrün, 4× violett, naher UV → 365 nm
Paschen-Serie	1908	3	4, 5, ...	IR-A (1875 nm → 820 nm)
Brackett-Serie	1922	4	5, 6, ...	IR-B (4050 nm → 1460 nm)
Pfund-Serie	1924	5	6, 7, ...	IR-B (7457 nm → 2280 nm)

## 2.2.2 Bohrsche Postulate

Obwohl die Rydberg-Ritz-Formel zu vielen experimentellen Ergebnissen geführt hatte, blieb der Makel, dass die klassische Physik sie nicht herleiten konnte. Bohr hatte nun das Ziel, diesen Mangel zu beheben und damit auch das klassische Atommodell abzulösen, das bekanntlich nicht stabil sein kann. Daraus ergeben sich seine drei Postulate, die er 1913 aufstellt:

**Postulat 1:** (*Elektronbahnen*) Das Elektron bewegt sich im Atom auf diskreten Bahnen mit Energie  $E_n$ .

**Postulat 2:** (*Elektronbewegung*) Die Bewegung des Elektrons erfolgt strahlungslos. Beim Übergang des Elektrons von einem Zustand  $E_1$  zu einem Zustand  $E_2$  wird ein Photon der Frequenz  $f$  emittiert ( $E_2 < E_1$ ) oder absorbiert ( $E_2 > E_1$ ), es gilt:

$$f = \frac{|E_1 - E_2|}{h}.$$

**Postulat 3:** (*Drehimpuls*) Der Drehimpuls  $L$  eines Elektrons in einem stationären Zustand nimmt nur diskrete Werte an. Es gilt:

$$L = \frac{n\hbar}{2\pi} = n\hbar,$$

wobei  $n = 1, 2, \dots$  ist.

Aus diesen drei Postulaten leitet Bohr die Rydberg-Ritz-Formel ab. Das Problem verlagert sich nun auf die Postulate. Es wird aber später gelöst. Man erkennt an den Postulaten, dass sie wohl lösungsorientiert entstanden sind. Das erste Postulat löst das Problem des instabilen Atoms. Das Elektron kann nicht auf einer Spirale in den Kern fallen, weil es seine diskrete Bahn nicht verlassen kann. Das zweite Postulat verwendet die Plancksche Hypothese und wendet sie auf Übergänge an, wodurch auch die diskreten Emissionsspektren erklärt werden können. Das dritte Postulat benötigt Bohr noch, um die Rydberg-Ritz-Formel abzuleiten. Er formt die Rydberg-Ritz-Formel sogar rückwärts um, bis er auf die Beziehung für den Drehimpuls kommt.<sup>15</sup>

Mit Hilfe dieser Postulate soll nun die Rydberg-Ritz-Formel hergeleitet werden. Betrachten wir dazu das Wasserstoffatom. Die Energie des Elektrons setzt sich aus der kinetischen und der potentiellen Energie zusammen,

<sup>12</sup>Johannes Robert Rydberg (8. November 1854 in Halmstad - 28. Dezember 1919 in Lund) auch bekannt als Janne Rydberg, war ein schwedischer Physiker und ist hauptsächlich bekannt für die Aufstellung der Rydberg-Formel. Sie gibt die Wellenlänge von elektromagnetischer Strahlung an, die ein Elektron in einem Atom beim Übergang zwischen zwei Energieniveaus emittiert.

<sup>13</sup>Walter Ritz (oder Walther Ritz, 22. Februar 1878 in Sitten - 7. Juli 1909 in Göttingen) war ein Schweizer Mathematiker und Physiker.

<sup>14</sup>Theodore Lyman (23. November 1874 in Boston, Massachusetts - 11. Oktober 1954 in Cambridge, Massachusetts) war ein amerikanischer Physiker.

<sup>15</sup>Auch wenn sich Wissenschaftshistoriker über die Formulierung dieser Aussagen uneinig sind, findet man in manchen Darstellungen anstelle des dritten Quantisierungspostulats das sogenannte Korrespondenzprinzip, das in einigen Ansätzen ebenfalls zur Quantisierung des Drehimpulses führt.

es gilt

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r},$$

wobei  $r$  der Abstand des Elektrons zum Kern,  $v$  seine Geschwindigkeit,  $m$  seine Masse und  $e$  die Elementarladung sind. Mithilfe der klassischen Kreisbahn des Elektrons, kann der kinetische Term umgeformt werden, es gilt:

$$F_{\text{res}} = F_C = maz \Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r} \Rightarrow \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}.$$

Damit erhalten wir für die Energie des Elektrons:

$$E = -\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}.$$

Nun betrachten wir den Übergang von einem Elektron von einer Kreisbahn mit Radius  $r_2$  auf eine Kreisbahn mit Radius  $r_1$ , wobei  $r_2 > r_1$ . Mit dem zweiten Postulat erhalten wir, dass die Frequenz des emittierten Photons:

$$f = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 h} \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right).$$

Diese Formel hat bereits grosse Ähnlichkeit mit der Rydberg-Ritz-Formel. Es ist daher verständlich, dass Bohr die Rydberg-Ritz-Formel so lange umformte, bis er diese Formel hatte und daraus seine Drehimpulshypothese ableitete. Wir gehen aber weiter auf dem deduktiven Weg und erhalten aus dem dritten Postulat und dem klassischen Drehimpuls eines Massenpunktes  $L = mvr$  verglichen mit dem 3. Postulat von Bohr:

$$L = mvr = n\hbar \Rightarrow v = \frac{n\hbar}{mr}.$$

Da wir eine Beziehung zwischen dem Radius  $r$  und  $n$  suchen, vergleichen wir wie oben die kinetische Energie damit. Es gilt:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} \Rightarrow v^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{mr}.$$

Damit erhalten wir, wenn wir diese zwei Beziehungen für die Geschwindigkeit vergleichen:

$$\frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{mr} \Rightarrow r = n^2 \cdot \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = n^2 \cdot a_0,$$

wobei sich daraus folgende Definition ergibt:

**Def. 1:** (Bohrscher Radius) Der Bohrsche Radius  $a_0$  bezeichnet den Radius des Wasserstoff-Atom im niedrigsten Energienivea  $n = 1$ , d. h.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.05 \text{ nm}.$$

Ersetzen wir nun den Radius  $r_i = n_i^2 \cdot a_0$  für  $i = 1, 2$  in der Formel für die Frequenz von oben, erhalten wir:

$$f = \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3\epsilon_0^2} \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Damit wir dies mit der Rydberg-Ritz-Formel vergleichen können, ersetzen wir  $f = \frac{c}{\lambda}$  und erhalten:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3\epsilon_0^2 c} \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

womit nun die Rydberg-Konstante definiert werden kann: Es gilt:

**Def. 2:** (Rydberg-Konstante) Die Rydberg-Konstante  $R_\infty$  entspricht der als Wellenzahl ausgedrückte Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms unter Vernachlässigung relativistischer Effekte und der Mitbewegung des Kerns (also unendlicher Kernmasse)

$$R_\infty = \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3\epsilon_0^2 c} \approx 10.97 \text{ } (\mu\text{m})^{-1}.$$

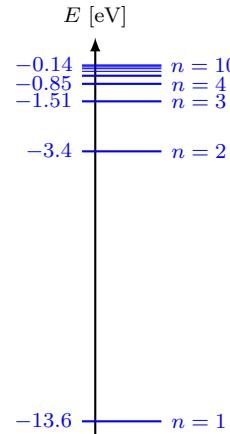
Vergleicht man diesen Wert mit dem experimentellen Wert von Rydberg, so stimmt er sehr gut überein. Damit hatte man zwar zum ersten Mal eine Theorie, die die neuen Ergebnisse von Planck und Einstein einbezog, aber diese Theorie beruhte nur auf drei nicht weiter begründbaren Postulaten. Damit war klar, dass dies nicht das Ende sein konnte. Auch Bohr war überzeugt, dass dies erst der Anfang war. Neben der Rydberg-Ritz-Formel konnte Bohr mit seinen Postulaten auch die Energieniveaus des Wasserstoffatoms vorhersagen, die sich direkt aus der Wellenlänge des Photons ablesen lassen. So ergibt sich aus  $E = \frac{hc}{\lambda}$  direkt folgendes Gesetz

**Ges. 6:** (Energieniveaus) Die Energie  $E_n$  des Elektrons im Wasserstoff-Atom im Niveau  $n$  ist gegeben als:

$$E_n = -hcR_\infty \cdot \frac{1}{n^2} = E_1 \cdot \frac{1}{n^2}$$

wobei  $E_1 = -hcR_\infty \approx -13.6 \text{ eV}$  die Ionisierungsenergie von Wasserstoff ist.

Dies kann graphisch wie folgt dargestellt werden:

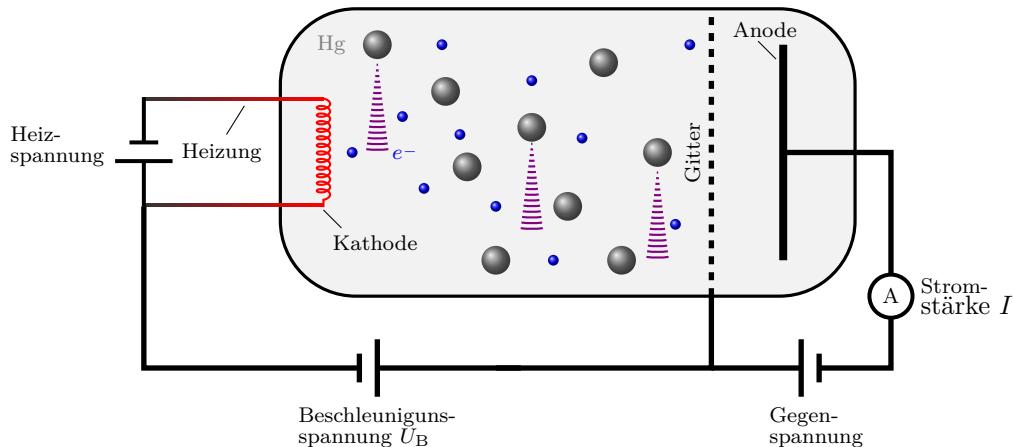


Diese Darstellung zeigt sehr schön, dass für grosse  $n$  die Abstände immer kleiner werden, so dass man kaum noch Unterschiede zwischen den Niveaus erkennen kann. Dies bedeutet, dass man sich im Bereich des Kontinuums befindet, wo die Energien kaum noch diskret sind.

Damit war das Wasserstoffatom bereits sehr gut beschrieben, auch wenn bestimmte Strukturen im Spektrum noch nicht vorhergesagt werden konnten. Aber es war ein erster grosser Erfolg der Bohrschen Postulate, dass man die Energieniveaus der Atome vorhersagen konnte. Tatsächlich gelang dies nicht nur für das Wasserstoffatom, sondern mit einigen Anpassungen auch für andere Atome. Allerdings wurden die Abweichungen zwischen Theorie und Experiment bei schwereren Atomen immer grösser. Dennoch konnte die diskrete Struktur auch für andere Atome nachgewiesen werden, wie das Franck-Hertz-Experiment von 1913/1914 zeigte, das von James Franck<sup>16</sup> und Gustav Hertz<sup>17</sup> durchgeführt wurde.

### Exp. 2: Franck-Hertz-Versuch

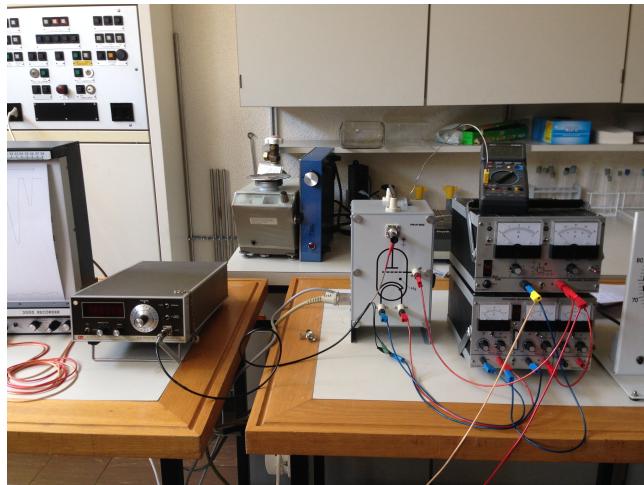
J. Frank und G. Hertz beschleunigten Elektronen ähnlich wie Millikan beim photoelektrischen Effekt durch eine Beschleunigungsspannung, jedoch nicht im Vakuum, sondern in einem Quecksilbergas. Außerdem wurden die Elektronen nicht direkt an der Anode aufgefangen, sondern erst über ein zwischengeschaltetes Gitter und eine zusätzliche Bremsspannung (siehe Skizze unten).



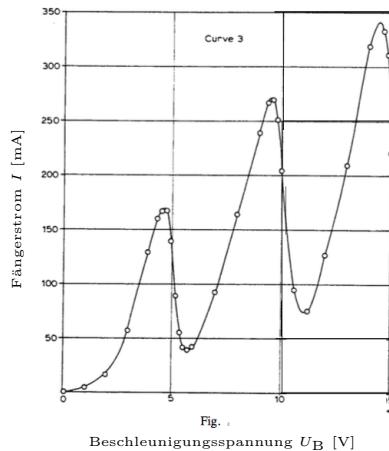
<sup>16</sup>James Franck (26. August 1882 in Hamburg - 21. Mai 1964 in Göttingen) war ein deutsch-amerikanischer Experimentalphysiker. Er erhielt 1925 zusammen mit Gustav Hertz den Nobelpreis für Physik. Franck ist vor allem für das Franck-Hertz-Experiment zur Bestätigung der Quantentheorie und den Franck-Bericht bekannt. In letzterem versuchte er, den amerikanischen Präsidenten vom Einsatz der Atombombe im Krieg gegen Japan abzubringen.

<sup>17</sup>Gustav Ludwig Hertz (22. Juli 1887 in Hamburg - 30. Oktober 1975 in Ost-Berlin) war ein deutscher Physiker und Nobelpreisträger und ein Neffe des weitaus berühmteren Physikers Heinrich Hertz, nach dem die Einheit Hertz benannt ist. Gustav Hertz ist vor allem für das Franck-Hertz-Experiment zur Bestätigung der Quantentheorie bekannt.

Die durch die Heizspannung austretenden Elektronen werden durch die Beschleunigungsspannung  $U$  in Richtung Gitter beschleunigt. Da das Gitter jedoch durchlässig ist, passieren einige Elektronen das Gitter und werden durch die konstante Gegenspannung wieder abgebremst. Je nach Energie der Elektronen gelangen einige zur Anode, andere nicht. Sofern Elektronen ankommen, misst das Amperemeter einen Einfangstrom  $I$ . Die Energie der Elektronen, die man hauptsächlich durch die Beschleunigungsspannung erhält, wird durch inelastische Stöße mit den Quecksilberatomen reduziert. Der Versuchsaufbau ist in der folgenden Abbildung dargestellt.



Mit steigender Beschleunigungsspannung  $U$  müsste nun auch der Fängerstrom  $I$  (hier Anodenstrom genannt) proportional ansteigen. Die Messung zeigt jedoch einen ganz anderen Verlauf, der klassisch nicht erklärbar ist, wie diese originale Franck-Hertz-Messung aus [66] zeigt:



Die bemerkenswerte Entdeckung des Frank-Hertz-Versuchs ist, dass der gemessene Strom in diskreten Abständen abfällt, wenn die Spannung erhöht wird. Dies deutet darauf hin, dass die Elektronen eine Mindestenergie benötigen, um das Quecksilberatom anzuregen. Darüber hinaus können sie nur diskrete Energiemengen übertragen, was darauf hinweist, dass die Energie in diesem System quantisiert ist.

Obwohl wir dieses Experiment nun sehr ausführlich diskutiert haben, gibt es immer noch Aspekte, die wir nicht berücksichtigt haben. Zum Beispiel ob die Maxima linear oder exponentiell anwachsen. Dies soll jedoch dem Leser überlassen werden.

Bevor wir uns dem Welle-Teilchen-Dualismus zuwenden, wollen wir noch zwei Beispiele diskutieren.

#### Bsp. v.

Bestimmen Sie a) die Energie und b) die Wellenlänge der Linie mit der grössten Wellenlänge in der Lyman-Serie ( $n_1 = 1$ ,  $n_2 \geq n_1 + 1$ ).

Lsg: a)  $\Delta E \approx -10.2 \text{ eV}$ , b)  $\lambda \approx 121.6 \text{ nm}$

## Lösung:

Mit diesem nächsten Beispiel schliessen wir unsere Überlegungen zum Bohrschen Atommodell ab.

## Bsp. vi.

Das Elektron im Wasserstoffatom befindet sich in seinem zehnten angeregten Zustand. Wie gross sind a) der Radius, b) der Drehimpuls, c) die kinetische sowie d) die potentielle Energie und e) die Gesamtenergie des Elektrons auf dieser Kreisbahn? Lsg: a)  $r_{11} \approx 6.05 \text{ nm}$ , b)  $L \approx 1.16 \cdot 10^{-33} \text{ Js}$ , c)  $E_{\text{kin}} \approx 0.112 \text{ eV}$ , d)  $V \approx -0.224 \text{ eV}$ , e)  $E \approx -0.112 \text{ eV}$

## Lösung:

Obwohl Bohrs Atommodell viele experimentelle Befunde erklären konnte, stiess es bei den alten Hasen wie Einstein, Lorentz, Rutherford und anderen auf heftige Kritik. Die Postulate wichen zu stark von der klassischen Vorstellung ab, schlimmer noch, sie erlaubten es nicht, sich ein Bild vom Atom zu machen. Während die einen davon überzeugt waren, dass man sich in der Quantenwelt keine Bilder mehr machen könne und dürfe, suchten die anderen nach einer guten Erklärung, die wieder durch Bilder verständlich werden sollte. Einer der ersten, dem dies gelang, war Louis de Broglie<sup>18</sup>. Im nächsten Abschnitt soll darauf eingegangen werden.

