

Integrierter Kurs IV

Experimentalphysik II
Tom Folgmann

13. Juli 2023

Inhaltsverzeichnis

1	Atome und Atommodelle	2
1.1	Größe von Atomen	2
1.2	Typische Bestimmung der Größe eines Atoms	2
1.3	Definition des Atomradius	4
1.4	Der elektrische Aufbau der Atome, das Elektron	4
1.5	Bestimmung der Ladungsverteilung im Atom (Streuexperimente) . . .	6
1.6	Entwicklung der Quantenmechanik	10
1.7	Schwarzkörperstrahlung	11
2	Das Bohrsche Atommodell	18
2.1	Absorption und Emission	18
2.2	Modell	18
3	Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern	20
3.1	Vorbereitung	20
3.2	Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld	20
3.3	Der Zeemann-Effekt	20
3.4	Freies Elektron im Magnetfeld	21
3.5	Felder und Potentiale in der Quantenphysik	21
3.6	Lebensdauer angeregter Zustände und Linienbreiten	22
4	Der Spin	24
4.1	Stern-Gerlach-Experiment	24
4.2	Anomaler Zeemaneffekt	27
4.3	Der Paschen-Back-Effekt	28
5	Hyperfeinstruktur und weitere Effekte auf die Energieniveaus des Wasserstoffatoms	28
5.1	Hyperfeinstruktur	28
5.2	Das vollständige Kernschema	28
5.3	Überblick: Spektrale Eigenwertaufspaltung	29
6	Mehrelektronensysteme	30
6.1	Pauli Prinzip	30
6.2	Zwei Teilchen mit halbem Spin	31
6.3	Das Heliumatom	31

VL 1

1 Atome und Atommodelle

12.04.2023,

VL 2

13.04.2023,

08:15

Die experimentelle Bestimmung der Atommasse geklingt durch verschiedene Verfahren, wie beispielsweise die folgenden.

Röntgenbeugung an Kristallen. Man kennt zunächst die *Gitterkonstante* $d \in \mathbb{R}_{\geq 0}$, also den *Abstand der Atome innerhalb des Gitters*. Damit ist das Atomvolumen gerade $d^3 = V_{Atom}$ und schließlich

$$N_A \cdot V_{Atom} = \frac{M}{\rho(M)},$$

wobei M die *Molekülmasse* und ρ eine Dichtefunktion ist.

(§1) □ Recherchiere das „Avogadro-Projekt“ des PTB.

Gaskonstante. Über die Gaskonstante folgt der Atomradius $R = N_A \cdot k_B$ mit k_B als *Boltzmann-Konstante*.

Massenspektroskopie. Hier wird über die Atomablenkung die Masse bestimmt.

(§2) □ Recherchiere das genaue Vorgehen.

1.1 Größe von Atomen

Atome weisen etwa eine Größe von 10^{-10} m im Radius vor, was wir folgend auf die Einheit *Angstrom* normieren werden: $1\text{\AA} := 10^{-10}\text{m}$. Zum Vergleich: Das Wasserstoffatom weist einen Radius von 0.5\AA auf, Magnesium einen von 1.6\AA und Caesium 2.98\AA .

1.2 Typische Bestimmung der Größe eines Atoms

Grobe Abschätzung. Für *reale Gase* gilt die sogenannte *Van-der-Waals-Gleichung* der Form

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right) \cdot (V_m - b) = RT,$$

wobei a den *Binnendruck* und b das *Kovolumen* darstellen. Aus einem pV Diagramm lässt sich dann die Konstante b bestimmen und die Approximation $b \approx N_A \cdot V_A$ liefert die gewünschten Größen.

Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen. Das Ziel der Beugung ist zunächst die Bestimmung der oben erwähnten Gitterkonstanten d . Man benötigt hierzu Röntgenstrahlen, gewonnen durch (i) eine Röntgenröhre, mit dem Nachteil der charakteristischen Linien, welche berücksichtigt werden müssen, oder (ii) die Synchrotronstrahlung. Diese werden auf einen *Einkristall* gelenkt, welcher durch eine *periodische, durchgehende äquidistante* Anordnung von Atomen als ein *Festkörper* charakterisiert wird. Durch diese Anordnung wird eine Ebenenstruktur initialisiert, welche insbesondere nicht eindeutig wählbar ist.

Im Experiment wird dann eine Beugungserscheinung ersichtlich sein, siehe [→ AP3: *Beugung am Gitter*]. Im wesentlichen wird hierfür die *Bragg Bedingung* der Form

$$2 \cdot d \cdot \sin(\alpha) = n \cdot \lambda$$

verwendet, wobei α der *Kontaktwinkel* der Strahlung zum Gitter und n die *Beugungsordnung* ist. Der Gitterabstand führt in der obigen Weise auf das gesuchte Atomvolumen V_{Atom} .

Man kann das Experiment auch mit mehreren Verfahren ausführen, wie zB. das *Laue-Verfahren*, das *Bragg- oder Drehkristallverfahren* und *Davye Scherrer Verfahren*, welches für Pulver und monochromatisches Licht verwendet.

Abbildende Größenbestimmung. Mithilfe eines Lichtmikroskopes lässt sich ein Atom *nicht* auflösen, da es der Abbeschen Theorie über das Auflösungsvermögen widerspricht. Das *Rayleigh-Kriterium* für d ist von der Form

$$d = \frac{\lambda}{n \cdot \sin(\alpha)},$$

mit n als Brechungsindex und α als Einfallswinkel (der halbe Winkel). Unter dem Link zum Auflösungsvermögen sind minimale sichtbare Längen bei ungefähr 500nm recherchierbar, woraus die Ausgangsaussage folgt.

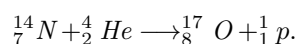
„Man braucht die mindestens die erste Ordnung, sonst haben wir keine Auflösung mehr.“

.....
□ Finde heraus, was der Prof. mit dieser Aussage meinte.

(§3)

Experiment 1. Die Nebelkammer.

Die sogenannte Nebelkammer ist gefüllt mit übersättigtem Wasserdampf, durch welche gewählte Teilchen hindurchfliegen, wie beispielsweise ${}^4_2\text{He}$ Kerne. Ihre Spuren in dem Nebel lassen sich dann optisch durch Schwärzungen nachvollziehen. Die Streifen entstehen durch die Reaktion



Experiment 2. Das Feldemissionsmikroskop.

Das Feldemissions- oder Feldelektronenmikroskop wurde entwickelt von E. Müller im Jahre 1951. Die Wolframspitze weist einen Krümmungsradius von $r \approx 10\text{nm}$ auf, aus dessen Spitze durch eine angelegte Spannung zwischen ihr und dem Schirm Elektronen herausgerissen werden. Diesen Prozess nennt man auch Kalte Elektronen Emission.

VL 3
14.04.2023,
11:45

Transmissions-Elektronenmikroskopie Die Methode der Transmissions - Elektronenmikroskopie wurde von E. Ruska 1932 entwickelt. Ihre Funktionsweise beruht auf der Emission von Elektronen und anschließender Beschleunigung in Richtung der

Probe, an welcher ein Streumuster entsteht. Die Elektronen werden als Teilchen im Modell aufgefasst, sodaß das Auflösungsvermögen der De-Broglie Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m_e \cdot E_{kin}}},$$

entspricht, wobei h die Planck-Konstante und p der (nicht relativistische) Impuls des Elektrons ist.

Rasterelektronenmikroskopie Die Methode der Rasterelektronenmikroskopie rastert ein Muster der Elektronenstrahlung über das zu mikroskopierende Objekt, welches selbstgewählt ist. Ein Sonderfall dieser ist die Rastertunnelmikroskopie (entworfen bei IBM in Zürich), bei welcher keine Elektronen verwendet werden, sondern die Elektrode sehr nahe (approx. 2\AA) an das zu untersuchende Objekt herangebracht wird. Hierdurch entsteht ein sogenannter *Tunnelstrom*, welcher eine Proportionalität $I \propto \exp(-d)$ vorweist, sodaß $-\ln(I) \propto d$ der Abstand zur Probe ist. Die Rastertunnelmikroskopie ist somit eine Methode zur Messung der Abstände zwischen Probe und Elektrode. Die Auflösung ist dabei

lateral: 0.05\AA vertikal: 1pm .

-
- (S4) ☐ Recherchiere das IBM Logo aus Atomen gebastelt. Wie groß ist das Logo? Wie wurde das Logo zurechtgeschoben?
-

1.3 Definition des Atomradius

Misst man mit verschiedenen Methoden dasselbe Atom, erhält man verschiedene Radien und damit Atomgrößen. Die Messmethoden sind also bezüglich des Atomradius nicht eindeutig! Atome sind also keine harten Kugeln im Sinne der Vorstellung, sondern haben ein *Wechselwirkungspotential* (auch Lennard-Jones-Potential) der Form

$$V := \left(\frac{a}{r^{12}} - \frac{b}{r^6} \right)_{r \in \mathbb{R}_{\geq 0}},$$

welches mit verschiedenen Messmethoden zu verschiedenen Radien registriert wird.

-
- (S5) ☐ Leite das Potential V her. Was ist die Bedeutung der Parameter a und b ?
-

VL 4

17.04.2023,
11:45

Den Atomradius setzt man nach dem Potential beispielsweise auf $r_m := (2a/b)^{1/b}$ als $\text{argmin}(V)$ oder auch $r_0 = (a/b)^{1/b}$ als nächste Nullstelle zu $r = 0$ aus $V(r_0) = 0$.