## 2.3 Welle-Teilchen-Dualismus

De Broglie war jung und, wie man so schön sagt, noch unverbraucht. Er war sehr wohlhabend und brauchte keine Angst zu haben, mittellos zu werden, wenn seine Arbeit scheiterte. Vielleicht war es dieser Umstand, der ihn dazu brachte, einen völlig neuen Ansatz zu versuchen. Nachdem Planck und Einstein gezeigt hatten, dass auch Licht quantisiert ist, war klar, dass Licht eine Doppelnatur hat. Je nach Fall tritt es als Welle oder als Teilchen auf. Genau hier setzt die Hypothese von Louis de Broglie an. In seiner Dissertation von 1924 formuliert er sinngemäss folgende Aussage:

**Ges. 7:** (De Broglie-Beziehung) Materie hat sowohl Teilchen- als auch Wellencharakter (sogenannte Materiewellen). Ein Materienteilchen mit dem Impuls  $p$  hat die Wellenlänge  $\lambda$  und gehorcht der Beziehung:

$$p = \frac{h}{\lambda}.$$

wobei  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum ist.

<sup>18</sup>Louis-Victor Pierre Raymond de Broglie, 7. Herzog de Broglie (15. August 1892 in Dieppe, Normandie - 19. März 1987 in Louveciennes, Département Yvelines) war ein französischer Physiker. Er gehörte zur französischen Adelsfamilie der Broglies und war jüngerer Bruder des Experimentalphysikers Maurice de Broglie. De Broglie gilt als einer der bedeutendsten Physiker des 20. Jahrhunderts, für seine Entdeckung der Wellennatur des Elektrons (Welle-Teilchen-Dualismus) in seiner Dissertation *Recherches sur la théorie des quanta* und der daraus resultierenden Theorie der Materiewellen erhielt er 1929 den Nobelpreis für Physik.

Damit war es möglich, die Bohrschen Hypothesen plausibel zu erklären und dem Physiker ein Bild des Atoms zu geben. Nehmen wir das 3. Postulat von Bohr:

$$L = n \frac{h}{2\pi}.$$

Für ein Elektron ist der klassische Drehimpuls  $L = mvr$ , damit erhält man:

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad \Leftrightarrow \quad pr = n \frac{h}{2\pi},$$

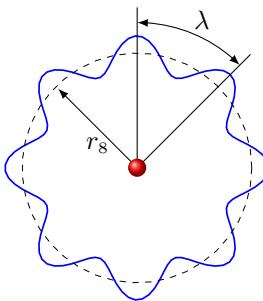
wobei der klassische Impuls  $p = mv$  eingesetzt wurde. Durch das Umstellen der Gleichung folgt:

$$2\pi r = n \frac{h}{p}$$

und mit der de Broglie-Beziehung bekommt man:

$$2\pi r = n\lambda.$$

Die letzte Gleichung setzt den Umfang der Elektronenbahn in Beziehung zu seiner Wellenlnge. Anders ausgedrkt: Der Bahnumfang muss ein natrliches Vielfaches der Wellenlnge sein, was uns an die Bedingung der stehenden Welle erinnert. Damit haben wir endlich wieder einen Grund fr die diskreten Bahnen, denn nicht zu jedem Bahnumfang passen stehende Wellen. Die Drehimpulsbedingung ergibt sich also direkt aus der Wellennatur des Elektrons. Man kann sich das Atom also wie folgt vorstellen:



Das Bild zeigt ein Atom mit dem Radius  $r_8$  und einem Elektron mit der Energie  $E_8$ , das jedoch als Welle dargestellt ist. Vermutlich war dies das Bild, das Erwin Schrödinger brauchte, um zwei Jahre später seine Wellenmechanik zu formulieren. Aber dazu später mehr.

Die Frage, die sich unmittelbar aus der Beziehung von de Broglie ergibt, lautet: Warum merken wir nichts von der Wellennatur der Materie? Zur Beantwortung dieser Frage soll das folgende Beispiel dienen.

### Bsp. vii.

Bestimmen Sie die Wellenlnge von einem Fussball mit der Masse 500 g und der Geschwindigkeit  $v = 120 \text{ km/h}$ .  
Lsg:  $\lambda \approx 4.0 \cdot 10^{-35} \text{ m}$

## Lösung:

Das Beispiel zeigt sehr deutlich, dass bei grossen Massen die Welleneigenschaft verschwindet. Bei kleinen Massen, also im Bereich der Protonen- oder Elektronenmasse, kann sie jedoch nicht mehr vernachlässigt werden. Dazu folgendes Beispiel:

### Bsp. viii.

Bestimmen Sie die Wellenlnge eines klassischen Elektrons mit der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  a) allgemein und b) falls  $E_{\text{kin}} \approx 100 \text{ eV}$  sind.

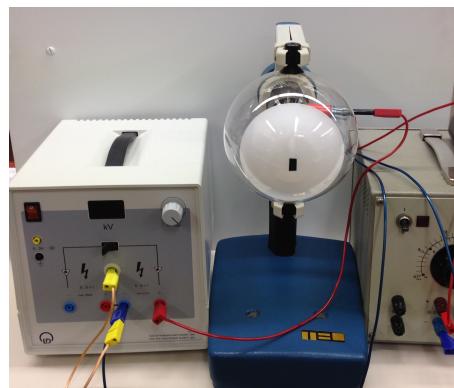
Lsg: a) – b)  $\lambda \approx 0.123 \text{ nm}$

## Lösung:

Dieses Ergebnis muss Clinton Davisson<sup>19</sup> und Lester Germer<sup>20</sup> motiviert haben, 1927 niederenergetische Elektronen auf einen Nickel-Kristall zu schiessen, wofür sie 1937 den Physik-Nobelpreis erhielten. Das folgende Experiment zeigt dieses Verhalten der Elektronen sehr schön.

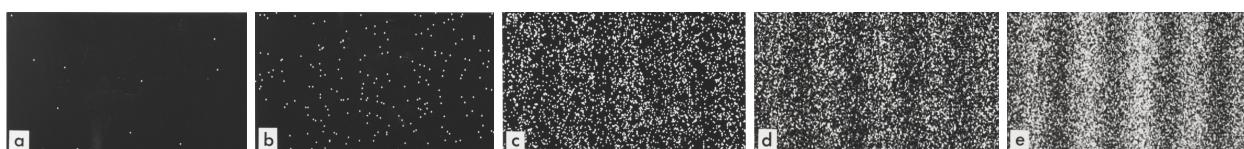
### Exp. 3: Elektron-Beugung

In einer evakuierten Röhre werden Elektronen, die aus einer geheizten ( $4 - 5$  V) Kathode austreten, durch eine hohe Spannung (einige kV) beschleunigt und durch eine polykristalline Graphitschicht geschossen (siehe Abbildung).



Die Elektronen treffen dann auf die mit fluoreszierendem Material beschichtete Innenseite der Röhre und regen diese beim Auftreffen zum Leuchten an. Auf dem Schirm sind Ringe zu sehen, in denen sich helle und dunkle Bereiche abwechseln, ähnlich wie beim Doppelspalterperiment mit Licht. Das lässt darauf schließen, dass die Elektronen am Atomgitter gebeugt werden und so ein Interferenzmuster erzeugen. Dieses Experiment wird in [67] ausführlich beschrieben.

Damit war eindeutig bewiesen, dass Elektronen auch eine Welleneigenschaft besitzen. Einige Jahre später, genau 1961, führte Claus Jönsson das Doppelspaltexperiment mit Elektronen durch. Obwohl jeweils nur ein Elektron abgeschossen wird, entsteht auf dem Schirm ein Interferenzmuster (siehe Bild aus [68] unten), das nur durch die Welleneigenschaft der Elektronen erklärt werden kann.



<sup>19</sup> Clinton Joseph Davisson (22. Oktober 1881 in Bloomington, Illinois - 1. Februar 1958 in Charlottesville, Virginia) war ein US-amerikanischer Physiker und Nobelpreisträger. Den Physik-Nobelpreis erhielt er 1937 für die experimentelle Bestätigung der von de Broglie vorhergesagten Materiewellen, die ihm 1926 zusammen mit Lester Germer durch den Nachweis der Diffraktion von Elektronen an Kristallen gelungen war.

<sup>20</sup>Lester Halbert Germer (10. Oktober 1896 in Chicago, Illinois - 3. Oktober 1971 in Gardiner, New York) war ein US-amerikanischer Physiker.

Die Bildserie zeigt das Ergebnis eines Doppelspaltexperiments, bei dem die Anzahl der Elektronen bei (a) 11, bei (b) 200, bei (c) 6 000, bei (d) 40 000 und bei (e) 140 000 beträgt. Auch wenn das Verhalten der Elektronen bei (a) und (b) noch zufällig erscheint, ist das Interferenzmuster in den folgenden Bildern immer deutlich zu erkennen.

Zum Schluss noch ein philosophischer Gedanke zum Welle-Teilchen-Dualismus. Viele Physiker und auch Nicht-Physiker haben Probleme mit der Vorstellung, dass ein Teilchen sowohl eine Welle als auch ein Teilchen sein kann. Die Erfahrung lehrt uns, dass etwas normalerweise entweder das eine oder das andere ist, besonders wenn es sich um so grundlegend verschiedene Eigenschaften handelt. Aber vielleicht sind das Elektron und das Photon weder Teilchen noch Welle, sondern etwas, das wir noch nicht kennen und das sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften hat.

Damit ist das Thema der Dualität der Natur abgeschlossen und wir kommen zum zentralen Thema der Quantenphysik, der Quantenmechanik. Sie ist das Produkt der verschiedenen Ergebnisse und versucht, es auf einen einfachen Nenner oder eine einfache Gleichung zu bringen. Im Wesentlichen waren es zwei junge Physiker, die sich diesem Problem stellten und es erfolgreich lösten. Dies waren zum einen Erwin Schrödinger<sup>21</sup> und zum anderen Werner Heisenberg<sup>22</sup>.

## 2.4 Quantenmechanik

In diesem Abschnitt zur Quantenmechanik wird hauptsächlich die Wellenmechanik von Erwin Schrödinger aus dem Jahr 1926 behandelt, die sich stärker an die klassische Vorstellung und die Interpretation von de Broglie anlehnt. Nur wenige Jahre später zeigte Schrödinger die Äquivalenz seiner Formulierung zur Heisenbergschen Matrizenmechanik.



W. Heisenberg  
(1901-1976)

Werner Heisenberg war ein herausragender deutscher Physiker des 20. Jahrhunderts, der für seine grundlegenden Beiträge zur Quantenmechanik und die Formulierung des Heisenberg'schen Unschärfeprinzips bekannt ist. Seine Arbeit zur Quantenmechanik revolutionierte das Verständnis der physikalischen Welt auf subatomarer Ebene. Heisenberg spielte auch eine wichtige Rolle bei der Entwicklung der Quantenfeldtheorie und der Kernphysik. Für seine wegweisenden Arbeiten erhielt er 1932 den Nobelpreis für Physik. Heisenberg war nicht nur ein herausragender Wissenschaftler, sondern auch ein bedeutender Lehrer und Mentor für viele junge Physiker seiner Zeit. Sein Einfluss auf die moderne Physik und sein Vermächtnis als einer der führenden Köpfe der Quantenmechanik sind unbestreitbar.

Erwin Schrödinger war ein bedeutender österreichischer Physiker des 20. Jahrhunderts, der für seine fundamentale Arbeit auf dem Gebiet der Quantenmechanik bekannt ist. Schrödingers wichtigste Leistung war die Entwicklung der Schrödinger-Gleichung im Jahr 1926, eine fundamentale Gleichung in der Quantenmechanik, die die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion eines quantenmechanischen Systems beschreibt. Ein weiterer berühmter Beitrag von Schrödinger ist das Gedankenexperiment *Schrödingers Katze*, das die seltsamen Konzepte der Quantenphysik illustriert und die Interpretationen der Quantenmechanik herausfordert. Für seine wegweisenden Arbeiten erhielt Erwin Schrödinger 1933 den Nobelpreis für Physik, gemeinsam mit Paul Dirac.



E. Schrödinger  
(1887-1961)

Um die Schrödinger-Gleichung verstehen zu können, müssen wir uns zunächst mit der Wellenfunktion beschäftigen. Erst dann können wir uns an die Herleitung der Schrödinger-Gleichung wagen, die von der klassischen Wellengleichung ausgeht und durch Plausibilitätsargumente zur Schrödinger-Gleichung führt.

### 2.4.1 Wellenfunktionen und Wellenpakete

Die Wellenfunktion versteht man meiner Meinung nach am besten, wenn man sie mit der Messgröße vergleicht. Dafür müssen wir uns jedoch im klaren werden, wie das im Grunde klassisch funktioniert.

Das zweite Newton'sche Gesetz beschreibt die Bewegung von Körpern:

$$F_{\text{res}} = ma.$$

Daraus können wir die Beschleunigung berechnen. Dann können wir ein Experiment aufbauen, das die Masse mit der vorher bestimmten resultierenden Kraft beschleunigt. Wenn wir die Beschleunigung messen, sollten wir den gleichen Wert erhalten, d.h. die physikalische Größe in der Bewegungsgleichung und die Messgröße sind

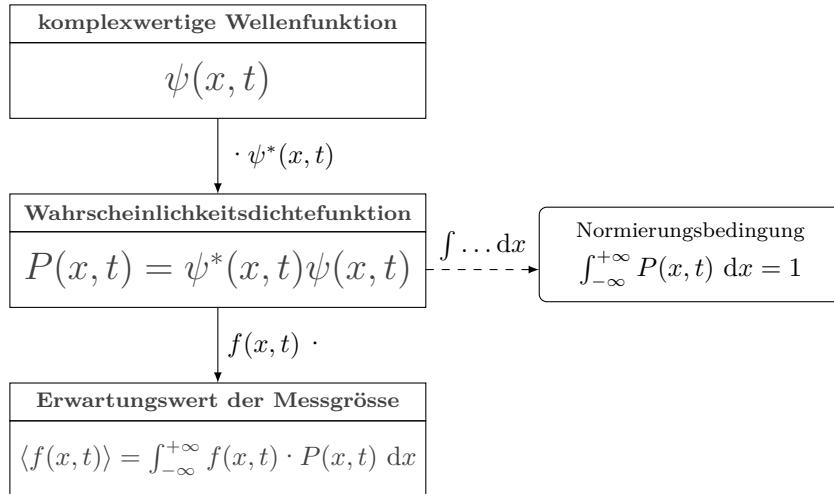
<sup>21</sup>Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (12. August 1887 in Wien-Erdberg - 4. Januar 1961 in Wien) war ein österreichischer Physiker und Wissenschaftstheoretiker.

<sup>22</sup>Werner Karl Heisenberg (5. Dezember 1901 in Würzburg - 1. Februar 1976 in München) war ein deutscher Wissenschaftler und Nobelpreisträger, der zu den bedeutendsten Physikern des 20. Jahrhunderts zählt.

identisch.

In der Quantenmechanik verhält es sich jedoch anders. Als physikalische Grösse bzw. Objekt der physikalischen Gesetze der Quantenmechanik dient die *Wellenfunktion*. Im Experiment wird allerdings nicht die Wellenfunktion, sondern der *Erwartungswert einer Funktion, die eine physikalische Messgrösse beschreibt*, gemessen.

Wie kommt man nun also von der Wellenfunktion zur Messgrösse? Die folgende Darstellung soll diesen Weg verdeutlichen<sup>23</sup>.



Nach seiner Entdeckung versuchte de Broglie, aus der Tatsache, dass Elektronen durch eine Welle beschrieben werden können, eine allgemeine Gleichung abzuleiten. Diese Versuche halfen Schrödinger bei der Entwicklung der Schrödinger-Gleichung. Der entscheidende Schritt war wohl Schrödingers Entdeckung, dass die Wellenfunktion nicht das Elektron selbst beschreibt, sondern nur die Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Dies soll nun ausführlich diskutiert werden.

Die klassische Wellengleichung, wie sie im Kapitel E.2.5 hergeleitet wurde, lautet

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2}.$$

Wir haben gezeigt, dass die harmonische Welle:

$$y(x, t) = \hat{y} \cos(kx - \omega t + \varphi)$$

mit  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  und  $\omega = \frac{2\pi}{T}$  die Wellengleichung löst. Des Weiteren haben wir gezeigt, dass die Fortpflanzungsgeschwindigkeit  $v$  durch:

$$v = \frac{\omega}{k} = \lambda f$$

gegeben ist.

Obwohl die harmonische Welle die Wellenfunktion löst und der Schrödinger-Gleichung sehr ähnlich ist, wird sie nicht durch die Form der harmonischen Welle gelöst. Die Schrödinger-Gleichung ist eine komplexe Gleichung im Sinne der komplexen Zahlen und kann daher niemals durch eine reelle Funktion gelöst werden. Glücklicherweise kann die harmonische Funktion durch eine komplexwertige Wellenfunktion ausgedrückt werden, nämlich durch

$$\psi(x, t) = \hat{\psi} e^{i(kx - \omega t + \varphi)},$$

wobei traditionsgemäß für quantenmechanische Wellenfunktionen  $\psi$  und nicht  $y$  verwendet wird. Diese Wellenfunktion löst zwar die Wellengleichung, doch, wie Schrödinger erkannte, beschreibt diese Funktion nicht das Teilchen selbst, sondern das Betragsquadrat dieser Funktion, wie die folgende Definition zeigt:

**Def. 3:** (Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte) Das Betragsquadrat einer beliebigen Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte  $P(x, t)$ , d. h.

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2,$$

wobei  $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) dx = 1$  sein muss.

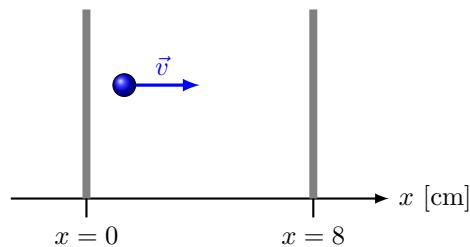
<sup>23</sup>Dieses Vorgehen war Schrödinger bereits bewusst, doch erst Max Born (11. Dezember 1882 – 5. Januar 1970), ein deutscher Physiker, interpretierte es. Diese Interpretation stellt einen wesentlichen Bestandteil der sogenannten Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik dar.

Wenn Sie sich fragen, warum man die Dichtefunktion auf diese Weise berechnet, dann muss ich Ihnen leider sagen, dass das niemand weiss. Wir wissen nur, dass wir, wenn wir es auf diese Weise tun, das richtige Ergebnis erhalten. Ich weiss, dass das sehr unbefriedigend ist, aber nehmen Sie es als Herausforderung an, diese Frage im Laufe Ihres Lebens selbst zu beantworten.

Um das Konzept der Aufenthaltswahrscheinlichkeit etwas besser zu verstehen, soll das folgende Beispiel verwendet werden.

Bsp. ix.

Betrachten wir ein klassisches Teilchen, das sich mit einer konstanten Geschwindigkeit zwischen zwei Wänden hin und her bewegt.



Bestimmen Sie a)  $P(x)$ , wobei wir die Zeit vernachlässigen, b) die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zwischen  $x = 3 \text{ cm}$  und  $x = 3.4 \text{ cm}$  und c) bei  $x = 3 \text{ cm}$  anzutreffen. Lsg: a) -, b)  $W(x) = 5\%$ , c)  $W(x) = 0\%$

Lsg: a) -, b)  $W(x) = 5\%$ , c)  $W(x) = 0\%$

## Lösung:

Betrachten wir eine erste Anwendung und nehmen die Funktion  $y(x, t)$  von oben. Diese Wellenfunktion soll für ein Teilchen gelten, dann ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:

$$P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \psi(x,t)^* \psi(x,t) = \hat{\psi}^2 e^{-i(kx-\omega t)} e^{i(kx-\omega t)} = \hat{\psi}^2 = \text{konst.}$$

Das bedeutet aber, dass sich das Teilchen zu jedem Zeitpunkt mit gleicher Wahrscheinlichkeit an jedem Ort befindet. Das sollte uns eigentlich nicht überraschen, denn eine Welle, wie sie durch  $\psi(x, t)$  beschrieben wird, ist im Raum unendlich ausgedehnt, also überall. Es kann sich also nicht um die Wellenfunktion eines Teilchens handeln, denn dieses ist zu einem bestimmten Zeitpunkt an einem bestimmten Ort, bzw. mehr oder weniger.

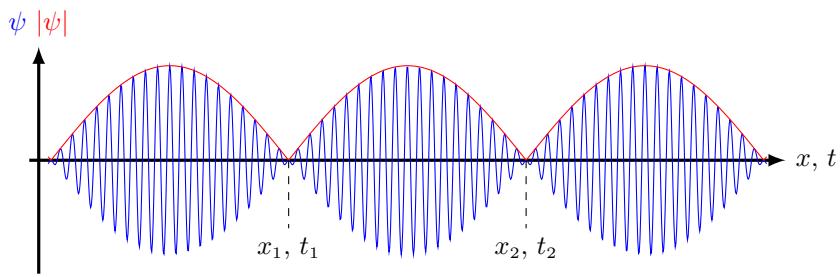
Wie werden nun Teilchen beschrieben? Dies soll nun exemplarisch an der Überlagerung zweier Wellen betrachtet werden. Sei die Wellenfunktion  $\psi$  die Summe zweier harmonischer Wellen, die wiederum eine harmonische Welle ist:

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

Eine etwas längere aber nicht schwierige Umformung führt auf:

$$\psi(x,t) = \underbrace{2\hat{\psi} \cos\left(\frac{1}{2}\Delta kx - \frac{1}{2}\Delta\omega t\right)}_{\text{Einh\"ullende}} \cdot e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega}t)},$$

mit  $\Delta k = k_1 - k_2$  sowie  $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$  und  $\bar{k} = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$  sowie  $\bar{\omega} = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2)$ . Graphisch sieht dies wie folgt aus:



Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens ist proportional zur  $|\psi|$  also entspricht sie der Einhüllenden. Vergessen wir mal die weiteren Berge und betrachten nur den Mittleren, dann entspricht der Abstand  $\Delta x = x_2 - x_1$  der räumlichen Ausdehnung des Teilchens. Da für die Einhüllende:

$$\cos\left(\frac{1}{2}\Delta kx\right) = 0 \quad \text{falls} \quad \frac{1}{2}\Delta kx = (2n-1)\frac{\pi}{2} \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

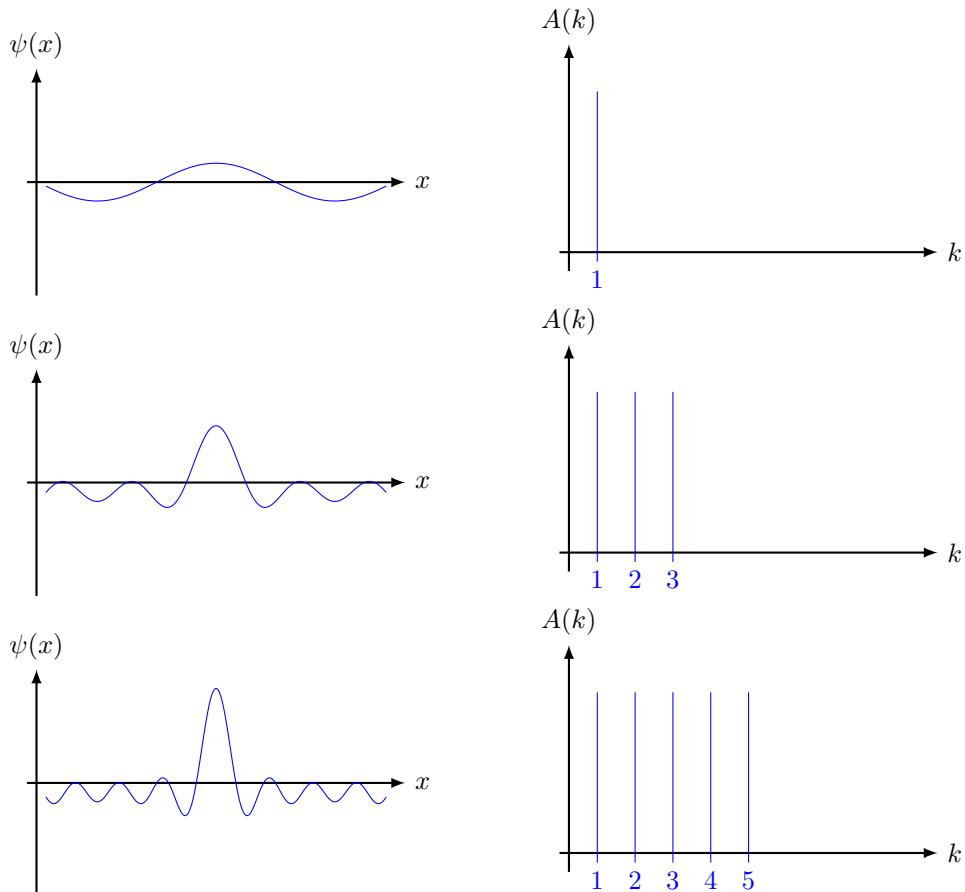
gilt, ist

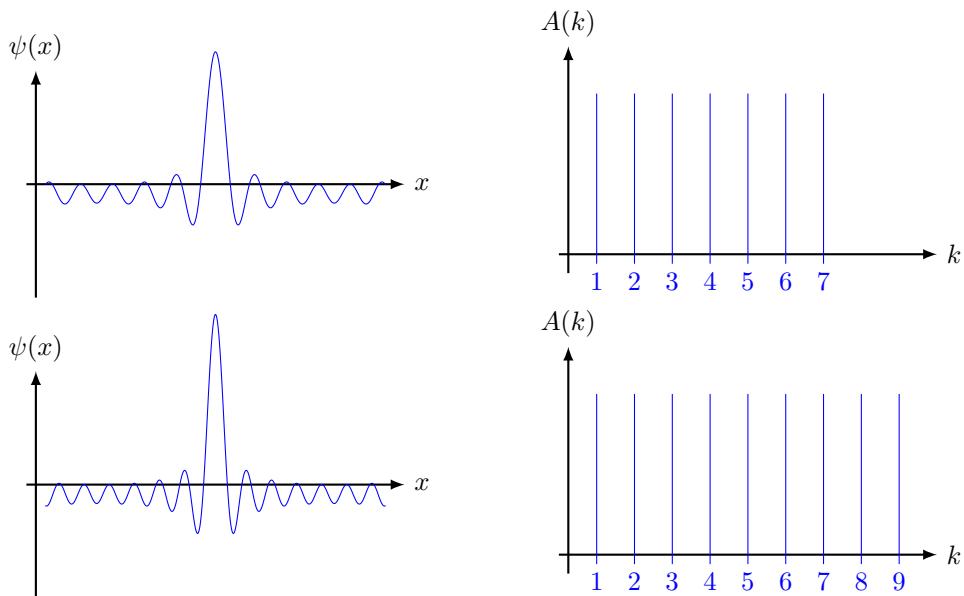
$$\frac{1}{2}\Delta kx_2 - \frac{1}{2}\Delta kx_1 = \frac{3\pi}{2} - \frac{\pi}{2} = \pi \quad \Rightarrow \quad \Delta k \cdot \Delta x = 2\pi$$

Da die Funktion völlig symmetrisch ist in  $x$  und  $t$ , erhalten wir analog dazu:

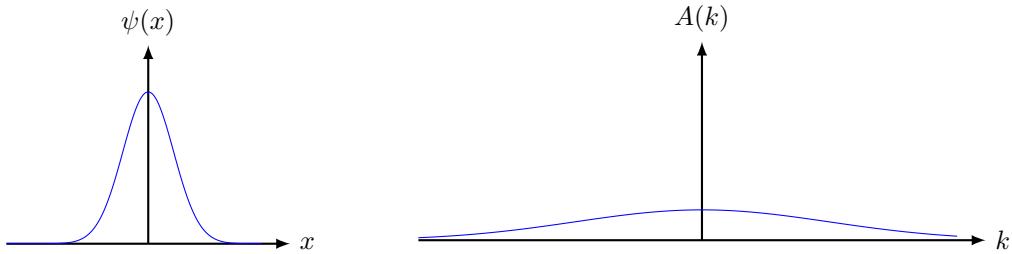
$$\frac{1}{2}\Delta\omega t_2 - \frac{1}{2}\Delta\omega t_1 = \frac{3\pi}{2} - \frac{\pi}{2} = \pi \quad \Rightarrow \quad \Delta\omega \cdot \Delta t = 2\pi$$

Aus diesen beiden Folgerungen schliessen wir, dass für ein kleines  $\Delta x$  das  $\Delta k$  gross sein muss oder umgekehrt und analog für ein kleines  $\Delta t$  das  $\Delta\omega$  gross sein muss. Dieses Ergebnis kann allgemein mit Hilfe der Fourier-Analyse nachgewiesen werden. Es soll hier kurz veranschaulicht werden. In den folgenden Grafiken sind die Funktionen  $\psi(x)$  und die Spektren  $A(k)$  dargestellt, wobei die Anzahl der Wellenzahlen von Bild zu Bild zunimmt. (Analoges kann für  $\psi(t)$  und  $A(\omega)$  gemacht werden).

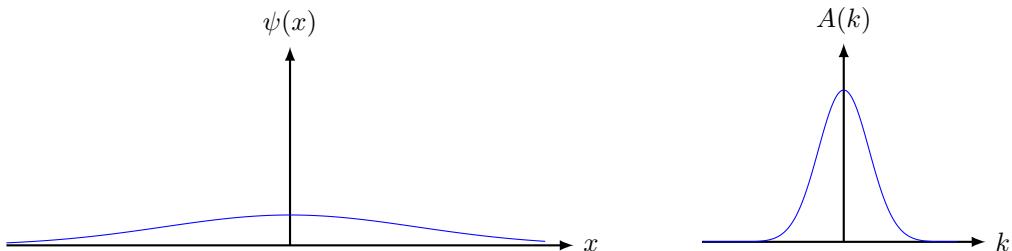




Sehr deutlich ist zu erkennen, dass die Wellenfunktion mit zunehmender Anzahl der Wellenzahlen stärker lokalisiert wird. Man könnte also sagen, je breiter die Wellenzahlverteilung ist, desto schmäler ist die Verteilung der Wellenfunktion oder umgekehrt. Die obigen Diagramme beschreiben den Fall einer diskreten Verteilung. Dieser Effekt verstärkt sich, wenn die Verteilungen kontinuierlich sind. Für eine lokalisierte Wellenfunktion ergibt sich dann folgendes Bild:



Für eine lokalisierte Spektralverteilung sieht es dann umgekehrt aus:



An dieser Stelle möchte ich meinen nicht sehr geliebten Professor für mathematische Methoden der Physik, Herrn Professor Trubowitz, zitieren, der zu diesem Thema immer wieder folgendes sagte:

*Localized in x-space, spread out in k-space!  
Localized in k-space, spread out in x-space!*

Um nach diesem kurzen Exkurs in die Fourieranalyse wieder zur Physik zurückzukehren, sei an dieser Stelle hinzugefügt, dass ein Teilchen nur dann eine lokalisierte Wellenfunktion haben kann, wenn es eine Überlagerung vieler Wellenlängen ist. Analog gilt dies natürlich auch für die zeitliche Auflösung, die nur klein ist, wenn das Frequenzspektrum gross ist. Wir definieren also

**Def. 4:** (Wellenpaket) Ein Wellenpaket ist eine Überlagerung von harmonischen Wellen mit einer kontinuierlichen Verteilung von Kreisfrequenzen und Wellenzahlen.

Damit sollte nun klar sein, dass ein Elektron durch ein Wellenpaket beschrieben werden kann, was im Ortsraum wie folgt aussieht:

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

wobei  $A(k)$  die Spektralverteilung ist.

Bei der Betrachtung von Wellenpaketen muss zwischen der so genannten Phasengeschwindigkeit und der Gruppengeschwindigkeit unterschieden werden. Bevor wir darauf eingehen, soll eine [Animation](#) diesen Unterschied verdeutlichen. Nun zur Definition dieser Geschwindigkeiten:

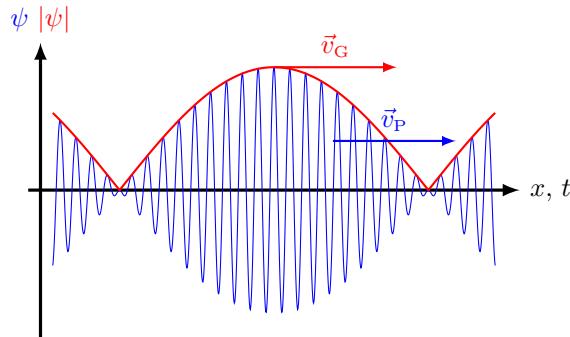
**Def. 5:** (Gruppengeschwindigkeit) Die Gruppengeschwindigkeit  $v_G$  eines Wellenpakets ist die Geschwindigkeit der Einhüllenden, es gilt:

$$v_G = \frac{d\omega}{dk}.$$

**Def. 6:** (Phasengeschwindigkeit) Die Phasengeschwindigkeit  $v_p$  eines Wellenpakets ist die mittlere Geschwindigkeit der einzelnen Wellen, es gilt:

$$v_P = \frac{\omega}{k}.$$

Kehren wir wieder zurück zur Superposition von zwei Wellen, dann erhalten wir Graphisch das folgende:



Für diese Funktion  $\psi$ :

$$\psi(x,t) = 2\hat{y} \cos\left(\frac{1}{2}\Delta kx - \frac{1}{2}\Delta\omega t\right) \cdot e^{i(\bar{k}x - \bar{\omega}t)}$$

erhalten wir schliesslich für die Gruppengeschwindigkeit

$$v_G = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

und für die Phasengeschwindigkeit

$$v_P = \frac{\bar{\omega}}{\bar{k}}$$

mit  $\Delta k = k_1 - k_2$  sowie  $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$  und  $\bar{k} = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$  sowie  $\bar{\omega} = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2)$ .

Abschliessen zeigen wir noch, dass die Gruppengeschwindigkeit der klassischen Teilchengeschwindigkeit entspricht.

Bsp. x.

Zeigen Sie, dass die Gruppengeschwindigkeit  $v_G$  mit der Geschwindigkeit eines Teilchens übereinstimmt. Tipp: Die Winkelgeschwindigkeit als Funktion der Wellenzahl mit Hilfe der kinetischen Energie, der Planck'schen Hypothese und des de Broglie-Impulses ausdrücken. Lsg: –

$J_{\text{sg}} =$

## Lösung:

Bevor wir uns der Schrödinger-Gleichung zuwenden, wollen wir diesen Zusammenhang zwischen der Spektralverteilung  $A(k)$  und dem Wellenpaket im Ortsraum  $\psi(x, t)$  näher betrachten.

### 2.4.2 Unschärferelation

Wie wir weiter oben bereits gezeigt haben, wird ein Teilchen durch ein Wellenpaket beschrieben. Es gilt:

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

Wir haben bereits für eine diskrete Funktion gezeigt, dass das Produkt aus der räumlichen Ausdehnung  $\Delta x$  und der Änderung der Wellenvektoren  $\Delta k$  konstant ist. Dies kann nur für kontinuierliche Verteilungen der Wellenvektoren verallgemeinert werden.