1.4 Der elektrische Aufbau der Atome, das Elektron

Entdeckung der Kanalstrahlen, Ionen

Der Physiker E. Goldstein (1886) entdeckte die sogenannten *Kanalstrahlen*, neuer genannt auch Ionenstrahlung. Sie dienen der Untersuchung der Gasentladung. Die Funktionsweise der Kanalstrahlen ist wie folgt: Die Ionen werden per elektrischem Feld beschleunigt und zur Kathode gelenkt. Sie treten durch die Löcher (auch Defektelektronen) in der Kathode aufgrund ihrer Massenträgheit hindurch, was in Form von Leuchterscheinungen erkennbar ist. Man kann durch dieses Verfahren auf das Verhältnis e/m schließen.

Entdeckung der Kathodenstrahlen, Elektronen

Über eine Weiterentwicklung der Vakuumtechnologie im Allgemeinen wird es möglich, sogar Elektronenstrahlen zu erzeugen. Dies geschieht in der sogenannten *Kathodenstrahlröhre*:

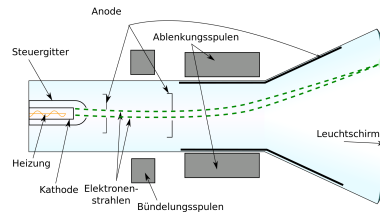


Abbildung 1: Schematischer Aufbau der Kathodenstrahlröhre.

[→ Live-Versuch] Es findet nach der Erzeugung des Elektronenstrahls also eine Ablenkung desselben durch ein elektromagnetisches Feld vor. Die Versuche gehen auf den Physiker J. J. Thomson zurück, welcher 1897 die erste Kathodenstrahlröhre baute. Das Massenverhältnis m_e/m_p lautet in diesem Fall

$$\frac{m_{Ion}}{e} \approx 10^{-4}.$$

.....
☐ Suche nach einer Formel zur konkreten Berechnung auf Grundlage der Versuchsbedingungen. (S.6)

Masse des Elektrons

Die Bestimmung von m_e aus den massenspektrometrischen Experimenten erfolgt bei bekannter Ladung durch die einfache Multiplikation $m_e/e \cdot e = m_e$. Der Literaturwert der Elektronenladung ist $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{C}$, die Masse des Elektrons ist $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{kg}$.

Ladung des Elektrons (Elementarladung)

Von Robert Millikan (1909) wurde ein Experimentvorschlag der Elementarladungsbestimmung vorgeschlagen, das sogenannte Millikan-Experiment [→ AP3]. Das grobe Vorgehen ist zunächst (i) die Volumenmessung des Tröpfchens, (ii) die Kraftberücksichtigung von Schwerkraft $F_g = m \cdot g$, der Reibung $F_R = 6\pi \cdot \eta \cdot r \cdot v$ und der Auftriebskraft $F_A = V \cdot \rho \cdot g$, wodurch der Teilchenradius

$$r = \left(\frac{9 \cdot \eta \cdot v}{2 \cdot g \cdot (\rho_{\text{Öl}} - \rho_{\text{Luft}})} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow m = \frac{4}{3} \pi r^3 \cdot \rho_{\text{Öl}}$$

folgt. Die Spannung zwischen den Kondensatorplatten liefert die Feldstärke $E = U/d$, welche genau so justiert wird, daß das Teilchen zu schweben beginnt. Das Kräftegleichgewicht liefert dann das Ergebnis

$$n \cdot e = \frac{\frac{4}{3} \pi r^3 \cdot g \cdot (\rho_{\text{Öl}} - \rho_{\text{Luft}})}{E}.$$

Hinzukommende Röntgenstrahlung ändert nun schließlich die Tröpfchenladung in Stufen $\Delta q = n \cdot e$, wodurch die Existenz der Elementarladung e bewiesen werden kann [→ Ionisierende Strahlung].

- (§.7) □ Führe die angedeutete Rechnung konkret durch.

Weitere Eigenschaften des Elektrons

Der Eigendrehimpuls (Spin). Der Spin kommt in Größen von $\hbar/2$ vor. Er ist ein Quantenzustand, der sich nicht addieren läßt. Nach dem *Elementarteilchenmodell* sind Elektronen Teil der Gruppe *Fermionen*, also Teilchen mit halbzahliger Spinzahl, und in der Untergruppe der Leptonen. Teilchen mit ganzzahliger Spinzahl heißen *Bosonen*.

Fermi-Dirac-Statistik. Die *Fermi-Dirac-Statistik* beschreibt die Wahrscheinlichkeit, daß ein Fermion in einem bestimmten Zustand ist. Sie ist definiert durch

Pauli-Prinzip. Das *Pauli-Prinzip* besagt, daß zwei Fermionen nicht denselben Quantenzustand haben können.

Magnetisches Moment. Ein Elektron weist ein *Magnetisches Moment* auf, welches sich aus der Spin-Bewegung ergibt. Es ist definiert durch

$$\mu_{\mathbf{S}} = -g_S \cdot \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \mathbf{S}.$$

- (§.8) □ Recherchiere in einer Mußestunde die genannten Begriffe und versuche, sie zu verstehen.

1.5 Bestimmung der Ladungsverteilung im Atom (Streuexperimente)

Aus den vorgehenden Kapiteln kann man entnehmen, daß Atomen aus $z \in \mathbb{N}_0$ Elektronen der Ladung $-z \cdot |e|$ und z positiven Ladungen der Ladung $z \cdot |e|$ konstruiert sind. Hieraus resultiert die *elektrische Neutralität* des Atoms.

Das Thomson'sche Atommodell

Das Thomson'sche Atommodell (auch Rosinenkuchenmodell) besagt, daß die Ladungen über das gesamte Atomvolumen verteilt sind. Die Ladungsdichte ρ ist also konstant und gleich der Ladung pro Volumeneinheit.

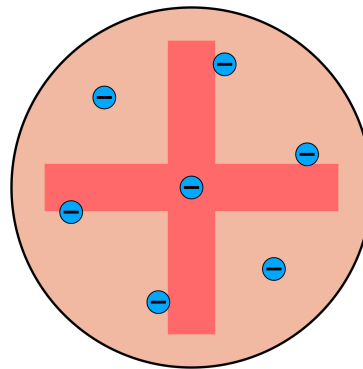


Abbildung 2: Das Thomson'sche Atommodell.

Die Bestimmung des inneren Atomaufbaus erfolgt durch die Streuung von α (${}^4_2\text{He}^{2+}$) Teilchen und ihrer Bahnanalyse.

Das Rutherford-Experiment

Das Experiment entstammt der Idee der drei Physiker E. Marsden, H. Geiger und E. Rutherford. Der Versuchsaufbau ist von der Form

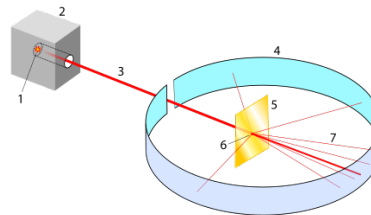


Abbildung 3: Das Rutherford-Experiment.

Mit einem *Szintillator* (oder technisch weiter fortgeschrittenen Messgeräten) wird Anzahl der Teilchenregistrierungen in Form von Blitzen in Abhängigkeit des Winkels θ gemessen, woraus sich zeitlich die Zählrate $N(\theta)$ ergibt.

.....
☐ Recherchiere den *Rutherford'schen Streuungsquerschnitt* und versuche, ihn zu verstehen. (S.9)

Experiment 3. *Rutherford-Experiment.*

Wir führen das Rutherford-Experiment durch und erhalten:

Registrierungen	Winkel	Zeit	Folie
1468cps	0°	20s	ohne
0 cps	15°	20s	ohne
1369 cps	0°	20s	mit
4 cps	15°	20s	mit

Tabelle 1: Vergleich Messung mit und ohne Folie.

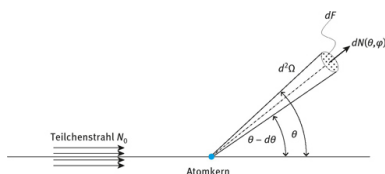


Abbildung 4: Darstellung des schematischen Streuprozesses aus [1].

VL 5

19.04.2023,
08:15

(Einheit „cps“ ist counts per second)

Wir wollen nun die Ergebnisse des vorigen Experimentes festhalten:

- 99.99% der eingestrahnten α Teilchen fliegen geradlinig durch die Au-Folie hindurch. Die Folie ist für die Teilchen also annähernd transparent.
- Der α Teilchenstrom wird leicht aufgefächert. Dies ist mit der erwarteten $e^- - \alpha$ Teilchenwechselwirkung vereinbar.
- Es wird auch die Rückwertsstreuung (bei den übrigen 0.01% der α Teilchen) beobachtet.
- Die zurückgestreuten α Teilchen haben keinen Energieverlust erfahren.
- Die Intensität der Rückwertsstreuung ist proportional zur Foliendicke (/stärke).
- Die Winkelverteilung der Zählraten weist die Proportionalität

$$N(\theta) \propto \frac{1}{\sin(\theta/2)^4}$$

auf.