Nimmt man für die Spektralverteilung  $A(k)$  eine Gaussverteilung  $G(k)$  mit:

$$G(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} e^{-k^2/(2\sigma_k^2)},$$

wobei  $\sigma_k$  die Standardabweichung ist, dann kann gezeigt werden, dass

$$\Delta x = \sigma_x \quad \text{und} \quad \Delta k = \sigma_k$$

sind. Mit  $\sigma_p = \hbar\sigma_k$  erhalten wir schliesslich für das Produkt

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sigma_x \cdot \sigma_p = \sigma_x \cdot \hbar\sigma_k.$$

Für die Standardabweichungen der Gaussverteilungen gilt für  $t = 0$ :

$$\sigma_x \cdot \sigma_k \Big|_{t=0} = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \sigma_x \cdot \sigma_k \Big|_t \geq \frac{1}{2}.$$

Daraus erhalten wir nun die Heisenbergsche Unschärferelation:

**Ges. 8:** (*Heisenbergsche Unschärferelation*) Seien  $\Delta x$  die Ortsunschärfe und  $\Delta p_x$  die Impulsunschärfe, dann gilt:

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{2}}.$$

Dieses rein mathematisch abgeleitete Gesetz hat zum wohl grössten Paradigmenwechsel in der Physik beigetragen. Es besagt, dass Ort und Impuls eines Teilchens nicht mehr gleichzeitig beliebig genau bestimmt werden können. Je genauer man z. B. den Ort eines Teilchens kennt, desto ungenauer kennt man seinen Impuls oder umgekehrt.

Damit stirbt der *Laplacesche Dämon* endgültig. Der Ausdruck (Laplacesche Dämon) stammt aus folgendem Zitat von Pierre-Simon Laplace<sup>24</sup> im Vorwort des *Essai philosophique sur les probabilités* von 1814:

*Wir müssen also den gegenwärtigen Zustand des Universums als Folge eines früheren Zustandes und als Ursache des späteren Zustandes betrachten. Eine Intelligenz, die in einem gegebenen Augenblick alle Kräfte, mit denen die Welt begabt ist, und die gegenwärtige Lage der Gebilde, aus denen sie sich zusammensetzt, kennt, und die überdies umfassend genug ist, dieses Wissen einer Analyse zu unterziehen, würde in derselben Formel die Bewegungen der grössten Himmelskörper und die des leichtesten Atoms erfassen. Nichts wäre für sie ungewiss, Zukunft und Vergangenheit lägen klar vor ihren Augen.[70]*

Die Heisenbergsche Unschärferelation macht es unmöglich, den Anfangszustand hinreichend genau zu kennen, d.h. wenn man den Anfangszustand nicht genau kennt, kann man natürlich keine beliebig weit in die Zukunft reichenden Vorhersagen machen. Betrachten wir als Beispiel die sogenannte Nullpunktsenergie.

#### Bsp. xi.

Betrachten Sie ein 1-dim. Volumen der Länge  $l$  und zeigen Sie, dass die Unschärfe in der kinetischen Energie  $\Delta E_{\text{kin}}$  eines Teilchens in diesem Volumen proportional zu  $\frac{1}{l^2}$  ist. Lsg: –

<sup>24</sup>Pierre-Simon (Marquis de) Laplace (28. März 1749[1] in Beaumont-en-Auge in der Normandie - 5. März 1827 in Paris) war ein französischer Mathematiker, Physiker und Astronom. Er beschäftigte sich unter anderem mit der Wahrscheinlichkeitstheorie und Differentialgleichungen.

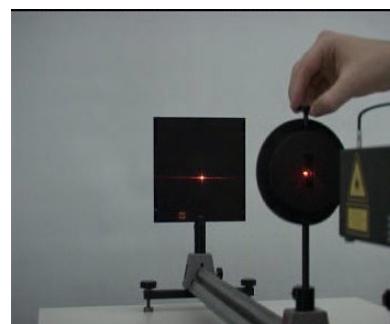
## Lösung:

Dieses Beispiel zeigt auf eindrückliche und vielleicht überraschende Weise, dass nichts wirklich still steht. Je näher man etwas betrachtet, desto schneller bewegt es sich. Wir werden also nie wissen, wie ein Teilchen in Ruhe aussieht.

Zur Ort-Impuls Unschärferelation betrachten wir noch einmal ein Experiment, das wir bereits im Kapitel zur Beugung von Wellen genauer behandelt haben, die Beugung am Einzelspalt (siehe Kapitel E.2.4).

## Exp. 4: Laser am Einzelspalt

Der Helium-Neon Laser erzeugt rotes kohärentes Licht bei einer Wellenlänge von etwa 630 nm. Der Laser wird auf einen vertikalen Spalt gerichtet, dessen Breite ebenfalls im Zehntel Mikrometer Bereich ist. Hinter dem Einzelspalt wird ein Schirm in etwa einem Meter Entfernung positioniert.



Sobald der Laser durch den Spalt dringt, dessen Breite klein genug ist, sieht man das typische Beugungsmuster, wobei das zentrale Maximum am hellsten und ab breitesten ist (vgl. Abb. aus [35]).



Neben diesem zentralen Maximum gibt es weitere Interferenzmaxima. Diese wiederholen sich mehrmals, bis die Lichtintensität so gering wird, dass sie nicht mehr nachweisbar ist.

Im Kapitel über Interferenz und Beugung von Wellen haben wir dieses Phänomen mit Hilfe der Wellenlehre erklärt. Nun soll es mit Hilfe der Unschärferelation erklärt werden. Ein Photon fliegt durch einen senkrechten Spalt mit der Breite  $b$  und somit ist die Ortsunschärfe in diesem Punkt  $\Delta x < b$ . Daraus folgt, dass die Impulsunschärfe  $\Delta p_x$  ist:

$$\Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{2h}$$

Das bedeutet, dass das Photon, das zu Beginn nur einen Impuls senkrecht zur Scheibe hatte, nun aufgrund der Unschärferelation einen Impuls in  $x$ -Richtung erhält. Dieser Impuls ist dafür verantwortlich, dass das Licht seitlich auf den Schirm treffen kann.

Analog zur Orts-Impuls-Unschärfe gibt es auch die Zeit-Energie-Unschärfe. Die Herleitung ist sehr ähnlich und man erhält für ein Zeitintervall  $\Delta t$  und eine Energiedifferenz  $\Delta E$ :

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \frac{\hbar}{2}.$$

Beachten Sie, dass das Zeitintervall keine Standardabweichung einer Messung von Zeitpunkten ist. Es ist vielmehr ein echtes Zeitintervall. Zum Beispiel ist es möglich, den Energieerhaltungssatz zu verletzen, wenn man die Energie nach einer bestimmten Zeit zurückgibt. Je mehr Energie man sich lehrt, desto schneller muss man sie zurückgeben.

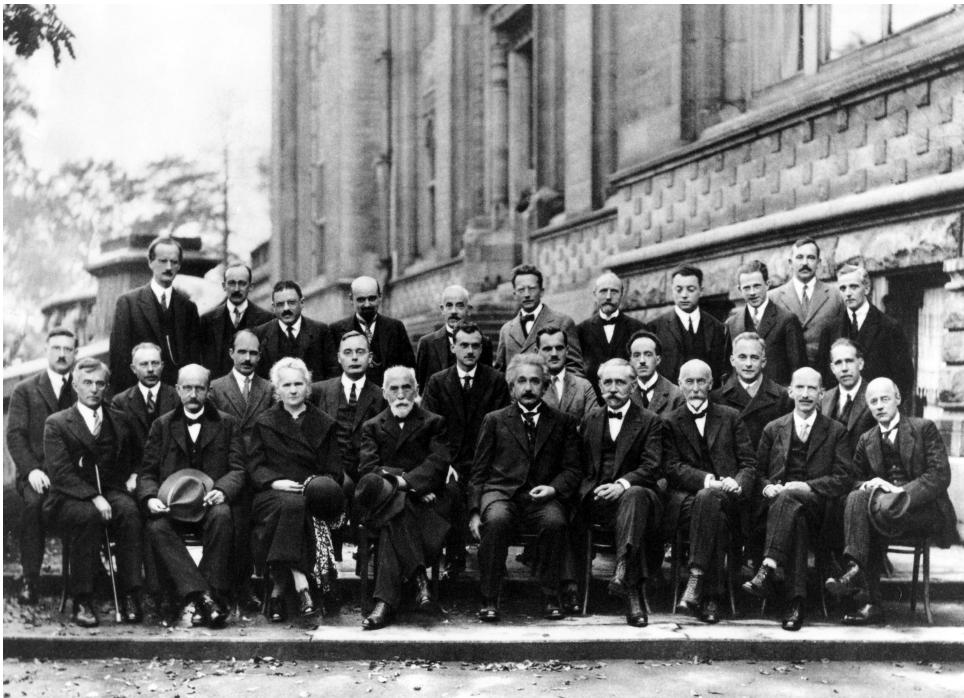
Damit schliessen wir den Abschnitt über Wellenfunktionen und Wellenpakete ab und kommen schliesslich zur Schrödinger-Gleichung.

### 2.4.3 Die Schrödinger Gleichung

Bis dahin schwelt die Quantenmechanik noch in der Luft, denn wir haben noch keine Gleichung, die die Bewegung der Teilchen quantenmechanisch beschreibt. Etwas in der Art des Aktionsgesetzes oder der Wellengleichung musste für die Quantenmechanik gefunden werden. Das war die Herausforderung, an der viele junge Physiker um 1920 arbeiteten. Wie bereits erwähnt, scheiterte de Broglie an dieser Aufgabe. Die Lösung dieses Problems wurde fast gleichzeitig von zwei rivalisierenden Physikern gefunden. Zum einen von Werner Heisenberg 1925 im Alter von nur 24 Jahren und zum anderen von Erwin Schrödinger 1926 im Alter von 39 Jahren. Um zu verstehen, warum diese Vertreter aus zwei rivalisierenden Parteien stammen, muss man wissen, dass die Quantenmechanik von vielen älteren Physikern nicht oder nur zögerlich akzeptiert wurde. Einer der bekanntesten Gegner der Quantenmechanik war Albert Einstein. Für ihn war die Quantenmechanik nicht anschaulich und widersprach dem gesunden Menschenverstand. Eine berühmte Aussage Einsteins zur Quantenphysik lautet: „*God does not play dice!*“. Damit kritisierte er den probabilistischen Charakter der Quantenmechanik, insbesondere der Wellenfunktion.

Dem gegenüber steht der Vater der Quantenmechanik, Niels Bohr. Er war davon überzeugt, dass die Quantenmechanik die Realität am besten beschreiben müsse und dass es keinen Grund gäbe, warum die Naturgesetze nicht mit dem gesunden Menschenverstand übereinstimmen sollten. Seine Antwort auf Einsteins Aussage lautete: „*Einstein, stop telling God what to do!*“. Er war auch davon überzeugt, dass die Wahrheit nur in der Mathematisierung liegt und dass man sich die Quantenmechanik nicht mehr vorstellen kann und soll.

Erwin Schrödinger gehört zu den Konservativen und damit zu Albert Einstein. Werner Heisenberg hingegen gehört zu den Progressiven und damit zu Niels Bohr. Bohr und Einstein, aber auch Heisenberg und Schrödinger stritten lange um die Interpretation der Quantenmechanik. Der Streit gipfelte im Oktober des Jahres 1927 auf der 5. Solvay-Konferenz in Brüssel, auf der zum ersten und letzten Mal die bedeutendsten Physiker aller Zeiten versammelt waren, wie dieses Bild aus [69] belegt:



oben: A. Piccard, E. Henriot, P. Ehrenfest, E. Herzen, Th. de Donder, **E. Schrödinger**, J.E. Verschaffelt, W. Pauli, W. Heisenberg, R.H. Fowler, L. Brillouin  
 mitte: P. Debye, M. Knudsen, W.L. Bragg, H.A. Kramers, P.A.M. Dirac, **A.H. Compton**, L. de Broglie, M. Born, N. Bohr  
 unten: I. Langmuir, M. Planck, M. Skłodowska-Curie, **H.A. Lorentz**, A. Einstein, P. Langevin, Ch.-E. Guye, C.T.R. Wilson, O.W. Richardson

Nach dieser Konferenz einigte man sich auf die sogenannte *Kopenhagener Deutung* der Quantenphysik, die bis heute von den meisten Physikern akzeptiert wird. Da wir hier an den Grundlagen der Physik und nicht a priori der Philosophie interessiert sind, soll dies hier nicht weiter diskutiert werden.

Kehren wir zur Schrödinger-Gleichung zurück, denn diese soll nun hergeleitet werden, und zwar deshalb, weil Heisenbergs Matrizenmechanik mathematisch anspruchsvoller und weniger plausibel ist. Wie Schrödinger später selbst zeigte, sind beide Formulierungen äquivalent.

Da wir Teilchen in der Quantenmechanik durch Wellenfunktionen ausdrücken wollen, ist es naheliegend, dass die Herleitung von der Wellengleichung ausgeht. Es gilt also:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}(x, t) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t).$$

Mit dem Ansatz einer harmonischen Welle von  $\psi(x, t) = \hat{\psi} \cos(kx - \omega t)$  erhalten wir durch einsetzen:

$$-\frac{\omega^2}{c^2} = -k^2 \quad \Rightarrow \quad w = kc.$$

Diese Beziehung soll mit  $\hbar$  erweitert werden, wodurch wir

$$\hbar\omega = \hbar kc \quad \Rightarrow \quad E = pc$$

erhalten, was die Energie-Impuls-Beziehung für ein masseloses Teilchen ist, z.B. ein Photon. Nun soll analog dazu die Energie-Impuls-Beziehung für ein massives Teilchen verwendet werden, um rückwärts die Bewegungsgleichung abzuleiten. Es gilt:

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{p^2}{2m} + V,$$

wobei für die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}$  und wie in der theoretischen Physik üblich für  $E_{\text{pot}} = V$  eingesetzt wurde. Durch einsetzen der quantenmechanischen Energie- und Impulsbeziehung, erhalten wir:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = E_{\text{kin}} + V.$$

Vergleichen wir diese zwei Beziehungen zwischen  $\omega$  und  $k$ :

$$\text{masselos: } \frac{\hbar^2 \omega^2}{c^2} = \hbar^2 k^2 \quad \text{und} \quad \text{massiv: } \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V$$

dann erkennen wir, dass für masselose Teilchen sowohl  $k$  als auch  $\omega$  quadratisch vorkommt, hingegen für massive Teilchen nur  $k$  quadratisch und  $\omega$  linear ist. Da  $k^2$  durch die zweite Ableitung nach  $x$  und  $\omega$  durch die Ableitung nach  $t$  erzeugt wird, erhalten wir für die Schrödinger-Gleichung folgenden Ansatz:

$$\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x, t)\psi(x, t).$$

Mit dem Ansatz einer komplexwertigen harmonischen Welle  $\psi(x, t) = \hat{\psi} e^{i(kx - \omega t)}$  erhalten wir:

$$-i\hbar\omega = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x, t),$$

was nicht mit der quantenmechanischen Energie-Impuls-Beziehung für massive Teilchen entspricht. Dazu muss die linke Seite noch mit  $i$  und der erste Term auf rechte Seite mit  $(-1)$  multipliziert werden. Dann erhält man wieder:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V.$$

Daher postulieren wir nun die eindimensionale Schrödinger-Gleichung als:

**Ges. 9:** (1-dim. zeitabhängige Schrödinger-Gleichung) Die 1-dim. zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für eine Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  mit dem Potential  $V(x, t)$  ist

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x, t)\psi(x, t)$$

Man kann sagen, dass die Schrödinger-Gleichung die differentielle Form der Energieerhaltung für massive Teilchen ist.

Wir betrachten nur zeitunabhängige Potentiale, d. h.  $V(x, t) \equiv V(x)$ . In diesem Fall kann die Schrödinger-Gleichung stark vereinfacht werden. Diese soll nun hergeleitet werden. Dazu trennen wir die Variablen

$$\psi(x, t) = \vartheta(x)\phi(t).$$

Durch Einsetzen in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung erhalten wir:

$$i\hbar\vartheta(x) \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\vartheta(x)}{\partial x^2}\phi(t) + V(x)\vartheta(x)\phi(t).$$

Wir dividieren durch den Ansatz  $\psi(x, t) = \vartheta(x)\phi(t)$  und erhalten:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\vartheta(x)} \frac{\partial^2\vartheta(x)}{\partial x^2} + V(x).$$

Diese Gleichung hat eine besondere Eigenschaft. Die linke Seite hängt nur von  $t$  und die rechte Seite nur von  $x$  ab, also müssen beide Seiten konstant sein. Nennen wir diese Separationskonstante  $E$ , so erhalten wir

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = E \Leftrightarrow \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\phi(t) \Rightarrow \phi(t) = \hat{\phi}e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

Für die ortsabhängige Grösse erhalten wir:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\vartheta(x)} \frac{\partial^2\vartheta(x)}{\partial x^2} + V(x),$$

Damit ist die eindimensionale zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

**Ges. 10:** (1-dim. zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung) Die 1-dim. zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  mit dem Potential  $V(x)$  und der stationären Energie  $E$  ist

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x) + V(x)\psi(x).$$

Wir betrachten nun einige Anwendungen, die häufig zu Beginn gelöst werden. Das ist zum einen das Teilchen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden und dann mit endlich hohen Wänden. Dann betrachten wir die Reflexion und Transmission an der Potentialebene und an der Potentialbarriere.

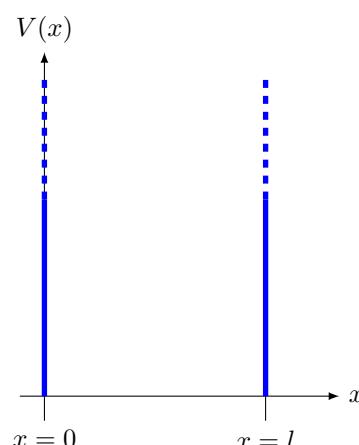
### Teilchen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Das Teilchen im Potentialtopf hat auf den ersten Blick nichts mit der Realität zu tun. Aber das stimmt gar nicht. Denn es ist der erste Schritt zum Verständnis des Wasserstoffatoms. Das Potential für das Elektron ist ganz ähnlich wie ein Topf mit Wänden. Nur dass für das Elektron im Atom nur eine Wand unendlich hoch ist und die andere endlich hoch. Die Kombination der beiden Ergebnisse bringt uns also dem Wasserstoff-Atom einen grossen Schritt näher.

Ein Potentialtopf  $V(x)$  der Breite  $l$  mit unendlich hohen Wänden kann mathematisch wie folgt parametrisiert werden:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < l \\ \infty & x \leq 0 \text{ oder } x \geq l. \end{cases}$$

Das Potential sieht somit wie folgt aus:



Da die Wände unendlich hoch sind, kann sich das Teilchen nur innerhalb des Kastens bewegen. Wir erhalten also für die Schrödinger-Gleichung im Kasten:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x).$$

Äquivalent dazu ist die Gleichung:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \equiv -k^2\psi(x),$$

wobei  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  festgelegt wird. Diese Gleichung entspricht wieder dem harmonischen Oszillator und wir erhalten natürlich wieder den Ansatz:

$$\psi(x) = \hat{\psi} \sin(kx + \varphi).$$

Betrachten wir nun die Randbedingungen, um sowohl  $k$  als auch  $\varphi$  festzulegen. Es gelten für die Ränder  $x = 0$  und  $x = l$ :

$$\psi(x = 0) = 0 \Rightarrow \psi(0) = \hat{\psi} \sin(\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = 0$$

und

$$\psi(x = l) = 0 \Rightarrow \psi(l) = \hat{\psi} \sin(kl) = 0 \Rightarrow k_n = n \frac{\pi}{l}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Somit lautet die Funktion  $\psi(x)$ :

$$\psi(x) = \hat{\psi} \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right).$$

Damit die Funktion vollständig ist und auch physikalisch sinnvoll ist, muss die Normierungsbedingung für die Wahrscheinlichkeitsdichte erfüllt sein, d. h.

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

Durch einsetzen und berücksichtigen des Definitionsbereichs erhalten wir:

$$\int_0^l \hat{\psi}^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = 1.$$

Mithilfe von Tabellen oder dem Taschenrechner erhalten wir für die linke Seite:

$$\hat{\psi}^2 \frac{l}{2} = 1 \Rightarrow \hat{\psi} = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Damit kriegen wir für die Wellenfunktion im Potentialtopf der Länge  $l$  folgende Funktionen:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \quad \text{mit } n = 1, 2, 3, \dots$$

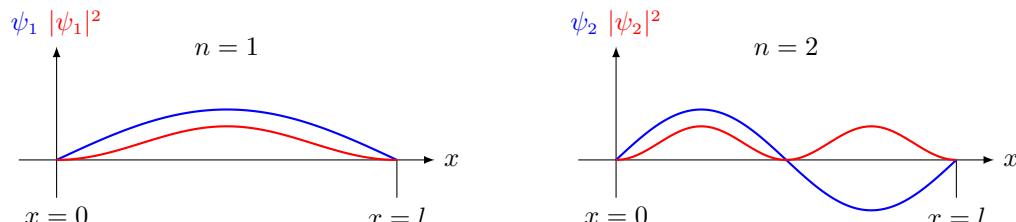
und die Energieniveaus  $E_n$  erhalten wir direkt aus:

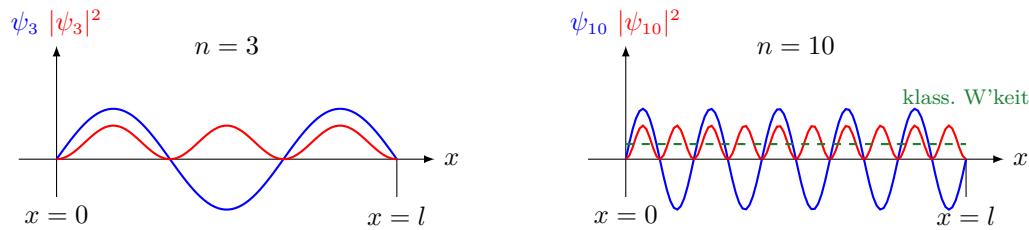
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \underbrace{\frac{\hbar^2}{8ml^2}}_{=E_1} \Rightarrow E_n = n^2 E_1,$$

mit

$$E_1 = \frac{(hc)^2}{8mc^2 l^2} \approx 37.6 \text{ eV},$$

wobei wir  $hc \approx 1240 \text{ eV nm}$ ,  $mc^2 \approx 0.511 \text{ MeV}$  und  $l \approx 0.1 \text{ nm}$  festlegen.  $n$  ist die Quantenzahl des Systems. Betrachten wir für  $n = 1, 2, 3$  und  $n = 10$  jeweils die Wellenfunktion  $\psi$  und die Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi|^2$ .





Es ist zu erkennen, dass sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten immer mehr der klassischen Situation annähern. Man vergleiche die gestrichelte Linie mit der roten. Dies wurde bereits von Bohr erkannt und formuliert:

**Ges. 11: (Bohrsches Korrespondenzprinzip)** Im Grenzfall grosser Quantenzahlen ergeben quantenmechanische und klassische Rechnungen dasselbe Resultat.

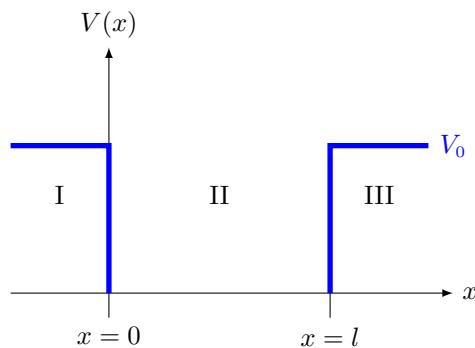
Das Verhalten im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden lässt sich klassisch noch sehr gut verstehen, abgesehen davon, dass die Energieniveaus quantisiert sind und wir für kleine Quantenzahlen das Teilchen nicht überall mit gleicher Wahrscheinlichkeit finden. Sobald wir aber die Wände endlich machen, ergeben sich ganz neue, klassisch nicht vorhersehbare Konsequenzen.

### Teilchen im Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

Das Teilchen im Potentialtopf mit endlich hohen Wänden ist ein weiterer Schritt zum Verständnis des Wasserstoffatoms. Dazu betrachten wir das folgende Potential  $V(x)$ :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < l \\ V_0 & x \leq 0 \text{ oder } x \geq l. \end{cases}$$

Das Potential sieht somit wie folgt aus:



Um dieses Problem zu lösen, müssen wir zwei Fälle betrachten, von denen der erste sehr schnell behandelt werden kann. Die Energie des Teilchens im Potentialtopf kann grösser ( $E > V_0$ ) oder kleiner ( $E \leq V_0$ ) sein als die potentielle Energie  $V_0$ .

Im ersten Fall, in dem das Teilchen eine Energie  $E > V_0$  hat, ist es frei und daher nicht quantisiert. Im zweiten Fall ist die Situation anders. Hier müssen wir drei Bereiche unterscheiden. Zum einen für  $x \leq 0$  den Bereich I, für  $0 < x < l$  den Bereich II und für  $x \geq l$  den Bereich III, wobei Bereich I und III bis auf das Vorzeichen identisch sind.

Für den Bereich II erhalten wir natürlich die gleichen Lösungen wie für das Potential mit unendlich hohen Wänden, d. h. aus der Schrödinger-Gleichung erhalten wir ebenfalls:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x),$$

wobei

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

ist. Daraus ergibt sich natürlich der gleiche Ansatz für die Wellenfunktion  $\psi_{II}$  im Bereich II, nämlich

$$\psi_{II}(x) = \hat{\psi}_{II} \sin(kx + \varphi).$$

Zu beachten ist hier jedoch, dass die Randbedingungen nicht mehr die gleichen sind, wie bei unendlich hohen Wänden. Bevor wir diese betrachten, schauen wir uns noch den Bereich I resp. III an. Hier lautet die

zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x).$$

Durch analoge Umformungen erhalten wir:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\psi(x) \equiv \alpha^2\psi(x),$$

wobei  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$  ist. Da nun die rechte Seite positiv ist, haben wir keinen harmonischen Oszillator mehr und die Lösung ist eine reale Exponentialfunktion. Also gilt:

$$\psi_I(x) = \hat{\psi}_I e^{\alpha x} \quad \text{und} \quad \psi_{III}(x) = \hat{\psi}_{III} e^{-\alpha x}.$$

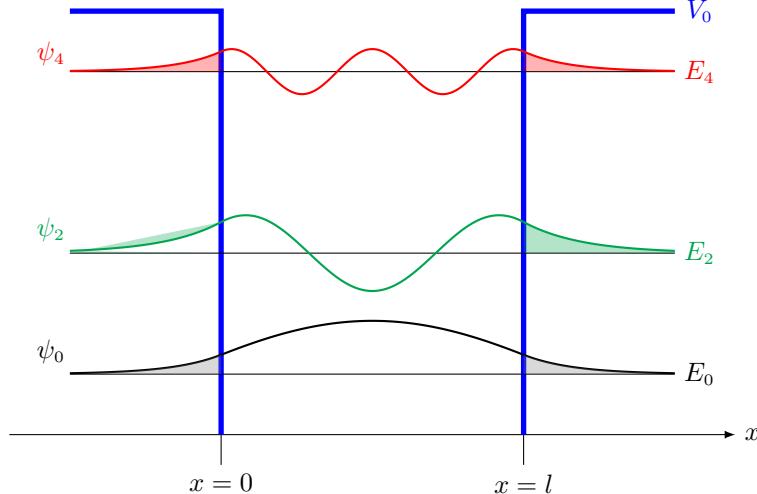
Das Vorzeichen der Exponentialfunktion wird durch die Normierbarkeit festgelegt. Um die Konstanten festzulegen brauchen wir noch die Randbedingungen. Dazu muss beachtet werden, dass die Wellenfunktion  $\psi = \psi_I + \psi_{II} + \psi_{III}$  stetig und überall mindestens einmal differenzierbar sein muss. Man könnte auch sagen, dass der Impuls der Wellenfunktion stetig sein muss. Daraus erhalten wir folgende Bedingungen:

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) = \hat{\psi}_I \quad \text{und} \quad \psi_{II}(x=l) = \psi_{III}(x=l) = \hat{\psi}_{III}$$

und

$$\frac{d\psi_I}{dx}(x=0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(x=0) \quad \text{und} \quad \frac{d\psi_{II}}{dx}(x=l) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(x=l)$$

Das Lösen dieses Gleichungssystems überlassen wir der Hochschule und schauen uns qualitativ die symmetrischen<sup>25</sup> Lösungen an.



Man erkennt an diesen Wellenfunktionen, dass man in den klassischen unzulässigen Bereich  $x \leq 0$  und  $x \geq l$  eindringt. Die Wahrscheinlichkeit ist klein, aber nicht Null. Obwohl die kinetische Energie des Teilchens kleiner als das Potential ist, kann es dieses überwinden. Das wäre so, als würde ein Ball, dem man zu wenig Energie gibt, trotzdem über eine Mauer fliegen. Quantenmechanisch ist dies möglich und kann durch die Unschärferelation erklärt werden, was wir jedoch dem Lesen überlassen.

Betrachten wir nun die Potentialstufe und den Spezialfall der Potentialbarriere, der uns zum interessanten Tunneleffekt führen wird.

<sup>25</sup>Das Lösen dieses Gleichungssystems vereinfacht sich sehr, wenn man die Symmetrie des Potentials ausnutzt und die Ansätze in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Fall aufteilt. Für Interessierte lautet die symmetrische Lösung:

$$\psi_s(x) = \hat{\psi}_s \cdot \begin{cases} e^{\alpha(x-l/2)} & x \leq 0 \\ \frac{e^{-\alpha l/2}}{\cos(-kl/2)} \cdot \cos(k(x-l/2)) & 0 < x < l \\ e^{-\alpha(x-l/2)} & x \geq l, \end{cases}$$

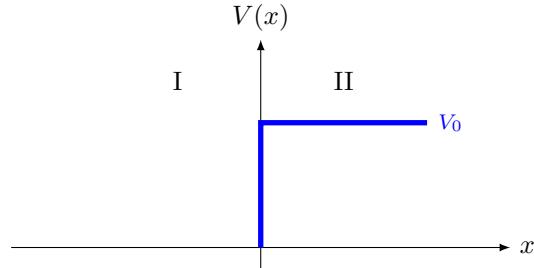
wobei  $\hat{\psi}_s$  durch die Normierungsbedingung definiert wird und für  $\alpha = -k \cdot \tan(-kl)$  gilt.

### Reflexion und Transmission an der Potentialstufe

Wir betrachten in diesem dritten Beispiel die Potentialstufe  $V(x)$ , wobei für die Stufe folgende Bedingung gilt:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0. \end{cases}$$

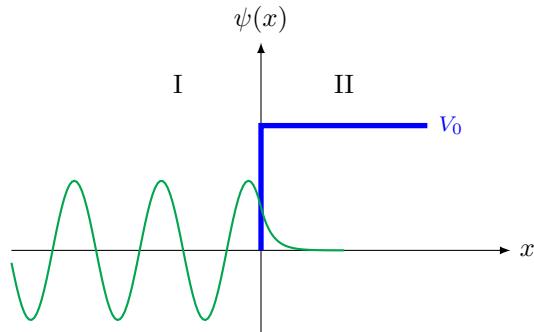
Das Potential sieht somit wie folgt aus:



Bevor wir uns dem quantenmechanischen Phänomen zuwenden, betrachten wir den klassischen Fall. Was passiert mit einem Körper, der sich mit der Geschwindigkeit  $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$  auf eine Potentialschwelle zu bewegt? Dies könnte eine Knetmasse sein mit einer bestimmten dicke. Je dicker die Masse, desto grösser die Potentialschwelle. Nun wenn die kinetische Energie des Teilchen grösser ist als die Potentialschwelle, dann wird das Teilchen die Knetmasse durchbohren und hinten mit einer reduzierten Geschwindigkeit  $v' = \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$  weiter fliegen. Ist die Energie jedoch kleiner, dann wird das Teilchen reflektiert oder nur etwas Eindringen.

Nun betrachten wir das quantenmechanischen Phänomen. Auch in diesem Fall müssen wir zwei Fälle unterscheiden, zum einen, wenn die Energie  $E$  des Teilchens grösser ist als die Potentialschwelle  $V_0$  oder kleiner.

Sei  $E \leq V_0$  dann liegt ein ähnliches Resultat vor, wie für den Potentialtopf. Die Welle wird vollständig reflektiert und dringt nur ein wenig in die Wand ein, mit einer exponentiell abfallenden Wahrscheinlichkeit. Dies sieht etwa wie folgt aus:



und ist dem klassischen Ergebnis sehr ähnlich. Obwohl hier ein Teil der Wellenfunktion in die Barriere eindringt und scheinbar transmittiert wird, ist die Reflexionswahrscheinlichkeit immer noch eins, d.h. die Welle wird vollständig reflektiert. Betrachten wir dazu die folgende [Animation der Potentialstufe](#).

Sei nun  $E > V_0$ , dann müssen wir die Schrödinger-Gleichung in den Bereichen I und II lösen. Für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gilt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Etwas umgeformt erhalten wir:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) \equiv -k_{I,II}^2\psi(x),$$

wobei die Wellenzahl  $k_{I,II}$ :

$$k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{und} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}.$$

Mit diesen beiden Wellenzahlen können wir die Wellenfunktionen in den beiden Bereichen definieren. Für den Bereich  $x < 0$  haben wir die einfallende Welle, die sich nach rechts ausbreitet, und die reflektierte Welle, die sich nach links ausbreitet.

$$\psi_I(x) = Ae^{-ik_I x} + Be^{ik_I x}.$$

Für den Bereich  $x \geq 0$  erhalten wir nur eine Welle, die sich nach rechts bewegt, d. h.

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-ik_{\text{II}}x}.$$

Durch die Stetigkeitsbedingung für die Wellenfunktion und deren Ableitung, erhalten wir zwei Beziehungen zwischen  $A$ ,  $B$  und  $C$ . Es gilt:

$$\psi_{\text{I}}(x=0) = \psi_{\text{II}}(x=0) \quad \Rightarrow \quad A + B = C$$

und

$$\psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0) \quad \Rightarrow \quad (A - B)k_I = Ck_{II}.$$

Daraus erhalten wir die folgenden zwei Beziehungen für  $A$  und  $B$ :

$$A = \frac{C}{2} \left( 1 + \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} \right) \quad \text{und} \quad B = \frac{C}{2} \left( 1 - \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} \right).$$

Eine dritte Bedingung ergibt sich aus der Normierbarkeit. Sie wird hier jedoch nicht benötigt, da wir nur die Reflexionswahrscheinlichkeit  $R$  und die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$  bestimmen wollen. Diese werden durch die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j$  definiert.

**Def. 7:** (Wahrscheinlichkeitsstromdichte) Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j$  ist in der Quantenmechanik definiert als:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right).$$

Betrachten wir dazu gleich ein Beispiel.

Bsp. xii.

Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j$  für eine ebene Welle der Form  $\psi(x) = Ae^{ikx}$ .