Aus unseren Beobachtungen können wir das *Rutherford-Modell* ableiten:

- Atome sind aus Kern und Hülle aufgebaut.
- Die Kerne enthalten den Großteil der Atommasse und sind positiv geladen, auf $\approx 40\text{fm}$ konzentriert.
- Die Hüllen enthalten Elektronen, verteilt über das Restvolumen des Atoms.
- Das *Coulomb-Gesetz* behält auf diesen Größenordnungen seine Gültigkeit.

Die Rutherfordsche Streuformel Wir wollen nun die Streuformel für die Rutherford-Experimente herleiten. Wir betrachten zunächst die Streuung eines α Teilchens auf ein Atom. Die Streuung ist in der Regel sehr klein, sodass wir die Streuung als eine Streuung auf den Atomkern betrachten können. Unser Ziel ist $N(\theta)$. Betrachte das Schema: Für die Coulombkraft erhalten wir zunächst

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2 \cdot q(\text{Ze})^2}{r^3} \cdot \mathbf{r},$$

wobei die Funktion q die Ladung von Ze zuordnet¹. Die Kraftaufspaltung in orthogonale und parallele Flugrichtung ergibt

$$F_{\perp} = \|F\|_2 \cdot \sin(\varphi) \quad F_{\parallel} = \|F\|_2 \cdot \cos(\varphi).$$

¹Sie hätte wohl eine Form $q := (E \mapsto E_q)_{E \in TOE}$, wobei TOE eine Menge von Tupeln sei, welche zu allen Elementen des Periodensystems ihre Eigenschaften als Einträge zusammenfasst.

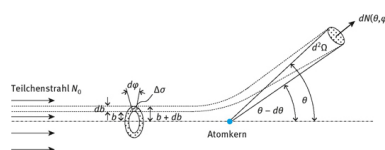


Abbildung 5: Erweiterung der Abbildung 4 um das Ursprungsraumelement [1].

Für den Drehimpuls erhalten wir in *Zylinderkoordinaten* die Gleichungskette

$$\begin{aligned}\mathbf{L}_{r(t)} &= \mathbf{r}(t) \times \mathbf{p}(t) = \mathbf{r}(t) \times m \cdot \mathbf{r}'(t) \\ &= m \cdot \|\mathbf{r}(t)\|_2^2 \cdot \varphi'(t) \cdot (\mathbf{e}(r(t)) \times \mathbf{e}(\varphi(t))) \\ &=: m \cdot \|\mathbf{r}(t)\|_2^2 \cdot \varphi'(t) \cdot \mathbf{e}_3.\end{aligned}$$

Identifiziere nun $1/r^2 = \varphi'(t)/(v_0 \cdot b)$ mit $v_0 := \|\mathbf{r}'(0)\|_2$ und b als Bahnabstand zur Mittelachse durch den Kern [→ Abb. 4]. Wir erhalten für das Coulombgesetz

$$F_{\perp} = \frac{2 \cdot q(\text{Ze})^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{\varphi'(t)}{v_0 \cdot b} \cdot \sin(\varphi(t)) = m \cdot \|r''(t)\|_2$$

und durch Integration

$$b(\theta) = \frac{2 \cdot q(\text{Ze})^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{m \cdot v_0^2} \cdot \cot\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

□ Fülle die Lücken der Rechnung auf. Was kommt beim parallelen Fall heraus? (§10)

Bei unserem Experiment [→ Exp. 3] haben wir die *Anzahl der Ereignisse* auf dem Leuchtschirm gemessen. Diese geschahen alle in einem gewissen Raumwinkelbereich $d\Omega$ [→ Abb. 4], in welchem der Detektor gemessen hat. Wir fragen uns nun, aus welcher Richtung die detektierten Teilchen kommen, was uns auf ein paarweise definiertes Raumelement vor dem Atom bringt: Die gemittelte Anzahl der Teilchen dN in diesem Raumelement $d\Omega$ ist augenscheinlich von dB ab, sodaß wir auf den schematischen Zusammenhang

$$dN = \text{Anzahl der } \alpha \text{ Teilchen} \cdot \frac{dB \cdot \text{Streuzentrenanzahl}}{\text{Gesamtfläche}},$$

wobei wir $dB := \pi \cdot (b^2 - (b - db)^2)$ als Trefferfläche und N_t als Streuzentrenanzahl (proportional zur Anzahl der Atome in der Ag-Folie) festhalten. Die Gesamtfläche F ist diejenige der Goldfolie. Daraus ergibt sich

$$dN = N_{\alpha} \cdot dB \cdot \frac{N_t}{F}$$

und „differenziert“ nach $d\Omega$ insgesamt

$$\frac{dN}{d\Omega} = N_{\alpha} \cdot \frac{N_t}{F} \cdot \frac{dB}{d\Omega},$$

wobei wir $dB/d\Omega$ als den *differentiellen Streuquerschnitt* definieren.

□ Kläre die Bedeutung des angedeuteten Differenzierens. Wie ist der Prozess sauber definierbar? (§11)

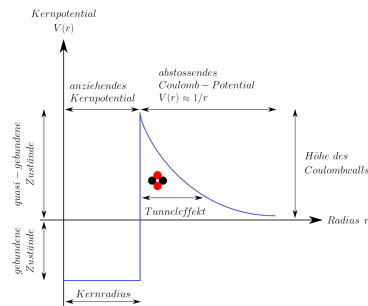
□ Verifiziere die alternative Definition $dB := b \cdot db \cdot d\varphi$. Verifiziere auch $d\Omega = \sin(\theta) \cdot d\theta \cdot d\varphi$. (§12)

Die Streuformel für die Rutherford-Experimente lautet nun

$$\frac{dB}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q(\text{Zr}) \cdot e^2}{m \cdot v_0^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}.$$

Man kann nun noch $E_0 = m \cdot v_0^2$ identifizieren.

Der Kernradius Für schnelle α Teilchen konnte jedoch experimentell bewiesen werden, daß die Coulombkraft nicht mehr allein die Bahn des gestreuten Teilchens beschreiben kann: Es muss eine weitere Wechselwirkung mit dem Atomkern geben, wie sich rausstellen wird die sogenannte *attraktive Kernkraft*.



(a) Der Tunnelprozess und die Kernkraft.

VL 6

20.04.2023,
10:00

Aufbau von Atomen, Isotopie Zusammenfassend haben wir festgestellt, daß Atome aus Elektronen (e^-) in der Hülle und Protonen (p^+) im Kern bestehen müssen. Noch nicht erwähnt sind die sogenannten *Neutronen* (n^0), welche sich ebenfalls im Kern ansiedeln. Wir definieren nun den Begriff *Isotop*, welcher ein Atom (also Element) beschreibt, bei welchem sich die Anzahl der Neutronen ändert, jedoch die Protonenanzahl gleich bleibt. Beispiel ist der Wasserstoff (H), welcher sich in *Protium* (^1_1H), *Deuterium* (^2_1H) und *Tritium* (^3_1H) unterteilt, bei welchen die letzten beiden Isotope natürlich eher selten anzutreffen sind.

1.6 Entwicklung der Quantenmechanik

Wichtige Experimente waren

- Das *Doppelspalterexperiment* von Thomas Young (1801), welches den Welle-Teilchen-Dualismus fundierte.
- Die *Schwarzkörperstrahlung* von Max Planck (1900), welche die Quantisierung der Strahlung beschrieb.
- Der *photoelektrische Effekt* von Albert Einstein (1905), welcher die Quantisierung der Photonen beschrieb.
- Der *Compton-Effekt* von Compton-Effekt (1923), welcher die Lichtstreuung an freien Elektronen beschrieb (Welle-Teilchen-Dualismus).
- Die *De Broglie-Wellenlänge* von Louis de Broglie (1924), welche die Wellenlänge von Teilchen/Materie beschrieb.

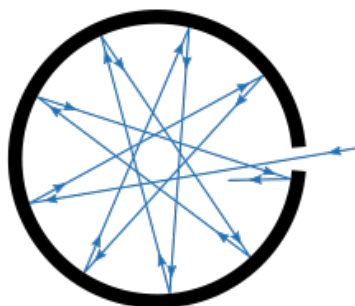


Abbildung 7: Schema eines Schwarzkörpers [3].

- Die *Spektrallinien* von J. Balmer (1885), welche die Quantisierung der Atomenergie durch Absorption und Emission von Licht beschrieb. Dies führte zur Entwicklung des Atommodells durch Niels Bohr (1913).

1.7 Schwarzkörperstrahlung

Der schwarze Körper / Hohlraumstrahlung

Interessant ist die quantitative Beschreibung dieser Phänomene, z.B. durch die Intensitätsverteilung im Spektrum eines Körpers.

Der *schwarze Körper* ist ein Körper mit einer Oberfläche, welche alle Strahlung absorbiert, d.h. der Absorptionskoeffizient des Körpers ist $A = 1$, woraus mit $A + R = 1$ wiederum folgt $R = 0$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$. Somit muss ein Körper, welcher alle Strahlung absorbiert, auch alle Strahlung emittieren, und dies proportional zu seiner Temperatur. Dies ist die Grundlage des *Planckschen Strahlungsgesetz*. Anschaulich passiert mit einfallender Strahlung auf einen Schwarzkörper folgendes: Die Intensitätsverteilung der austretenden Strahlung ist identisch mit derjenigen des sich im Hohlraum befindlichen EM-Felder. Das spektrale Emissionsvermögen eines schwarzen Körpers ist also identisch mit der spektralen Strahlungsdichte der Hohlraumstrahlung.

.....

☐ Recherchiere die *Dyson-Sphäre*. Handelt es sich um einen Schwarzkörper?