Lsg: —

Um die Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten berechnen zu können, müssen diese zunächst definiert werden. Für die allgemeine Übergangswahrscheinlichkeit gilt

**Def. 8:** (*Übergangswahrscheinlichkeit*) Die Übergangswahrscheinlichkeit  $U$  ist definiert, als das Verhältnis aus der auslaufenden Stromdichte  $j_A$  und der einlaufenden Stromdichte  $j_E$ , d. h.

$$U = \left| \frac{j_A}{j_E} \right|.$$

Damit erhalten wir für die Reflexionswahrscheinlichkeit  $R$ :

$$R = \left| \frac{j_A}{j_E} \right| = \frac{\frac{\hbar}{m} |B|^2 k_I}{\frac{\hbar}{m} |A|^2 k_I} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

und für die Transmissionswahrscheinlichkeiten  $T$ :

$$T = \left| \frac{j_A}{j_E} \right| = \frac{\frac{\hbar}{m} |C|^2 k_{II}}{\frac{\hbar}{m} |A|^2 k_I} = \frac{|C|^2 k_{II}}{|A|^2 k_I}.$$

Mit den beiden Beziehungen von oben erhalten wir:

$$R = \frac{(k_I - k_{II})^2}{(k_I + k_{II})^2} \quad \text{und} \quad T = \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2}.$$

Es ist einfach zu verifizieren, dass die Normierungsbedingung erfüllt ist. Es gilt:

$$R + T = 1.$$

Setzen wir die Terme für  $k_I$  und  $k_{II}$  in  $R$  und  $T$  ein und formen etwas um, dann erhalten wir:

$$R = \frac{1 - \frac{V_0}{2E} - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 - \frac{V_0}{2E} + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} = \begin{cases} 1, & E = V_0 \\ 0, & E \gg V_0 \end{cases}$$

und

$$T = \frac{2\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 - \frac{V_0}{2E} + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} = \begin{cases} 0, & E = V_0 \\ 1, & E \gg V_0. \end{cases}$$

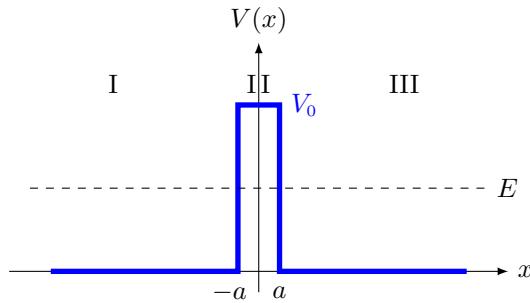
Auch dazu können wir diese [Animation der Potentialstufe](#) betrachten, wobei wir jetzt die Energie erhöhen. Zum Schluss betrachten wir noch die Potentialbarriere.

### Transmission an Potentialbarriere

In diesem letzten Beispiel betrachten wir noch die Potentialbarriere  $V(x)$ , wobei für die Barriere folgende Bedingung gilt:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 & -a \geq x \geq a \\ 0 & x > a. \end{cases}$$

Das Potential sieht somit wie folgt aus:



Bevor wir zur quantenmechanischen Betrachtung dieses Phänomens kommen, wollen wir uns kurz überlegen, wie die klassische Version aussehen würde, wenn die Energie des Teilchens kleiner als die Energie des Potentials wäre. Die Antwort ist einfach. Das Teilchen würde sich nur im Bereich I befinden, da es die Barriere niemals überwinden könnte. In der Welt der Quanten ist das etwas anders.

In diesem letzten Beispiel betrachten wir direkt den interessanten Fall, dass die Energie  $E$  des Teilchens kleiner ist als die Potentialbarriere  $V_0$ , also  $E < V_0$ . Wie wir bereits aus der Abbildung ersehen können, werden wir auch hier die Wellenfunktion in den Bereichen einzeln betrachten. Wir müssen die Schrödinger-Gleichung in den Bereichen I, II und III lösen. Für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung gilt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Etwas umgeformt erhalten wir:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) \equiv -k_{I,II,III}^2\psi(x),$$

wobei die Wellenzahl  $k_{I,II,III}$ :

$$k_I = k_{III} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{und} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}.$$

Mit diesen zwei Wellenzahlen können wir die Wellenfunktionen in beiden Bereichen festlegen. Für den Bereich I mit  $x < -a$  haben wir die einfallende Welle, die sich nach rechts bewegt und die reflektierte Welle, die sich nach links bewegt, d. h.

$$\psi_I(x) = A e^{-ik_I x} + B e^{ik_I x}.$$

Für den Bereich II mit  $-a \geq x \geq a$  erhalten wir ebenfalls zwei Wellen, eine nach rechts und eine nach links laufende Welle, d. h.

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-ik_{\text{II}}x} + De^{ik_{\text{II}}x}.$$

Für den Bereich III mit  $x > a$  haben wir nur eine nach rechts laufende Welle, d. h.

$$\psi_{\text{III}}(x) = Ee^{-ik_1x}.$$

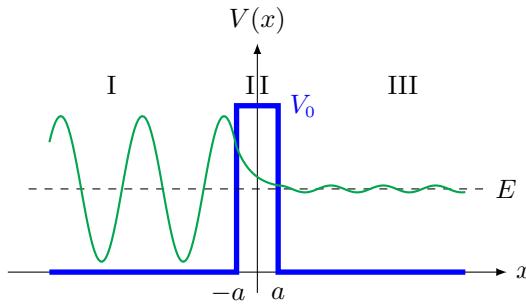
Da  $k_{\text{II}}$  imaginär ist, wird in der Regel nicht mit  $k_{\text{II}}$  weiter gerechnet, sondern mit dem reellen  $\kappa$ , d. h.

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

Daher ändert sich auch die Wellenfunktion  $\psi_{\text{II}}$  zu:

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}.$$

Die Wellenfunktionen sehen qualitativ wie folgt aus:



Aus dieser qualitativen Grafik ist ersichtlich, dass das Teilchen auch im Bereich III weiter existieren kann, bzw. dass eine nicht verschwindende Wahrscheinlichkeit besteht, Teilchen im klassisch verbotenen Bereich zu finden. Dieser Effekt heisst *Tunneleffekt*.

Betrachten wir nun - ohne Berechnung - die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Bereich III zu finden, also die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$ . Mit einer etwas komplizierteren Rechnung, aber im Prinzip analog zu oben, erhält man für  $T$ :

$$T = \left| \frac{j_A}{j_E} \right| = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(2\kappa a)}{4E(V_0 - E)}}.$$

Dieser Tunneleffekt macht z. B. den Zerfall von Atomkernen überhaupt erst möglich. D.h. der Alphazerfall ist klassisch nicht möglich, weil der Kern wegen der Energiebarriere der starken Wechselwirkung nicht zerfallen darf. Quantenmechanisch jedoch ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen hinter der Barriere zu finden, ungleich Null. Hat das Alphateilchen die Barriere überwunden, wird es durch die elektromagnetische Kraft endgültig vom Kern abgestossen.

Eine weitere Anwendung aus der Biologie findet sich im genetischen Code der DNA. Durch das Tunneln von Protonen in der DNA-Kette kommt es zu sogenannten spontanen Mutationen, die, wie wir wissen, für die Evolution entscheidend sind.

Ein unerwünschtes Tunneln tritt bei elektronischen Speichermedien auf. Wenn die Bereiche zu nahe beieinander liegen, können durch den Tunneleffekt Elektronen von einem Bereich in den anderen gelangen und dabei ihren Zustand ändern, was zu einem Fehler in der Datenstruktur führt. Dazu ein Beispiel:

### Bsp. xiii.

Ein Elektron mit der Energie von 6 eV kommt einer Potentialbarriere von 12 eV näher. Wenn die Breite der Barriere 0.18 nm ist, wie gross ist dann die Transmissionswahrscheinlichkeit?

Lsg:  $T \approx 4.2\%$

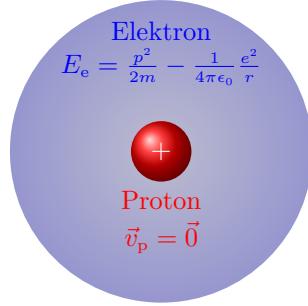
**Lösung:**

--

---

## 2.5 Wasserstoff-Atom

Zum Schluss möchten wir ansatzweise das Wasserstoff-Atom lösen. Wieso genau das Wasserstoff-Atom? Nun zum einen ist es das einfachste Atom und zum anderen ist es das einzige Atom, welches man ohne Näherung lösen kann. Die Situation sieht wie folgt aus:

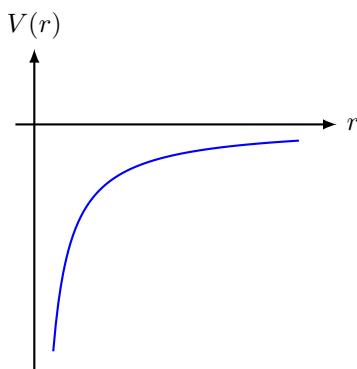


Wie wir gelernt haben, ist das Elektron nicht an einem bestimmten Ort lokalisiert, sondern wir können nur die Aufenthaltswahrscheinlichkeit angeben. Diese ist für den niedrigsten Energiezustand kugelförmig.

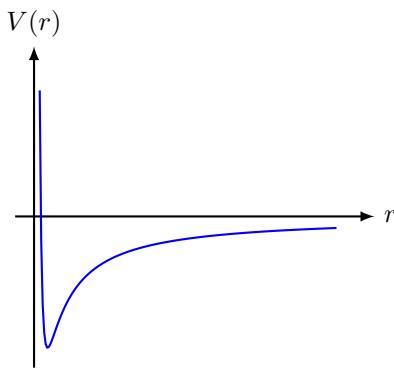
Um die verschiedenen Energieniveaus im Wasserstoffatom zu bestimmen, müssen wir die Schrödinger-Gleichung lösen. Da es sich um ein dreidimensionales Problem handelt, erhält man für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)\psi = E\psi,$$

wobei  $E = E_{\text{kin}} + V$  ist. Zur Veranschaulichung der potentiellen Energie  $V$  wird im Folgenden die potentielle Energie als Funktion des Abstandes  $r$  dargestellt.

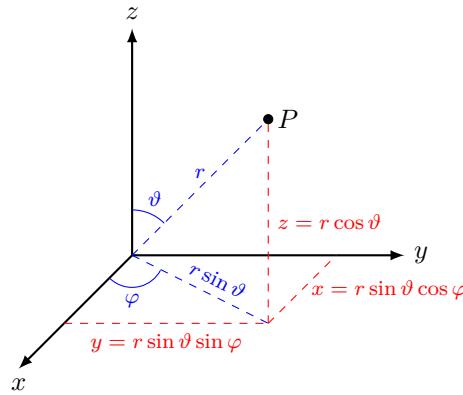


Das hier gezeigte Coulomb-Potential ist allgemein bekannt. Für alle anderen Atome gilt jedoch, dass die potentielle Energie noch einen abstoßenden Term aufweist, der nicht durch einen anziehenden Term kompensiert wird. Die gegenseitige Abstoßung der Elektronen ist dafür verantwortlich. Diese potentielle Energie sieht wie folgt aus:



Die Grafik zeigt ein Verhalten, wie in den vorangegangenen Beispielen. Die linke Seite der Funktion ähnelt in ihrer Darstellung einem Potentialtopf mit unendlich hoher Wand, während die rechte Seite eine endlich hohe Wand zeigt.

Bei Betrachtung der Schrödinger-Gleichung und der Abbildung zum Wasserstoffatom wird deutlich, dass das Problem eher in Kugelkoordinaten als in kartesischen gelöst werden sollte. Daher werden die Kugelkoordinaten  $r, \vartheta, \varphi$  verwendet. Die Festlegung der Koordinaten erfolgt üblicherweise in der hier dargestellten Form:



Daraus erhalten wir die folgenden Transformationen:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= r \cos \vartheta. \end{aligned}$$

Die Umrechnung der Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten soll hier nicht hergeleitet werden, da sie sehr umständlich ist und im Grunde keine neuen Erkenntnisse bringt. Wir erhalten dann:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + V(r)\psi = E\psi,$$

Es handelt sich um eine sehr spezielle Differentialgleichung, die durch einen Separationsansatz gelöst werden kann. Das Besondere an dieser Gleichung ist, dass jede Ableitung unabhängig von den anderen Ableitungen ist. Weitere Erklärungen dazu finden sich im Anhang M.4.2.1.

Aus diesem Grund ist es möglich, den folgenden Produktansatz zu wählen, bei dem jede einzelne Funktion nur von einer Variablen abhängt, d.h.:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)f(\vartheta)g(\varphi).$$

Wendet man diesen Ansatz an, so wird die DGL entkoppelt und man erhält drei DGL, die jeweils nur noch von einer Variablen abhängen und somit einfacher zu lösen sind.

Wie bereits für das Kastenpotential gezeigt wurde, hängen die Lösungen der verschiedenen Energieniveaus von der Quantenzahl  $n$  ab. Analog erhalten wir hier nicht nur eine, sondern drei Quantenzahlen:

- DGL für  $R(r)$  ergibt die Hauptquantenzahl  $n$ , mit  $n = 1, 2, 3, \dots$
- DGL für  $f(\vartheta)$  ergibt die Bahndrehimpulsquantenzahl  $l$ , mit  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$  und
- DGL für  $g(\varphi)$  ergibt die magnetische Quantenzahl  $m$ , mit  $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$

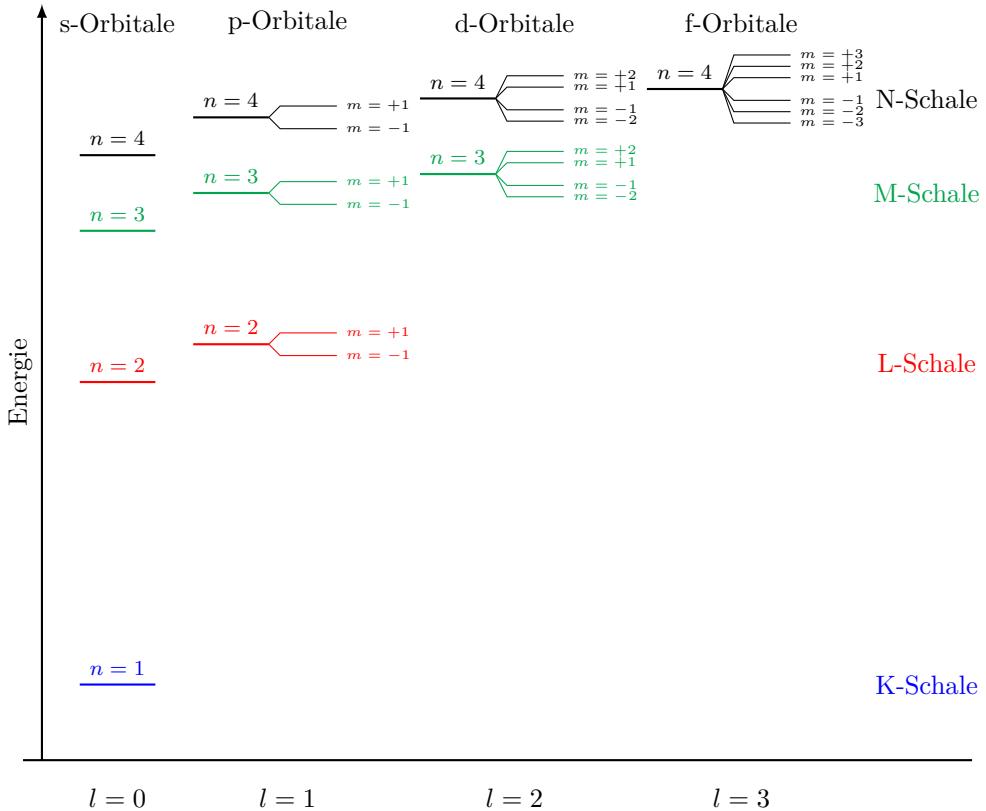
Daraus kann der gesamte Bahndrehimpuls  $L$  berechnet werden:

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

und eine Komponente des Drehimpulses, z. B. die  $z$ -Komponente mit dem Magnetfeld  $\vec{B} = \vec{B}_z$ ,  $L_z$ :

$$L_z = m\hbar.$$

Daraus sollten sich die folgenden Energieniveaus für das Elektron ergeben, obwohl, wie ich später zeigen werde, die Natur diese intuitive Lösung nicht gewählt hat.



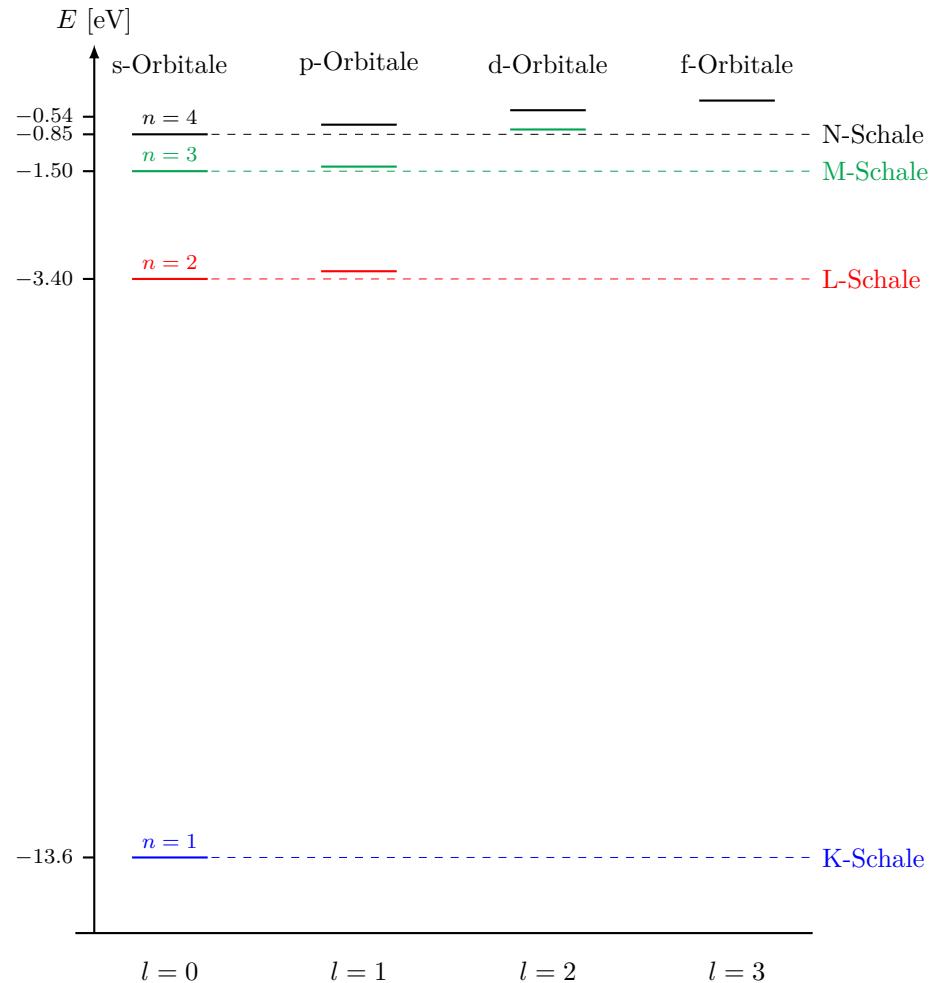
Wenn wir nun die Energieniveaus mit Elektronen füllen, können wir den Aufbau des Periodensystems der Elemente besser verstehen. Betrachten wir dazu den oberen Teil des Periodensystems:

1 <b>H</b> 1s <sup>1</sup>						2 <b>He</b> 1s <sup>2</sup>
3 <b>Li</b> [He]2s <sup>1</sup>	4 <b>Be</b> [He]2s <sup>2</sup>					
11 <b>Na</b> [Ne]3s <sup>1</sup>	12 <b>Mg</b> [Ne]3s <sup>2</sup>					
19 <b>K</b> [Ar]4s <sup>1</sup>	20 <b>Ca</b> [Ar]4s <sup>2</sup>	21 <b>Sc</b> [Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>1</sup>				
			5 <b>B</b> [He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>	6 <b>C</b> [He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	7 <b>N</b> [He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	8 <b>O</b> [He]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>
			13 <b>Al</b> [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>1</sup>	14 <b>Si</b> [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>2</sup>	15 <b>P</b> [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>3</sup>	16 <b>S</b> [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>4</sup>
			31 <b>Ga</b> [Cu]4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	32 <b>Ge</b> [Cu]4s <sup>2</sup> 4p <sup>2</sup>	33 <b>As</b> [Cu]4s <sup>2</sup> 4p <sup>3</sup>	34 <b>Se</b> [Cu]4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>
					17 <b>Cl</b> [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup>	18 <b>Ar</b> [Ne]3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>
					35 <b>Br</b> [Cu]4s <sup>2</sup> 4p <sup>5</sup>	36 <b>Kr</b> [Cu]4s <sup>2</sup> 4p <sup>6</sup>

Wir sehen also, dass auf dem niedrigsten Energieniveau  $n = 1$  zwei Elektronen auf der K-Schale Platz haben, aber nicht mehr. Auf der L-Schale haben insgesamt acht Elektronen Platz. Wiederum nur zwei Elektronen im s - Orbital und weitere sechs Elektronen im p - Orbital. Es sieht so aus, als ob pro eingezeichneter Linie, d.h. Energieniveau, nur genau zwei Elektronen Platz haben. Dies lässt sich mit dem *Ausschlussprinzip* von Pauli erklären. Es besagt vereinfacht:

**Ges. 12:** (*Pauli-Prinzip*) Es können nie zwei Teilchen (sog. Fermionen) gleichzeitig einen Zustand mit denselben Quantenzahlen besetzen.

Da das Elektron ein Fermion ist, kann es nicht zwei Teilchen im gleichen Zustand haben. Nun werden Sie wahrscheinlich einwenden, warum es dann zwei Elektronen auf verschiedenen Energieniveaus hat. Das liegt daran, dass das Elektron eine weitere Eigenschaft hat, den sogenannten *Spin*, der nur zwei Einstellungen haben kann, sagen wir entweder noch *oben* oder nach *unten*. Eine etwas genauere Darstellung, die die Energieniveaus genau berechnet, sieht wie folgt aus



Man versteht, warum z. B. beim Kaliumatom zuerst das Energieniveau des s-Orbitals für  $n = 4$  aufgefüllt wird, bevor das d-Orbital für  $n = 3$  vollständig aufgefüllt wird.

Leider müssen wir hier mit der Quantenmechanik aufhören, obwohl sie jetzt erst richtig anfängt. Aber wenn Sie Physik studieren wollen, werden Sie noch viele interessante Vorlesungen darüber hören. Nun wollen wir uns noch einigen Gebieten der *angewandten* modernen Physik zuwenden, wie z. B. im nächsten Kapitel *Kern und Teilchen*.

## Zusammenfassung Kapitel I2

1. Das *Rayleigh-Jeans-Gesetz* beschreibt die Abhängigkeit der spezifischen Leistung  $P(\lambda, T)$  eines Schwarzen Körpers von der Lichtwellenlänge  $\lambda$  bei einer gegebenen Temperatur  $T$  im Rahmen der klassischen Elektrodynamik. Es gilt:

$$P(\lambda, T) = \frac{2ck_B T}{\lambda^4}.$$

2. Das *Wien'sche Verschiebungsgesetz* gibt an, bei welcher Wellenlänge  $\lambda_{\max}$  ein schwarzer Körper je nach seiner Temperatur  $T$  die grösste Strahlungsleistung abgibt. Es gilt:

$$\lambda_{\max} = \frac{2.898 \text{ mm K}}{T}.$$

3. Folgende zwei Hypothesen wurden von Max Planck formuliert:

- Von den Wänden des Hohlraumes kann Energie nicht in beliebigen Mengen absorbiert und emittiert werden, sondern nur in Form ganz bestimmter, kleiner diskreter Energie-Portionen, sogenannte *Energiequanten*.
- Die Energie  $E$  von einem solchen Quantum ist proportional zur Frequenz  $f$  der dabei absorbierten oder emittierten elektromagnetischen Strahlung, d. h.

$$E = hf,$$

wobei  $h \approx 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  der Proportionalitätsfaktor ist. Planck selbst hat den Faktor "Hilfsgrösse" genannt. Heute wird es ihm zu Ehren als *Planck'sches Wirkungsquantum* bezeichnet. Verbreiteter ist jedoch die äquivalente Formel:

$$E = \hbar\omega,$$

wobei  $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  ist.

Das *Planck'sche Strahlungsgesetz* beschreibt die abgestrahlte spezifische Leistung  $P(\lambda, T)$  eines Schwarzen Körpers als Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  für eine bestimmte Temperatur  $T$ , d. h.

$$P(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{kT\lambda}} - 1}.$$

4. Die maximale kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  eines *Photoelektrons*, welches durch Licht der Frequenz  $f$  von einem Festkörper mit der Austrittsarbeit  $W_A$  gelöst wird, ist

$$E_{\text{kin}} = hf - W_A.$$

5. Beim *Compton-Effekt* wird die Änderung der Wellenlänge betrachtet, welche durch Streuung von Licht an Elektronen gemessen wird. Es gilt:

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_C(1 - \cos\theta),$$

wobei  $\lambda_C = \frac{h}{mc} \approx 2.43 \text{ pm}$  die Compton-Wellenlänge ist. Beachten Sie, dass die Compton-Wellenlänge nur von Naturkonstanten abhängig ist und damit ist die Änderung der Wellenlänge unabhängig von der Wellenlänge des einfallenden Photons.

6. Die *Bohr'schen Postulate* lauten:

- Das Elektron bewegt sich im Atom auf *diskreten Bahnen* mit Energie  $E_n$ .
- Die Bewegung des Elektrons erfolgt *strahlungslös*. Beim *Übergang* des Elektrons von einem Zustand  $E_1$  zu einem Zustand  $E_2$  mit  $E_2 < E_1$  wird ein Photon der Frequenz  $f$  emittiert ( $E_2 < E_1$ ) oder absorbiert ( $E_2 > E_1$ ), es gilt:

$$f = \frac{|E_1 - E_2|}{h}.$$

- Der *Drehimpuls*  $L$  eines Elektrons in einem stationären Zustand nimmt nur diskrete Werte an. Es gilt:

$$L = \frac{n\hbar}{2\pi} = n\hbar,$$

wobei  $n = 1, 2, \dots$  ist.

7. Der *Bohr'sche Radius*  $a_0$  bezeichnet den Radius des Wasserstoff-Atoms im niedrigsten Energieniveau  $n = 1$ , d. h.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.05 \text{ nm}.$$

8. Die *Rydberg-Konstante*  $R_\infty$  entspricht der als Wellenzahl ausgedrückte Ionisierungsenergie des Wasserstoffs unter Vernachlässigung relativistischer Effekte und der Mitbewegung des Kerns (also unendlicher Kernmasse)

$$R_\infty = \frac{me^4}{(4\pi\hbar)^3\epsilon_0^2 c} \approx 1.097 \cdot 10^{-7} \text{ m}^{-1}.$$

9. Die Energie  $E_n$  des Elektrons im *Wasserstoff-Atom* im Niveau  $n$  ist gegeben als:

$$E_n = -hcR_\infty \cdot \frac{1}{n^2} = E_1 \cdot \frac{1}{n^2}$$

wobei  $E_1 = -hcR_\infty \approx -13.6 \text{ eV}$  die Ionisierungsenergie von Wasserstoff ist.

10. Die *De Broglie-Beziehung* besagt, dass Materie sowohl Teilchen- als auch Wellencharakter (sogenannte Materiewellen) hat. Ein Materieteilchen mit dem Impuls  $p$  hat die Wellenlänge  $\lambda$  und gehorcht der Beziehung:

$$p = \frac{\hbar}{\lambda}.$$

wobei  $\hbar$  das Planck'sche Wirkungsquantum ist.

11. Das Betragsquadrat einer beliebigen Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  ist proportional zur *Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte*  $P(x, t)$ , d. h.

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2,$$

wobei  $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) dx = 1$  sein muss.

12. Ein *Wellenpaket* ist eine Überlagerung von harmonischen Wellen mit einer kontinuierlichen Verteilung von Kreisfrequenzen und Wellenzahlen.

13. Die *Gruppengeschwindigkeit* eines Wellenpaketes ist die Geschwindigkeit der Einhüllenden, es gilt:

$$v_G = \frac{d\omega}{dk}.$$

Die *Phasengeschwindigkeit* eines Wellenpaketes ist die mittlere Geschwindigkeit der einzelnen Wellen, es gilt:

$$v_P = \frac{\omega}{k}.$$

14. Die *Heisenbergsche Unschärferelation* besagt, dass für das Produkt der Ortsunschärfe  $\Delta x$  und der Impulsunschärfe  $\Delta p$  folgendes gilt:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{2}.$$

Analog für die *Zeit-Energieunschärfe*. Für ein Zeitintervall  $\Delta t$  und eine Energiedifferenz  $\Delta E$  gilt:

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \frac{\hbar}{2}.$$

15. Die *1-dim. zeitabhängige Schrödinger Gleichung* für eine Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  mit dem Potential  $V(x, t)$  ist

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x, t)\psi(x, t).$$

Die 1-dim. *zeitunabhängige Schrödinger Gleichung* für eine Wellenfunktion  $\psi(x)$  mit dem Potential  $V(x)$  und der stationären Energie  $E$  ist

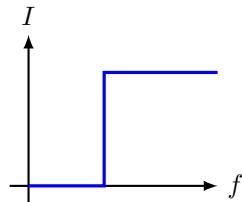
$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x) + V(x)\psi(x).$$

16. Die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*  $j$  ist in der Quantenmechanik definiert als:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right).$$

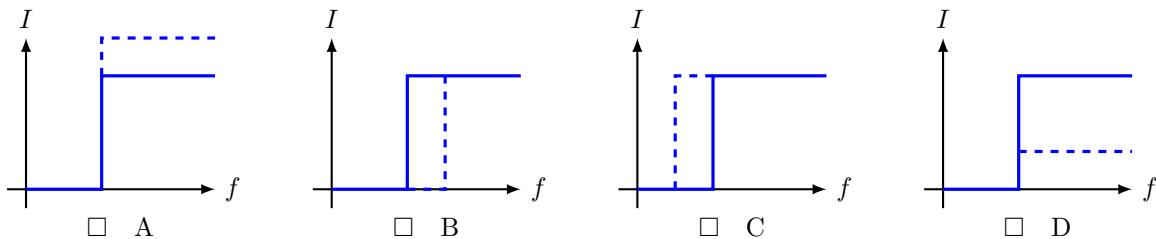
## Konzeptfragen Kapitel I2

1. In einem hypothetischen Experiment zur Demonstration des photoelektrischen Effekts wird eine Lichtquelle mit variabler Frequenz auf eine lichtempfindliche Oberfläche gestrahlt. Die ausgestossenen Photoelektronen werden von einer Anode aufgefangen. Ein Diagramm des resultierenden Fotostroms ( $I$ ) als Funktion der Frequenz ( $f$ ) sieht wie folgt aus:



Welches Diagramm wäre am besten geeignet, wenn

- a. die Intensität des Lichts erhöht wird?
- b. die Arbeitsfunktion der Oberfläche erhöht wird?

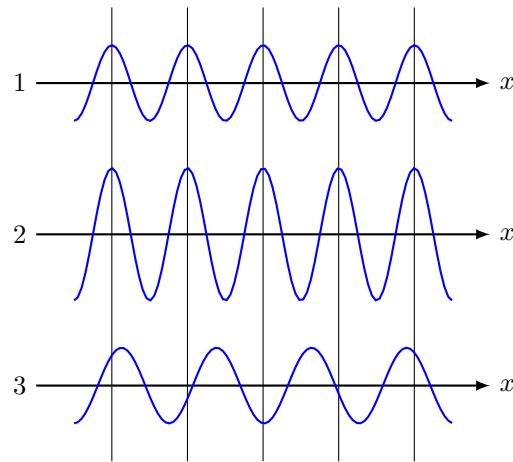


2. In einem Experiment zum Nachweis des photoelektrischen Effekts werden folgende Beobachtungen gemacht:

- Licht mit hoher Frequenz, das auf bestimmte Materialien trifft, bewirkt den Ausstoss von Elektronen; und
- wenn die Frequenz des Lichts (mit beliebiger Amplitude) verringert wird, gibt es eine Grenzfrequenz unterhalb derer die Elektronen nicht mehr herausgeschleudert werden.

Diese Beobachtungen sprechen eher für eine Teilchentheorie des Lichts als für eine Wellentheorie. Welche der folgenden Aussagen ist mit den Beobachtungen nicht vereinbar?

- In einer Teilchentheorie wird der Auswurf von Elektronen durch Kollisionen mit Photonen erklärt. Bei jeder Kollision kann ein einzelnes Elektron genügend Energie erhalten, um zu entkommen.
  - In einer Wellentheorie wird der Auswurf von Elektronen dadurch erklärt, dass die elektromagnetische Welle die Elektronen in Schwingung versetzt, wodurch einige Elektronen genügend Energie erhalten, um zu entkommen.
  - In einer Teilchentheorie wird der Cut-Off dadurch erklärt, dass die Photonen bei sehr niedrigen Frequenzen sehr geringe Energien haben und kein einzelnes Photon genug Energie hat, um ein Elektron auszustossen.
  - In einer Wellentheorie wird der Cut-Off dadurch erklärt, dass eine sehr niederfrequente Welle die Elektronen auch bei sehr hohen Amplituden nicht energisch genug in Schwingung versetzen kann.
3. Drei Teilchen mit gleicher Masse bewegen sich in dieselbe Richtung. Die de Broglie-Wellen der drei Teilchen sind wie folgt dargestellt.



Ordnen Sie die Geschwindigkeiten der Teilchen 1, 2 und 3, indem Sie eine der vier Möglichkeiten ankreuzen:

- $v_2 > v_1 > v_3$
- $v_2 > v_3 > v_1$
- $v_1 = v_2 > v_3$
- $v_2 > v_1 = v_3$

4. Die Heisenbergsche Unschärferelation wird meist auf sehr kleine Objekte wie Elektronen und Protonen angewendet. Warum wird die Unschärferelation nicht auf grössere Objekte wie Autos und Tennisbälle angewandt?

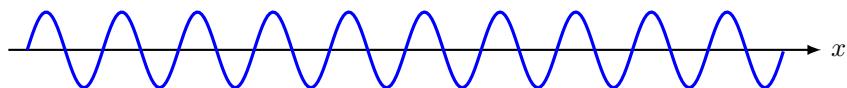
Wählen Sie die Antwort, die nach der Standardinterpretation (Kopenhagen) der Quantenmechanik am besten geeignet ist.

- Die Messfehler können im Prinzip immer kleiner gemacht werden, indem man empfindlichere Geräte verwendet.
- Grosse Objekte haben zu jedem Zeitpunkt eine exakte Position und einen exakten Impuls, und mit ausreichender Sorgfalt können wir beides genau messen.
- Grosse Objekte gehorchen den Newtonschen Bewegungsgesetzen, auf die die Unschärferelation nicht anwendbar ist.
- Weil die Unschärferelation zwar für grosse Objekte gilt, aber die Unsicherheiten so gering sind, dass wir sie nicht bemerken.

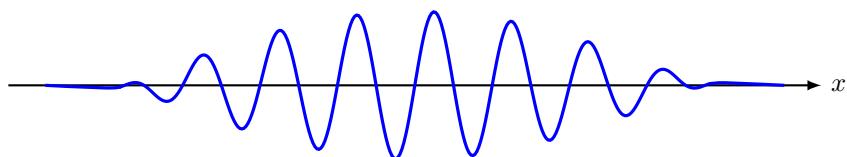
5. Wählen Sie für jedes Wellenpaket im Ortsraum die Beschreibung aus A bis D, die das abgebildete Wellenpaket am besten beschreibt.