(S13)

.....

Experiment 4. Die Glühbirne.

Wir starten bei 6W. Das Licht einer Glühbirne wird spektral zerlegt. Ein Detektor misst die Strahlungsintensität und abhängig von der Wellenlänge. Wir sehen einen Peak und Maximum im Infraroten Bereich. Dies ist die Infrarotstrahlung der Glühbirne.

Nun ändern wir die Leistung auf 3W; sofort wird das sichtbare Spektrum schwächer auf dem Schirm abgebildet. Die erhaltene Intensitätskurve ist relativ zu der 6W Kurve nach oben verschoben. Wir sehen, daß der Peak (nach rechts, ins Infrarote) verschoben ist. (Das Experiment wurde aufgrund zu flacher Kurve hier abgebrochen.)

Hinweis: Simuliere das Experiment auf der FU-Berlin Website.

Abbildung 8: Schema der Emission eines Photons durch eine Atomanregung [4].

Aus klassischer Sicht ergibt sich für die spektrale Energiedichte

$$u(\nu, T) \cdot d\nu = \frac{8 \cdot \pi}{c^3} \cdot \nu^2 \cdot k_B \cdot T \cdot d\nu,$$

auch bekannt als *Rayleigh-Jeans-Gesetz*. Für $\nu \rightarrow \infty$ erfolgt eine sogenannte *Ultraviolett-katastrophe*. Dieses Verhalten ist jedoch nur bei klassischer Strahlung zu beobachten. Das Modell weist eine gute Übereinstimmung mit der Realität für kleine Frequenzen auf.

.....
 (S14) □ Recherchiere den *Gleichverteilungssatz*. Wie fließt er in das Rayleigh-Jeans-Gesetz ein?

Plancksches Strahlungsgesetz

Max Planck leitete die korrekte Strahlungsformel für das beobachtete Phänomen und Diskrepanz her. Wir konzentrieren uns nachfolgend jedoch auf die Herleitung nach Einstein.

Annahmen. Wir müssen annehmen, daß Licht aus Teilchen besteht, die sogenannten Photonen, und damit quantisiert ist. Weiter nehmen wir an, daß Atome diskrete Energieniveaus besitzen müssen. Es gibt insbesondere *nur* zwei, welche wir E_1 und E_2 mit $E_2 > E_1$ nennen wollen.

Damit kommen zwei Prozesse bei der Wechselwirkung mit der elektromagnetischen Strahlung infrage: (i) Absorbtion und (ii) Reflexion.

- (i) Bei der Absorbtion eines Photons mit Energie $E = E_2 - E_1 = h \cdot \nu$ wird das Atom von E_1 auf E_2 angeregt².
- (ii) Im angeregten Zustand kann das Atom *spontan* das Energieminimum anstreben und ein Photon der Energie $E_2 - E_1 = h \cdot \nu$ emittieren.

Anschaulich sind die Prozesse wiefolgt, wobei noch die *induzierte Emission* als Kombination beigelegt wurde: In einem Atomsystem mit $N \in \mathbb{N}$ Atomen haben wir N_1 Atome in Zustand E_1 und N_2 Atome in Zustand E_2 . Für die Prozesse gilt dann:

- (i) Für ein Atom in Zustand E_1 gilt die Änderung

$$dN_{12} = \int B_{12} \cdot u(\nu, T) \cdot N_1 \lambda(dt),$$

wobei B_{12} ein *Einstein Koeffizient* ist, welcher die Übergangswahrscheinlichkeit angibt in der Einheit $[1/(s \cdot J/m^3)]$ mit E als Energiedichteinheit.

- (ii) Für ein Atom in Zustand E_2 gilt die Änderung

$$dN_{E,21} = \int A_{21} \cdot N_2 \lambda(dt),$$

mit A_{21} als *Einstein Koeffizient*.

²Es ist $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ die *Planck-Konstante* und $\hbar := h/(2 \cdot \pi)$ die reduzierte Variante.

Die induzierte Emission folgt dem Zusammenhang $dN_{I,21} = \int B_{21} \cdot u(\nu, t) \cdot N_2 \lambda(dt)$. Im thermischen Gleichgewicht gilt

$$dN_{12} = dN_{E,21} + dN_{I,21},$$

also nach Definitionen

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12} \cdot u(\nu, t)}{A_{21} + B_{21} \cdot u(\nu, t)} \Leftrightarrow \frac{N_2}{N_1} = \frac{(E_2/(k_B \cdot T))}{\exp(E_1/(k_B \cdot T))},$$

bei welchen der Zähler und Nenner sogenannte *Boltzmann-Faktoren* sind. Mit $E_2 - E_1 = h \cdot \nu$ folgt dann insgesamt

$$u(\nu, t) = \frac{A_{21}}{B_{12} \cdot \exp(h \cdot \nu/(k_B \cdot T)) - B_{21}}.$$

- Für $T \rightarrow \infty$ muss $u \rightarrow \infty$ gelten, da sonst die Emission nicht mehr möglich wäre. Dies folgt aus der Definition von u . Weiter folgt mit „physikalischer Argumentation“ $B_{12} = B_{21}$.
- Für $h \cdot \nu \ll k_B \cdot T$ (das R.J. Gesetz ist hier gut genug) folgt

$$\exp(h \cdot \nu/(k_B \cdot T)) \approx 1 + \frac{h \cdot \nu}{k_B \cdot T} + \text{TAF}_{f, x_0}(x)$$

mit passend gewählten f, x_0, x durch Taylorapproximation. Daher gilt

$$u(\nu, T) = \frac{A_{21}}{B_{12}} \cdot \frac{k_B \cdot T}{h \cdot \nu}$$

mit $A_{21}/B_{12} = 8\pi h \cdot \nu^3/c_0^3$, sodaß

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h \cdot \nu^3}{c_0^3} \cdot \frac{1}{\exp(h \cdot \nu/(k_B \cdot T)) - 1}.$$

Es ist dann $u(\nu, T) \cdot d\nu$ die spektrale Energiedichte im Frequenzbereich $d\nu$ pro Volumen.

- Betrachte die gesamte Energiedichte

$$U(T) = \int u(\nu, T) \lambda_{\mathbb{R}_{\geq 0}}(d\nu) = \frac{8\pi h}{c_0^3} \cdot \int \frac{\nu^3}{\exp(h \cdot \nu/(k_B \cdot T)) - 1} \lambda_{\mathbb{R}_{\geq 0}}(d\nu)$$

und mit Substitution $x = h\nu/(k_B \cdot T)$ schließlich

$$U(T) = \frac{8\pi h}{c_0^3} \cdot \left(\frac{k_B \cdot T}{h}\right)^4 \cdot \int \frac{x^3}{\exp(x) - 1} \lambda_{\mathbb{R}_{\geq 0}}(dx) = \frac{8 \cdot \pi^5 k_B^3}{15 \cdot c_0^3 \cdot h^3} \cdot T^4,$$

auch bekannt als das *Stephan-Boltzmann-Gesetz*.

.....

□ Führe die angedeutete Substitution in U in der Herleitung des Stephan-Boltzmann-Gesetzes durch und zeige, dass die Energie pro Volumen $U(T)$ proportional zu T^4 ist. Benenne den Faktor durch σ_B . (S15)

□ Wechsle die Eingabe von U von T nach λ , indem du U mit passendem Φ verkettest. (S16)

.....

Für das Maximum der Funktion U muss zunächst $\text{kritP}(U)$ durch die Gleichung $dU(\lambda)(h) = 0_{\mathbb{R}}$ bestimmt werden. Lösungen und damit Einträge von $\text{argmax}(U)$ sind

$x = (h \cdot c_0)/(k_B \cdot T \cdot \lambda)$ und $x = 5 \cdot (1 - \exp(x))$. Die numerische Lösung ist $x \approx 4.965114$. Umstellen liefert sodann

$$T \cdot \lambda_{\max} = \frac{h \cdot c_0}{4.95114 \cdot k_B} \approx 2.998 \cdot 10^{-3} \text{ m K}.$$

-
- (S17) ☐ Recherchiere das *Wiensche-Verschiebungsgesetz*. Wie hängt es mit der skizzierten Maximumssuche zusammen?
- (S18) ☐ Folge der Anweisung oben. Bestimme $dU(\lambda)(h)$ und löse $dU(\lambda)(h) = 0$. Verifiziere die Lösung $x = (h \cdot c_0)/(k_B \cdot T \cdot \lambda)$.
- (S19) ☐ Bestimme numerisch die Lösung der Gleichung.
-

VL 8

24.04.2023,
11:45

Experiment 5. *Ladungsnachweis Wimshurstmaschine und Photoplatte.*

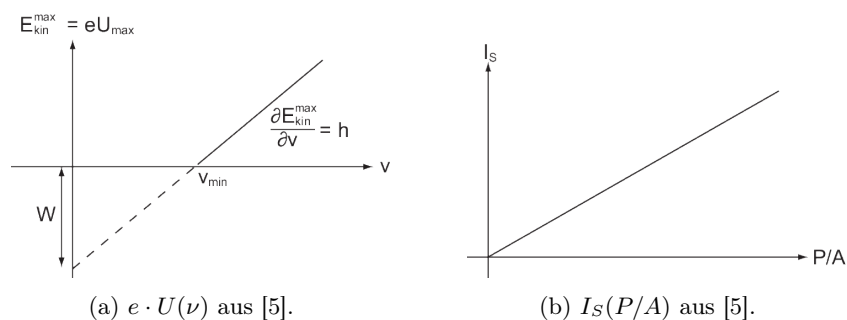
Bestrahlen der Photoplatte mit und ohne Glasscheibe. Ohne Scheibe ist Ladungsabfall erkennbar, mit Scheibe nicht. Wir beobachten:

- *Entladung einer negativ geladenen Zn-Photoplatte durch Bestrahlung mit Licht.*
- *Bei positiv geladener Platte verändert sich der Zeigerausschlag nicht.*
- *Mit Glasplatte findet keine Entladung statt: der UV-Anteil des Lichtes wird von der Scheibe absorbiert.*

Die quantitative Durchführung mit der Gegenfeldmethode liefert folgende Beobachtungen:

- *Beuleuchtung einer Metallplatte führt zur Induktion elektrischen Stroms und eines Auslösens von Elektronen ab einer gewissen Grenzfrequenz $f_{gr} \in \mathbb{R}_{>0}$.*
- *ν_{gr} hängt von dem Material der Platte ab.*
- *I hängt von der Intensität P des Lichtes ab, ν_{gr} jedoch nicht.*
- *Ab einer negativen Spannung U_{\max} wird der Stromfluss verhindert.*
- *U_{\max} ist nicht von P abhängig.*
- *U_{\max} ist linear von ν abhängig.*
- *Der Sättigungsstrom I_S hängt linear von P ab.*
- *Die Elektronen werden verzögerungsfrei herausgelöst.*

Trägt man die Messdaten in Graphen auf, erhält man folgende Schemata:



Die Interpretation der experimentellen Befunde liefert Einstein: er stellt die *Lichtquantenhypothese* auf. Sie postuliert folgende Annahmen:

1. Die einfallende Strahlung besteht aus *Lichtquanten* (Photonen) mit Energie $E = h \cdot \nu$.
2. Jedes absorbierte Photon gibt seine Energie vollständig an ein sogenanntes *Photoelektron* (herausgelöstes Elektron) ab.
3. Die Austrittsarbeit W muss aufgebracht werden, um Elektronen aus dem Festkörper hinauszulösen zu können: $h \cdot \nu > W_A$
4. Für die kinetische Energie der Elektronen folgt $E_{kin}^{max}(\nu) = h \cdot \nu - W_A$. Haben die Atome die Anregungsenergie E_B , so muss zusätzlich noch berücksichtigt werden $E_{kin}(\nu) = h \cdot \nu - W_A - E_B$. [\rightarrow Niveausprung]
5. Bei Gegenspannung $U = U_{max}$ ist die Geschwindigkeit der Elektronen gleich Null: es gilt der Zusammenhang

$$\frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_e^2 = e \cdot U_{max} \stackrel{\text{def } E_{kin}^{max}(\nu)}{\iff} e \cdot |U_{max}| = h \cdot \nu - W_A.$$

Mit der Photonenenergie- und Impuls

$$E$$

mit Wellenvektor $k \in \mathbb{R}^3$ und $p \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R}^3)$ als Impuls, dann gilt mit *Relativitätstheorie* gerade

$$E^2 = p^2 \cdot c_0^2 + m_0^2 \cdot c_0^4 \stackrel{m_\gamma=0}{\implies} \|p\|_2 = \frac{E}{c_0} = \frac{\hbar \cdot \omega(\nu)}{c_0} \stackrel{(D)}{=} \hbar \cdot \|k\|_2,$$

wobei bei (D) die *Dispersionsrelation* [\rightarrow IK3-E] verwendet wurde.

.....
 □ Rechne noch einmal die Dispersionsrelation nach. Wie lautet das Argumentationsergebnis (S.20)
 für ein Elektron e der Masse m_e ?

Der Compton Effekt

Der *Compton Effekt* diente dem Nachweis des Teilchencharakters von Photonen, wobei wie folgt der Versuch aufgebaut wurde:

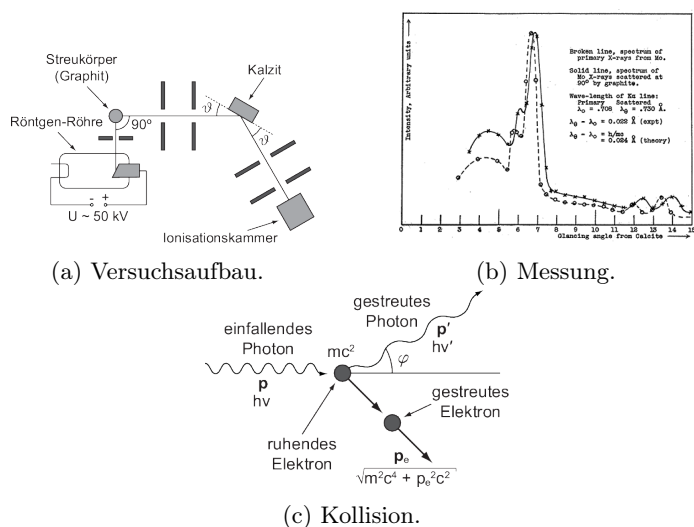


Abbildung 10: Compton Effekt aus [6].

Es zeigt dabei Abbildung 10c die *angenommene inelastische Kollision* eines Photons mit einem Elektron. Somit gelingt *hier* der Brückenschlag aus der Quantenmechanik zur klassischen Mechanik des Zweierstoßes. Wir folgern mit Energieerhaltung

$$\hbar \cdot \omega(\nu) + m_e c_0^2 = \hbar \cdot \omega(\tilde{\nu}) + E_e,$$

wobei die \hbar Terme das Photon und E_e das Elektron beschreiben. Mit Impulserhaltung folgt

$$\mathbf{p} + 0_{\text{Abb}}(\mathbb{R}, \mathbb{R}^3) = \tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_e,$$

sodaß $(1)^2 - (2)^2 \cdot c_0^2$ den Zusammenhang

$$[\hbar \cdot (\omega(\nu) - \omega(\tilde{\nu})) + m_e \cdot c_0^2]^2 - (\mathbf{p} - \tilde{\mathbf{p}})^2 \cdot c_0^2 = E_e^2 - \mathbf{p}_e^2 \cdot c_0^2$$

liefert, wobei unter $E = m_0 c^4 + c_0^2 p^2$ ($p^2 = \langle p, p \rangle_{\mathbb{R}^3}$) folgt

$$-2 \cdot \hbar^2 \cdot \omega(\nu) \cdot \omega(\tilde{\nu}) + 2 \cdot \hbar \cdot (\omega(\nu) - \omega(\tilde{\nu})) \cdot m_0 c_0^2 + 2 \hbar^2 \cdot \omega(\nu) \cdot \omega(\tilde{\nu}) \cdot \cos(\phi(\nu)) = 0$$

für $|\phi| = (\hbar \cdot \omega(\nu))/c_0$ und schließlich

$$\omega(\tilde{\nu}) = \frac{\omega(\nu)}{\hbar \omega(\nu)/(m_0 \cdot c_0^2) \cdot (1 - \cos(\phi(\nu))) + 1}.$$

Für die Wellenlänge $\lambda_e(\nu) = 2\pi \cdot e/\omega(\nu)$ gilt letztlich

$$\Delta \lambda_e(\nu) = \frac{2\pi \cdot e}{\omega(\nu) \cdot \omega(\tilde{\nu})} \cdot (\omega(\nu) - \omega(\tilde{\nu})) =: \lambda_C \cdot (1 - \cos(\phi(\nu))),$$

wobei wir $\lambda_C := h/(m_0 \cdot c_0) \approx 2.4 \cdot 10^{-12} \text{m} = 0.024 \text{\AA}$ als *Compton-Wellenlänge* definieren und die Gleichung $\lambda_e(\nu)$ als *Compton-Streuung* bezeichnen.

-
- (21) □ Rechne die Herleitung der Compton-Streuung nach. Notiere zunächst die Voraussetzungen und halte dich fortgehend an die ersten skizzierten Schritte, wobei du sauber die Terme ausmultiplizierst und kürzt. Orientiere dich zusätzlich an [\rightarrow Demtröder, S. 80].
-

Eigenschaften des Photons

Wir listen wieder einige Eigenschaften des Photons auf:

- Die Photonendichte wird beschrieben als $n = N/V = U_{em}/(h \cdot \nu) = \epsilon_0 \cdot E^2/(h \cdot \nu)$.
- Der Photonenstrom definiert als $\frac{d}{dt}n = I/(h \cdot \nu) = n \cdot c_0$.
- Der Gesamtimpuls als $p = n \cdot \hbar \cdot k$ mit Wellenvektor $k \in \mathbb{R}^3$ oder $|\phi| = n \cdot h/\lambda = U_{em}/c_0$.
- Der Drehimpuls als $L = \pm \hbar \cdot k / \|k\|_2$.

Der Spin ist also Ganzzahlig, wodurch die Photonen den *Bosonen* zugeordnet wird.

Welle-Teilchen-Dualismus

Der *Welle-Teilchen-Dualismus* ist ein zentrales Konzept der Quantenmechanik, welches besagt, daß jedes Teilchen sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften besitzt. Dieses Konzept wurde von *Louis de Broglie* eingeführt. Er verknüpfte den Impuls $p \in \mathbb{R}^3$ mit dem Wellenvektor $k \in \mathbb{R}^3$ durch $p = \hbar \cdot k$ und der *de Broglie Wellenlänge*.

Das Doppelspaltexperiment

Als Paradebeispiel dieses Dualismus gilt das berühmte *Doppelspaltexperiment*. Welche Objekte hierbei verwendet werden, stellt sich als vielfältig heraus: von makroskopischen Teilchen, klassische Wellen oder auch Quantenobjekte selbst.

VL 9
 17.05.2023,
 08:15

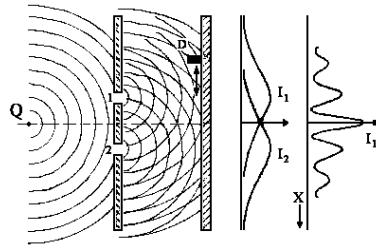


Abbildung 11: Der Aufbau und Ablauf des Doppelspaltexperimentes im Wellenbild aus [7].

Die Amplitude im Teilchenfall ergibt sich dabei durch $I_1 = |A_1|^2$, im Wellenfall dagegen aus $I = |A_1 + A_2|^2$.

□ Berechne die Wellenintensität für zwei komplexe Amplituden $\psi_1, \psi_2 \in \mathbb{C}$.

(S.22)

Experiment 6. Ein Doppelspaltexperiment.

Wir wollen nun die Maxima der Schirmverteilung untersuchen: Hierzu ziehen wir einen Sensor zur Photonenmessung pro Zeitintervall mit verschiebbarer Position x über den Schirm. Die Messwerte suggerieren den erwarteten Verlauf der Wellenintensität.

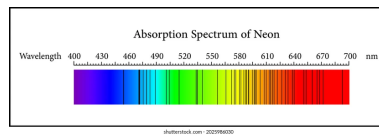


Abbildung 12: Emissionsspektrum am Beispiel von Neon aus [8].

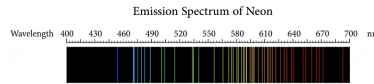


Abbildung 13: Absorbtionsspektrum am Beispiel von Neon aus [?].

2 Das Bohrsche Atommodell

2.1 Absorption und Emission

Im groben Bild stellen wir uns den Aufbau eines Atoms als einen Kern mit Elektronen vor, welche sich auf Kreisbahnen um den Kern bewegen. Letztere bezeichnen wir als *Elektronenhülle*, welche nachfolgend Untersuchungsgegenstand sein wird.

Diese Spektren stellen sich als *charakteristisch* für Atome heraus. Als Beispiel gilt hier die *Balmer-Serie* [→ AP4], welche sich durch die Formel

$$\tilde{\nu} = \lambda^{-1} = R_H \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_{>2},$$

in *normierter Form* beschreiben lässt. Dabei bezeichnet R_H die *Rydberg-Konstante* mit $R_H = 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$. Multipliziert mit c_0 erhalten wir die *Rydberg-Frequenz* $\nu_R = \tilde{\nu} \cdot c_0$. Die Betrachtung $n \rightarrow \infty$ ergibt das *Serien-Grenzkontinuum* $\nu = 1/4 \cdot R_H \cdot c_0$. In diesem Bereich weist das Spektrum keine Linien mehr vor, sondern ist kontinuierlich. Bei Wasserstoff stellt sich heraus, daß es noch weitere Serien gibt; Eine davon ist die *Rydberg-Serie* mit

$$\nu = R_H \cdot c_0 \cdot \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_{>1}, \quad n > k.$$

-
- (23) □ Erkläre, warum die Spektren zueinander komplementär erscheinen. Handelt es sich dabei um eine Phänomenologie, oder lässt sich dies auch theoretisch begründen?
-

2.2 Modell

VL 10 Um die Spektren zu erklären, entwickelte Niels Bohr 1913 ein Modell, welches die
 19.05.2023, Elektronenhülle als diskretes System beschreibt. Es handelt sich dabei im Wesentlichen
 11:45 um eine *Klassifizierung* der eigentlich quantenmechanischen Zustände, welche zum damaligen Zeitpunkt einer Erklärung oder sogar Entdeckung noch schuldig waren. Es verwendet also klassische Annahmen und Argumentationen zur Beschreibung der Beobachtungen. Die Grundlage stellen dabei die *Bohrschen Postulate* dar:

- (i) Die Elektronen bewegen sich auf *Kreisbahnen* um den Kern. Der Radius berechnet sich dabei aus dem Kräftegleichgewicht der *Coulombkraft* und der *Zentrifugalkraft*: $F_C := mv^2/r \stackrel{!}{=} 1/(4\pi\epsilon_0) \cdot e^2/r^2$. Daraus lässt sich eine Radiusgleichung herleiten.

- (ii) Die Elektronen können nur *diskrete* Bahnen einnehmen. Aus der energetischen Perspektive folgt mit $E = E_{kin} + E_{pot}$ und $E_{kin} = 1/2 \cdot mv^2$ bzw. $E_{pot}(r) = \int F_C(\rho) \lambda_{\mathbb{R}_{>r}}(d\rho)$. Hier greift nun der Inhalt des Postulates.
- (iii) Die Elektronenbewegung erfolgt auf ihren Bahnen *strahlungslos*, sodaß Strahlung einen *Sprung* zwischen den Bahnen erfordert. Die abgegebene Energie ist dabei $E_n - E_m = h \cdot \nu_{n \rightarrow m}$. Die *Rydberg-Formel* liefert dabei den Folgenzusammenhang $E = (-R \cdot h \cdot c_0 / (n^2))_{n \in \mathbb{N}}$.
- (iv) Für Grenzwertige E_n entspricht die Bahnumlauffrequenz des Elektrons der beim Sprung emittierten Strahlungsfrequenz. Man würde heute vom sogenannten *Korrespondenzprinzip* sprechen.

.....
☐ Berechne die Radiusgleichung und folgere daraus die Energiegleichung. (S.24)

.....
 Für einen Übergang aus $n \in \mathbb{N}_{>k}$ nach $n - k$ für $k \in \mathbb{N}$ ergibt sich die *Bohrsche Frequenzformel*:

$$\nu_{n \rightarrow n-k} = \frac{R \cdot c_0}{n^2} \cdot \left(\frac{1}{(n-k)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{R \cdot c_0}{n^2} \cdot \left(\frac{1}{(1-k/n)^2 - 1} \right),$$

wobei durch Taylorentwicklung im Fall $k = 1$ der Zusammenhang $\nu_{n \rightarrow n-1} \approx R \cdot c_0 \cdot n^{-3}$ folgt.

.....
☐ Betrachte noch einmal die Gesamtenergie $E(r) = (E_{kin} + E_{pot})(r)$. Setze $r(\nu) = r / (2\pi \cdot \nu)$ (S.25) ein.

.....
 Für den Bahnradius im Bohr Modell ergibt sich also

$$r = \left(\frac{\varepsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m_e \cdot e^2} \cdot n^2 \right)_{n \in \mathbb{N}},$$

bzw $r_1 =: a_0$ als konkreter *Bohrradius*. Der Drehimpuls $L \in \mathbb{R}$ ergibt sich für den Aufenthaltsvektor $R_n := r_n \cdot e$ mit e als Linearkombination der Basisvektoren \underline{e} mit der Normbetrachtung

$$\|L_n\|_2 = \|R_n \times p_n\|_2 = r_n \cdot m \cdot v_n = n \cdot \hbar.$$

Problematiken

Sofort fällt einem bei der Betrachtung und gerade dem Vergleich mit heutigen Theorien die fehlende Erklärung der Quantisierung auf. Zwar läuft der Ansatz der Diskretisierung in die richtige Richtung, steht jedoch auf einem instabilen Postulat an der Grenze der klassischen Physik. Weiter ist unklar, weshalb das angenommene Atommodell überhaupt zeitlich stabil sein sollte, also nicht in sich zusammenfällt. Für weitere Aufspaltungen im Spektrum, welche experimentell nachweisbar sind, ist das Modell ebenso nicht geeignet. Der Variation der Linien und der generellen Betrachtung der Spektren in *elektromagnetischen Feldern* ist das Modell ebenfalls nicht gewachsen. Schlussendlich ist das Modell auch nur definiert auf *Einelektronensystemen*, was die Betrachtung von Mehrkörpersystemen ausschließt.

Beispiele

Als Beispiel des Bohrschen Atommodells lässt sich der *Franck Hertz Versuch* [\rightarrow AP4] herbeiführen.

- (S26) \square Recherchiere zum Versuch und finde weitere Beispiele. Warum zeigt der Franck Hertz Versuch die Quantisierung?