- A. Schlecht definierte Position, gut definierte Wellenlänge
- B. Gut definierte Position, schlecht definierte Wellenlänge
- C. Gut definierte Position, gut definierte Wellenlänge
- D. Schlecht definierte Position, schlecht definierte Wellenlänge

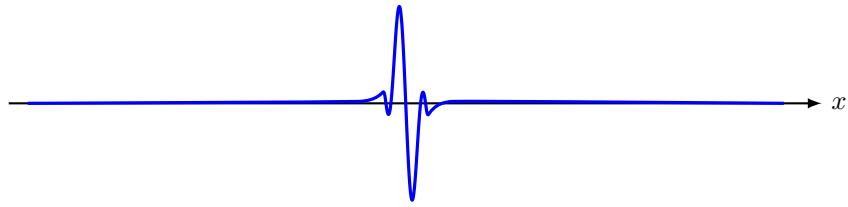
- a. Das erste Wellenpaket:



- b. Das zweite Wellenpaket:



- c. Das dritte Wellenpaket:



6. Welche der folgenden Aussagen zum Doppelspaltexperiment mit Elektronen ist nach der Standardinterpretation (Kopenhagen) der Quantenmechanik zutreffend?

- Es ist prinzipiell möglich zu messen, welchen Spalt ein Elektron durchlaufen hat, und trotzdem ein Mehrfachstreifenmuster zu sehen, wenn die Technik ausgereift genug ist.
- Jedes Elektron muss durch den einen oder den anderen Spalt gegangen sein, aber es ist unmöglich zu messen, durch welchen Spalt ein bestimmtes Elektron gegangen ist.
- Es ist möglich zu messen, durch welchen Spalt ein Elektron gegangen ist, aber wenn man diese Messung durchführt, bildet der Elektronenstrahl nicht mehr das Mehrfachstreifenmuster auf dem Bildschirm.

## Aufgaben Kapitel I2

Weitere einfache Aufgaben mit ausführlichen Lösungen findet man unter:

<https://www.dropbox.com/sh/m9vlo6gwqli3nds/AABWhKMXUJG70jsXx7ovB-fDa?dl=0> in den Kapiteln 42, 43 & 44.



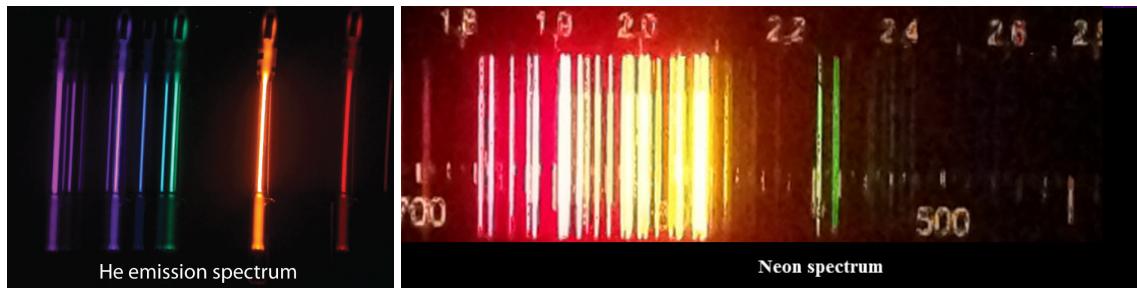
- "Wenn beim photoelektrischen Effekt bei konstanter Lichtfrequenz die Lichtleistung geändert wird, ändert sich bei den losgelösten Elektronen ..."

Schreiben Sie den Satz zu Ende, indem Sie **jedem** Teil aus A **einen richtigen** Teil aus B anfügen.

A	B
... die Anzahl	proportional zur Lichtleistung.
... die kinetische Energie	nicht proportional zur Lichtleistung.
... die Geschwindigkeit	gar nicht.

**Lsg:** Anzahl → prop., kin. E → gar nicht und Geschw. → gar nicht.

- Betrachten Sie das Spektrum von Helium (links) und Neon (rechts).



- Erläutern Sie, was Sie in diesen Spektren sehen mithilfe des Bohrschen Atommodells.
- Wie erklären Sie sich den Unterschied zwischen den beiden Spektren?

**Lsg:** –

- Zeigen Sie, dass ein Photon nicht seine gesamte Energie an ein einzelnes freies Elektron abgeben kann, indem Sie die Impuls- und Energieerhaltung bei einem Stoßprozess eines Photons mit einem Elektron untersuchen.

**Lsg:** –

- Leiten Sie aus den drei Bohrschen Postulaten die Elektronenergien

$$E_n = -\frac{e^4 m}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}$$

her.

**Lsg:** –

- Beantworten Sie folgende Fragen in kurzen Sätzen und verwenden Sie dazu die nötigen Fachbegriffe.

- Was ist der Unterschied zwischen der Gruppengeschwindigkeit und der Phasengeschwindigkeit?
- Was bedeutet die Orts- und Impuls-Unschärferelation?
- Wie lässt sich ein massives Teilchen durch Wellenfunktionen beschreiben und weshalb? Wie löst man das Problem, dass ein massives Teilchen hin und wieder lokalisiert ist?
- Was stellt die Schrödinger-Gleichung dar? oder welches fundamentale physikalische Gesetz manifestiert sich in der Schrödinger-Gleichung?

**Lsg:** –

6. Beantworten Sie folgende Fragen:

- Ein Elektron besitze die kinetische Energie  $E_{\text{kin}} = 1 \text{ keV}$ . Wie gross ist  $k$  und  $\omega$ ?
- Wie gross ist die Unschärfe in der Energie der Photonen, die beim Zerfall eines angeregten Atomzustands der Lebensdauer  $\Delta t = 10^{-7} \text{ s}$  emittiert werden?
- Wie gross ist die De-Broglie-Wellenlänge eines Elektrons, das aus dem Ruhezustand eine Spannung von  $U = 200 \text{ V}$  durchläuft und dadurch beschleunigt wird?
- Ein Proton befindet sich in einem eindimensionalen Kasten (unendliche hohe Wände) der Länge  $l$ . Wie gross ist die Grundzustandenergie für  $l = 0.1 \text{ nm}$ , die typische Ausdehnung eines Moleküls.
- Ein freies Teilchen der Masse  $m$  bewege sich entlang der  $x$ -Achse von links nach rechts. Im Punkt  $x = 0$  springt das Potential  $V(x)$  von null auf einen konstanten Wert  $V_0$ . Wie gross ist die Wellenzahl  $k_2$  im Bereich  $x > 0$ , wenn die Gesamtenergie des Teilchens  $E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = 2V_0$  ist?

**Lsg:** a.  $k \approx 5.14 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-1}$ ,  $\omega \approx 1.52 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$ . b.  $\Delta E \geq \approx 3.30 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$  c.  $\lambda \approx 8.68 \cdot 10^{-11} \text{ m}$  d.  $E_1 \approx 0.0205 \text{ eV}$  e. –

7. Ein Teilchen der Masse  $m$  befindet sich in einem Kastenpotential, das durch

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & -l/2 < x < +l/2 \\ V(x) &= \infty & -l/2 > x \text{ oder } x > +l/2 \end{aligned}$$

gegeben ist. Da das Potential punktsymmetrisch bezüglich des Ursprungs ist, muss auch das Betragsquadrat der Wellenfunktion symmetrisch sein.

- Zeigen Sie, dass dies für die Wellenfunktion  $\psi(-x) = \psi(x)$  oder  $\psi(-x) = -\psi(x)$  impliziert.
- Zeigen Sie, dass die normierbaren Lösungen der Schrödinger-Gleichung durch

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

und

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

gegeben sind. Tipp: Wählen Sie einen reellen Ansatz.

- Tragen Sie die Wellenfunktionen und Wahrscheinlichkeitsdichten des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes über  $x$  auf.

**Lsg:** –

8. Nehmen wir ein Zwei-Teilchensystem und schauen wir uns die Wellenfunktion etwas genauer an. In der Regel schreibt man sie wie folgt auf:

$$\psi(x_1, x_2),$$

d. h. Teilchen 1 ist am Ort  $x_1$  und Teilchen 2 ist am Ort  $x_2$ . Da die Teilchen ununterscheidbar sind, muss also die Wahrscheinlichkeitsamplitude gleich sein, d. h.

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2.$$

Zeigen Sie nun, dass daraus zwei Arten von Wellenfunktionen (also Teilchen) abgeleitet werden können; nämlich symmetrische und antisymmetrische. Tipp: Verwenden Sie dazu den Ansatz:  $\psi_{nm}(x_1, x_2) = \psi_n(x_1)\psi_m(x_2)$ .

Teilchen mit symmetrischer Wellenfunktion nennt man Bosonen, also z. B. das Photon und Teilchen mit antisymmetrischer Wellenfunktion nennt man Fermionen, also z. B. Elektronen.

**Lsg:** –

# Literaturverzeichnis

- [1] URL: [http://de.wikipedia.org/wiki/Mars\\_Climate\\_Orbiter](http://de.wikipedia.org/wiki/Mars_Climate_Orbiter), Juni 2012
- [2] URL: [http://de.wikipedia.org/wiki/Internationales\\_Einheitensystem](http://de.wikipedia.org/wiki/Internationales_Einheitensystem), Juni 2012
- [3] Wikipetzi, IngenieroLoco - Eigenes Werk. Based on File: Relations between new SI units definitions.png, CC BY-SA 4.0,  
URL: <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=40278935>
- [4] CMS Collaboration, *Combination of results on the rare decays  $B_{(s)}^0 \rightarrow \mu^+ \mu^-$  from the CMS and LHCb experiments*, CMS-PAS-BPH-13-007
- [5] Aoyama, Tatsumi and Hayakawa, Masashi and Kinoshita, Toichiro and Nio, Makiko, *Tenth-Order QED Contribution to the Electron g–2 and an Improved Value of the Fine Structure Constant*, Phys. Rev. Lett. Vol. 109, 2012, 10.1103/PhysRevLett.109.111807
- [6] URL: <http://de.wikipedia.org/wiki/Steradian>, Juni 2012
- [7] Aristoteles,
- [8] Galileo Galilei, *De motu*, 1590
- [9] DMK/DPK, *Formeln und Tafeln*, Orell Füssli, 7. Auflage, 1997
- [10] F. A. Brockhaus, *Der grosse Brockhaus*, 16. Auflage, 1955
- [11] URL: <http://www.quartets.de/acad/firstlaw.html>, September 2013
- [12] URL: <http://www.educ.ethz.ch/unt/um/phy/me/kreis/index>
- [13] Lewis C. Epstein, *Denksport Physik*, dtv, 9. Auflage, 2011
- [14] Harry Nussbaumer, *Astronomie*, 7. Auflage, 1999, vdf Hochschulverlag AG
- [15] URL: <http://lexikon.astronomie.info/mars/beobachtung2012/>, April 2013
- [16] Matthias Bartelmann, *Das Standardmodell der Kosmologie, Teil 1 und Teil 2 in Sterne und Weltraum*, Ausgabe: August 2007
- [17] Roman Sexl et al. *Einführung in die Physik - Band 1 & 2*, 3. korrigierte Auflage 2009, Sauerländer Verlag AG
- [18] Paul A. Tipler, *Physik*, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, Berlin, Oxford, 2. Auflage, 1994
- [19] URL: <https://www.etsy.com/ch/listing/1230366346/precision-made-scientific-mechanical>
- [20] Hans Kammer, Irma Mgelandze, *Physik für Mittelschulen*, 1. Auflage 2010, hep Verlag AG
- [21] URL: <https://www.auto-motor-und-sport.de/news/aerodynamik-report-spritsparmodelle-aus-dem-windkanal>
- [22] Wikipedia, URL: <http://de.wikipedia.org/wiki/Fluid>, August 2013
- [23] Basiswissen Schule Physik, Duden Paetec, Berlin 2010
- [24] URL: <http://www.schulserver.hessen.de/>, Oktober 2013
- [25] URL: <http://www.leifiphysik.de>, September 2013
- [26] URL: <http://photos.zoochat.com>, Semptember 2013

- [27] URL: <http://www.lab-laborfachhandel.de>, Oktober 2013
- [28] Bissig Michael, *Schwimmwelt, Schwimmen lernen - Schwimmtechnik optimieren*, Schulverlag, Bern,
- [29] URL: [https://elearning.physik.uni-frankfurt.de/data/FB13-PhysikOnline/lm\\_data/lm\\_282/auto/kap09/cd259.htm](https://elearning.physik.uni-frankfurt.de/data/FB13-PhysikOnline/lm_data/lm_282/auto/kap09/cd259.htm), März 2014
- [30] URL: <https://www.vibos.de/veranstaltung/physik-teil-3-von-4-schwingungen-und-wellen>, März 2024
- [31] URL: <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/707>
- [32] E.F.F. Chladni, *Die Akustik*, Taschenbuch Auflage 2012, Nabu Press
- [33] URL: <http://ephex.phys.ethz.ch>, Februar 2015
- [34] URL: <http://aufzurwahrheit.com/physik/quantenmechanik-5461.html>, März 2015
- [35] M. Cagnet, M. Françon, J.C. Thierr, *Atlas opitscher Erscheinungen*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 1962
- [36] Bruno Cappeli et al. *Physik anwenden und verstehen*, Orell Füssli Verlag AG, 2004
- [37] Richard P. Feynman, *QED - Die seltsame Theorie des Lichts und der Materie*, Piper, 3. Auflage, 2018
- [38] Keith Johnson, *Physics for You: Revised National Curriculum Edition of GCSE*, Nelson Thornes, 2001
- [39] URL: <https://tu-dresden.de/mn/physik/ressourcen/dateien/studium/lehrveranstaltungen/praktika/pdf/TA.pdf?lang=en>, Juli 2018
- [40] Wolfgang Demtröder, *Experimentalphysik 1 - Mechanik und Wärme*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2. Auflage, 1998
- [41] Unbekannt, *Engraving of Joule's apparatus for measuring the mechanical equivalent of heat*, Harper's New Monthly Magazine, No. 231, August, 1869
- [42] URL: <http://www.tf.uni-kiel.de>, März 2014
- [43] URL: [http://de.wikipedia.org/wiki/Entropie\\_\(Thermodynamik\)](http://de.wikipedia.org/wiki/Entropie_(Thermodynamik)), März 2014
- [44] URL: [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:20070616\\_Dampfmaschine.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:20070616_Dampfmaschine.jpg), März 2014
- [45] URL: <http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Bcoulomb.png>, März 2014
- [46] URL: <http://www.bader-frankfurt.de/widerstandscode.htm>, August 2014
- [47] Carl D. Anderson, *The Positive Electron*. Physical Review 43 (6): 491–494
- [48] URL: <http://pgd5.physik.hu-berlin.de/elektrostatik/ele12.htm>, Oktober 2014
- [49] URL: <http://www.aip.org/history/lawrence/radlab.htm>, Oktober 2014
- [50] URL: [http://www.solstice.de/grundl\\_d\\_tph/exp\\_besch/exp\\_besch\\_04.html](http://www.solstice.de/grundl_d_tph/exp_besch/exp_besch_04.html), Oktober 2014
- [51] URL: <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/6639>, Oktober 2017
- [52] URL: <https://de.serlo.org/52586/elektromagnetische-wellen>, Oktober 2017
- [53] URL: [https://de.wikipedia.org/wiki/Elektromagnetisches\\_Spektrum](https://de.wikipedia.org/wiki/Elektromagnetisches_Spektrum), August 2022
- [54] URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Zahnradmethode>, September 2022
- [55] URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Datei:Double-Rainbow.jpg>, November 2023
- [56] URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Regenbogen>, April 2024
- [57] Proton-Proton Kollision, CERN, Lucas Taylor
- [58] Ze'ev Rosenkranz, *Albert Einstein – Derrière l'image*, Verlag Neue Zürcher Zeitung, 2005.
- [59] Albert Einstein, *Zur Elektrodynamik bewegter Körper*, Annalen der Physik 17 (10): 891–921.
- [60] Albert Einstein, *Über die spezielle und die allgemeine Relativitätstheorie*, Springer-Verlag, 23. Auflage, 1988

- [61] Wikipedia, [https://de.wikipedia.org/wiki/Relativitat\\_der\\_Gleichzeitigkeit](https://de.wikipedia.org/wiki/Relativitat_der_Gleichzeitigkeit), August 2018
- [62] URL: <http://static.a-z.ch>, Mrz 2015
- [63] Max Planck, *Vom Relativen zum Absoluten*, Naturwissenschaften Band 13, 1925
- [64] A. H. Compton, *The Spectrum of Scattered X-Rays*, Physical Review 22 (5 1923), S. 409–413
- [65] URL: <http://www.peter-glowatzki.de>, Mai 2015
- [66] James Franck, *Transformation of Kinetic Energy of Free Electrons into Excitation Energy of Atoms by Impacts*, Nobel Lectures, Physics 1922-1941
- [67] URL: <http://www.leifiphysik.de/themenbereiche/quantenobjekt-elektron/versuche>, Mai 2015
- [68] David Prutchi, Shanni Prutchi, *Exploring Quantum Physics through Hands-on Projects*, Wiley, 1 edition (February 7, 2012)
- [69] URL: <http://w3.ppp1.gov/>, September 2015
- [70] O. Hofling, Physik. Band II Teil 1, Mechanik, Wrme. 15. Auflage. Ferd. Dummfers Verlag, Bonn 1994
- [71] Kovalente Atomradien auf Basis der Cambridge Structural Database  
URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Cambridge\\_Structural\\_Database](https://en.wikipedia.org/wiki/Cambridge_Structural_Database), April 2018
- [72] G. Audi und A.H. Wapstra, Nuclear Physics A595, 409 (1995)
- [73] URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Gammastrahlung>, April 2018
- [74] URL: <http://www.wn.de/Muenster/2012/07/Das-Wunder-von...>, Juni 2012
- [75] L. Susskind und G. Hrabovsky, *The Theoretical Minimum - What you need to know to start doing physics*, Basic Books, 2014