3 Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern

3.1 Vorbereitung

Wir nehmen an, daß wir die Lösung der Schrödingergleichung für ein bestimmtes Teilchen kennen, meistens das Wasserstoffatom. Wir kennen also $\psi \in \mathcal{H}$ mit $H\psi = \lambda_\psi \cdot \psi$ zum Eigenwert λ und haben eine Basis $(\psi_i)_{i \in I}$ des Hilbertraums \mathcal{H} . Betrachte die Änderung

$$\delta \text{id}_{L_S(\mathcal{H})}(H)(h) = \text{id}_{L_S(\mathcal{H})} + \text{id}_{L_S(\mathcal{H})}(H + h).$$

Stelle also den Differentialquotienten

$$\frac{H(0) - H(h)}{h} = H'(0) = \delta H(0)(h)$$

auf, sodaß wir $H'(0)$ als Operator auf \mathcal{H} erhalten. Die neue Schrödingergleichung lautet also

$$(\delta H(0)(h)) \left(\sum_{n \in \mathbb{N}} h^n \cdot \psi_i^n \right) = \lambda_{\psi_i} \cdot \left(\sum_{n \in \mathbb{N}} h^n \cdot \psi_i^n \right),$$

wobei wir ψ_i reihenentwickelt haben. Die Korrektur erster Ordnung liefert uns den Eigenwertzusammenhang

$$\lambda_{\psi_i}^1 = \langle \psi_i, (\delta H(0)(h))(\psi_i) \rangle_{\mathcal{H}}.$$

Wir stellen also fest, daß die Korrektur der ersten Ordnung der Erwartungswert der Störung in ungestörten Zuständen ist. Insgesamt gilt $\lambda_i = \lambda_i^0 + \lambda_i^1$. Dabei ist der Skalarproduktausdruck ein Diagonaleintrag einer $d \times d$ Matrix (im endlichdimensionalen Fall).

Übergangswahrscheinlichkeit

Als *Übergangswahrscheinlichkeit* bezeichnen wir das Funktionsergebnis von

$$\Gamma := \left(\frac{2\pi}{\hbar} \cdot \int_{\sigma_{\mathcal{A}}} |x|^2 \delta_{\lambda_{\psi_b}, \mathcal{A}}(dx) \right)_{(a,b) \in [n]^2}$$

mit A_h als Sigmaalgebra von $\sigma(\delta H(0)(h))$ und $\sigma_{\mathcal{A}_h}$ als Spektrum von $\delta H(0)(h)$.

VL 12

@home

31.05.2023,

08:15

VL 14

19.06.2023,

11:45

3.2 Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld

3.3 Der Zeemann-Effekt

Unter dem *Zeemann Effekt* versteht man die Aufspaltung der Spektrallinien eines Atoms in einem äußeren Magnetfeld. Dieser Effekt wurde 1896 von Pieter Zeeman

entdeckt und 1902 mit dem Nobelpreis ausgezeichnet. Er ist ein Beispiel für die Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment eines Elektrons und einem externen Magnetfeld. Die Aufspaltung der Spektrallinien ist dabei ein direkter Nachweis für die Quantisierung des Drehimpulses. Man unterscheidet zwischen dem *normalen* und dem *anormalen* Zeeman-Effekt.

3.4 Freies Elektron im Magnetfeld

Mit dem sogenannten *Landau Ansatz* sei $A := ((0, x \cdot B(x), 0))_{x \in \mathcal{H}}$ ein Vektorpotential. Dann gilt für den Hamiltonoperator

$$H = \left(\frac{1}{2 \cdot m_e} \cdot (p(x) - e \cdot A(x)) \right)_{x \in \mathcal{H}},$$

sodaß in ausgeschriebener Form für ein $x \in \mathcal{H}$ gilt

$$H(x) = \frac{1}{8 \cdot m_e} \cdot \left(p_1^2(x) + (p(x)_2 - e \cdot B(x) \cdot x)^2 + p_2^2(x) \right).$$

Mit dem Ansatz $\psi := (\exp(i \cdot (k_3 \cdot x_3 + k_2 \cdot y)) \cdot f(x_1))_{x \in \mathbb{R}^3} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ mit $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ können wir die Eigenwertgleichung $H\psi = \lambda \cdot \psi$ lösen.

.....

□ Setze ψ in H ein. Welche Quantenzahl bleibt übrig? (S27)

.....

Definiere die *Zyklothronfrequenz* als $\omega_c := e \cdot B/m_e$ und $x_0 = \hbar \cdot k_2/(m \cdot \omega_c)$, dann lässt sich das Ergebnis der Aufgabe ausschreiben zu

$$\underbrace{\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e} \cdot \left(\frac{d}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot \omega_c \cdot (x - x_0)^2 \right)}_{\text{harmonischer Oszillator}} + \underbrace{\frac{\hbar^2 \cdot k_3^2}{2m_e}}_{\text{freie Energie in } z} \Big) (f)(x) = \lambda \cdot f(x).$$

Eigenwertbetrachtung

Wir hatten bereits als Eigenwertfolge des harmonischen Oszillators $U \mapsto \lambda := (\hbar \cdot \omega_e \cdot (n + \dim(U)/2))_{n \in \mathbb{N}}$ gesehen, wobei U der Unterraum der Schwingung darstellt. Im eindimensionalen Falle wähle $U = \mathbb{R}$ und korrigiere um den Faktor $\hbar^2 \cdot k_3/(2 \cdot m_e)$. Für die Wellenfunktion erhalte

$$\psi := \left(C \cdot \exp(i \cdot (k_3 \cdot x_3 + k_2 \cdot x_2)) \cdot \exp\left(-\frac{e \cdot B}{2\hbar} \cdot (x - x_0)^2\right) \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{e \cdot B}{\hbar}} \cdot (x - x_0)\right) \right)_{x \in \mathbb{R}^3},$$

wobei H_n das n -te Hermitepolynom ist [→ IK4T].

Die Systemzustände werden bei verschwindendem Magnetfeld $B = 0$ auf die *Landau Zustände* umverteilt. Für die Entartung gilt dann

VL 15
 21.06.2021,
 08:15

$$E = \frac{S_{n,n+1}}{S_0} = \frac{2\pi m \omega_c}{\hbar},$$

3.5 Felder und Potentiale in der Quantenphysik

Mit der Felddarstellung $E = -\operatorname{div} \varphi - \frac{d}{dt} A$ und $B = \operatorname{rot} A$ können wir in die Quantenphysik durch die Transformation $\Phi := \varphi - \frac{d}{dt} \Lambda$ und $\mathcal{A} := A + \operatorname{div} \Lambda$, wobei $\Lambda \in \mathbb{C}^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3, \mathbb{R})$.

Experiment 7. Gedankenexperiment.

Stelle dir ein Elektron auf einer Kreisbahn mit festem Radius $r \in \mathbb{R}_{>0}$ um eine feste Achse $R \in \mathbb{R}^3$ vor. Setze nun eine dünne Spule mit Durchmesser $d_S < 2r$ entlang R ein, durch welche ein Strom I fließt. Sei die Spule ideal, also unendlich ausgedehnt und dicht gewickelt. Mit dem Satz von Stokes gilt dann

$$\text{rot } B = \mu_0 \cdot j \implies \int_{\partial F} \langle B, \psi(t) \rangle dt = \mu_0 \cdot I,$$

wobei ψ auf der Kurve ∂F die Normalen ausgibt. Durch geschickte Wahl der Fläche F (siehe IK2 Klausur) können wir mit der Kantenlänge L innerhalb der Spule eines angenommenen Quadrates multiplizieren, sodaß für das innere Magnetfeld $B \cdot L = \mu_0 \cdot I \cdot N$ gilt. Für das äußere Magnetfeld gilt dann $B = 0$. Wir erhalten für das Potentialfeld A dann

$$A = \left(\frac{\mu_0 \cdot N \cdot I}{2 \cdot L} \cdot \left\{ \begin{array}{c} \frac{r^2}{a} \cdot \underline{e}_\varphi \\ a \cdot \underline{e}_\varphi \end{array} \right\}_{a \in \mathbb{R}^3} \right).$$

(S28)

□ Stelle den Hamiltonoperator für ein Elektron ohne Spin in dieser Konfiguration auf. Wähle dann eine Substitution β und ε , sodaß du auf die Form der Oszillatorgleichung $-\lambda^2 + 2\beta \cdot \lambda + \varepsilon = 0$ kommst. Daraus kann man nun folgern, daß die Energieeigenwerte des Elektrons in der Spule gequantelt sind.

Wir können die Funktion

$$E := \left(\frac{\hbar^2}{2 \cdot m \cdot d_S} \cdot \left(n - \frac{e \cdot \Phi}{2\pi \cdot h} \right)^2 \right)_{n \in \mathbb{Z}}$$

ableiten. Das spannende hierbei ist, daß es außerhalb, also in Umgebung des Elektrons, kein Feld vorliegt, jedoch trotzdem eine Auswirkung auf das Elektron erkennbar ist.

(S29)

□ Recherchiere zu diesem Problem weiter unter Aharonov-Bohm-Effekt und Quantenmechanik Skript.

VL 16

 22.06.2023,
 10:00

3.6 Lebensdauer angeregter Zustände und Linienbreiten

Unter der Lebensdauer angeregter Zustände verstehen wir die mittlere Zeit, die ein Atom im angeregten Zustand verbringt, bevor es in den Grundzustand zurückkehrt. Die spontane Emission der Photonen erfolgt durch die Wechselwirkung mit dem Vakuumfeld, dem sogenannten *Vakuumfluktationsfeld*. Die Wahrscheinlichkeit eines solchen Überganges wird mit dem EINSTEIN-KOEFFIZIENTEN $(n, m) \mapsto A_{n \rightarrow m}$ beschrieben. Ein solcher Vorgang führt dann zur Aussendung eines Photons der Energie

$(n, m) \mapsto h \cdot \nu_{n \rightarrow m}$. Es ist dann die Anzahl der Übergänge pro Zeit gegeben durch

$$\frac{d}{dt} N_n = -A_{n \rightarrow m} N_n \iff \frac{d}{dt} N_n = -N_n \cdot A_n, \quad A_n := \sum_{m \neq n} A_{n \rightarrow m}.$$

Durch die Annahme von *Homogenität* und *Isotropie* des Vakuumfluktationsfeldes sehen wir stets diesen linearen Zusammenhang.

.....
☐ Recherchiere in diesem Zusammenhang die *virtuellen Photonen* und den *Casimir-Effekt*. (§30)

.....
 Aus der angegebenen Differentialgleichung stellt die Lösung

$$N(t) = N_i(0) \cdot \exp(-A_n \cdot t), \quad N(0) = N_i(0)$$

die *Besetzungsfunktion* und in der Auswertung die *Besetzungszahl* dar. Die mittlere Lebensdauer τ_n ist dann gegeben durch $\tau = (1/A_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Führt man den Begriff der *Übergangswahrscheinlichkeit* für einen weiteren Prozess ein, so ergibt sich $\frac{d}{dt} N_n = -(A_n + R_n) \cdot N_n$ und für die *effektive Lebensdauer* $\tau^{\text{eff}} = (1/(A_n + R_n))_{n \in \mathbb{N}}$.

Linienbreite

Mittels der Heisenbergschen Unschärferelation $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$ hat die *spektrale Linienbreite* die Form einer Gaußverteilung. Die *natürliche Linienbreite* ist dabei gegeben durch $\Delta\nu = \hbar/(2\pi\tau_n)$. Hierfür muss die klassische Oszillatorgleichung $x'' + \gamma \cdot x' + \omega_0^2 x = 0$ gelöst werden:

$$x(t) = x_0 \cdot \exp(-\gamma t/2) \cdot \left(\cos(\omega t) + \frac{\gamma}{2\omega} \sin(\omega t) \right), \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}.$$

Für $\gamma \ll \omega_0$ ergibt sich $\omega \approx \omega_0$ und $\gamma/(2\omega) \ll 1$, sodaß $x(t) \approx x_0 \cdot \exp(-\gamma t/2) \cdot \cos(\omega t)$. Um an das Spektrum $A(\omega)$ zu gelangen, muss eine Fouriertransformation durchgeführt werden. Wir erhalten

$$A(\omega) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_R x(t) \cdot \exp(-i\omega t) dt,$$

sodaß sich durch Einsetzen schließlich die Funktion

$$A(\omega) = \frac{x_0}{\sqrt{2\pi}} \cdot \left(\frac{1}{i \cdot (\omega_0 - \omega) + \gamma/2} + \frac{1}{i \cdot (\omega_0 + \omega) + \gamma/2} \right).$$

In einer Umgebung von ω_0 gilt damit für die Leistung $P(\omega) \propto A(\omega) \cdot (A(\omega))^*$.

.....
☐ Fülle die Lücken dieser Herleitung auf und bestimme P . Das Vorlesungsergebnis lautet (§31)
 dabei $P(\omega) = P_0 \cdot (\gamma/(\pi 2)) / ((\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2)$, benannt als *Lorentz-Kurve*. Bestimme die Halbwertsbreite $\Delta\omega = \gamma$.

☐ Zeige an dieser Stelle den Zusammenhang zur charakteristischen Zeit $\tau = 1/\gamma$, $\tau_n = 1/A_n$ (§32)
 aus führen Überlegungen.

.....

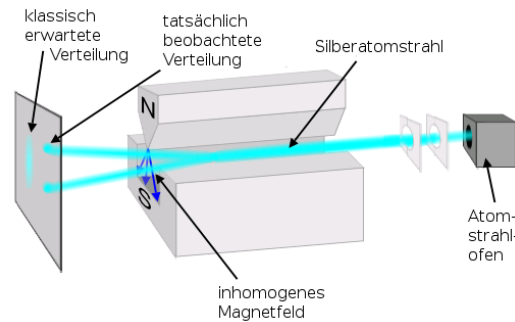


Abbildung 14: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Experiments.

Doppler Verbreiterung

Die *Doppler Verbreiterung* ist ein Effekt, der durch die thermische Bewegung der Atome hervorgerufen wird. Die Geschwindigkeitsverteilung der Atome ist dabei durch die *Maxwell-Boltzmann-Verteilung* gegeben. Für eine Atomgeschwindigkeit $v \in \mathbb{R}^3$ ergibt sich zunächst der *Dopplereffekt* mit $\omega = \omega_0 + \langle k, v \rangle$. In die z Richtung ergibt sich dann eine Verteilung

$$P(v_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \Delta v_z} \cdot \exp(-v_z^2 / (2\Delta v_z^2)), \quad \Delta v_z = \sqrt{\frac{k_B \cdot T}{m}}.$$

- (S33) □ Führe eine Transformation auf die Frequenz durch und bestimme die Verteilung $P(\omega)$.

4 Der Spin

4.1 Stern-Gerlach-Experiment

Das *Stern-Gerlach Experiment* weist die Richtungsquantelung des Drehimpulses nach. Dabei wird ein Strahl von Silberatomen durch ein inhomogenes Magnetfeld geschickt. Der schematische Aufbau des Experiments ist wie folgt: Der Spinnachweis gelingt dabei dadurch, daß die Atome in zwei verschiedene Richtungen abgelenkt werden.

- (S34) □ Zur Anschauung des Prinzips betrachte das hinterlegte →Video.

- (S35) □ Betrachte die hinterlegte →Grafik und erkläre die dazu führenden Prozesse.

VL 17 26.06.2023 11:45 Um die Wechselwirkung des Spins mit dem Magnetfeld zu beschreiben, wechseln wir in die semiklassische Betrachtungsperspektive. Gehe hierzu über in das Bezugssystem des sich um den Kern bewegenden Elektrons. Für eine mit Strom I durchflossene Kurve, hier die Flugbahn des Elektrons, mit eingeschlossener Fläche A ergibt sich nach Biot Savart das Magnetfeld

$$B(v) = \left(\frac{\mu_0 \cdot Ze}{4\pi \cdot \|r\|_2^3} \cdot (v \times r) \right)_{r \in \mathbb{R}^3} \in L_S(\mathbb{R}^3)$$

mit $v \in \mathbb{R}^3$ als Rotationsgeschwindigkeit.

.....

□ Die hier angedeutete Transformation der Koordinatensysteme ist nach relativistischer Einsicht nicht mehr einfach. Führe die Berechnung unter Berücksichtigung der Lorentz Transformation durch. Verifiziere den Zusammenhang der beiden Lösungen durch den Faktor $1/2$ (*Thomas Faktor*). (S.36)

□ Zeige nun, daß es sich bei $B : \mathbb{R}^3 \rightarrow (\text{Abb}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3))$ tatsächlich um eine Abbildung in den Operatorraum der linearen stetigen Operatoren $L_S(\mathbb{R}^3) \subset \text{Abb}(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$ handelt. (S.37)

□ EnKorr Bestimme den Energiekorrekturterm $E_{J,S}$ für das Magnetfeld. Im Ergebnis sollte er sich auf $E_{J,S} = 2\mu_B/\hbar \cdot \sum_{i \in [3]} S_i \circ (B_J)_i$ belaufen, wobei (S.38)

.....

Transformieren wir $B(v)$ nun zu $B(J)$ mit $J = m_e \cdot (r \times v)$ als Drehimpulsoperator in $L_S(\mathbb{R}^3)$ und $m_e \in \mathbb{R}$ als Masse des Elektrons, so erhalten wir den Zusammenhang

$$B(J) = \left(\frac{\mu \cdot Z \cdot e}{4\pi \cdot \|r\|_2^3 \cdot m_e} \cdot (J \times r) \right).$$

Dies nutzen wir nun weiter aus, indem wir die in der Aufgabe (A.EnKorr) berechnete Energiekorrektur $E_{J,S}$ mithilfe von B_J ausschreiben. Dies führt uns zu dem ersten *Energiekorrekturterm* des Hamiltonoperators des Systems im *nicht relativistischen* Blickpunkt; Wir verzichten an dieser Stelle auf die Ausführung der konkreten Herleitung, da sie ebensowenig Inhalt der Vorlesung war und lassen sie als Übungsaufgabe.

.....

□ Führe eine Reihenentwicklung des Hamiltonoperators durch und identifiziere die ersten Terme als *Energiekorrekturterme*. (S.39)

.....

Daraus ergibt sich der um den Spin korrigierten Hamiltonoperator

$$H_{V,J,S} := \left(\frac{P^2(x)}{2m} + V(Q)(x) + \lambda_{J,S,0} \cdot \sum_{i \in [d]} (S_i \circ J_i)(x_i) \right)_{x \in \mathbb{R}^d},$$

wobei $n \mapsto S_n \in L(\mathbb{R})$ ein *Spinoperatortupel* und $n \mapsto J_s \in L_S(\mathbb{R})$ ein *Drehimpulsoperatortupel* ist. $n \mapsto P_n$ und $n \mapsto Q_n$ bleiben wie gewohnt *Impuls-* und *Ortsoperatortupel*, $d \in \mathbb{N}$ stellt die Raumdimension dar. Wir nehmen hier stillschweigend an, daß die Operatoren $S, J \in L_S(\mathbb{R}^3)$ zerlegbar in Tupel dieser Form sind.

.....

□ Wann ist ein Operator $S \in L_S(\mathbb{R}^3)$ zerlegbar in ein Tupel aus Operatoren $n \mapsto S_n$ mit $S_n \in L_S(\mathbb{R})$? (S.40)

□ Berechne die Eigenwerte von S_3 durch $S_3(x) = \lambda_3 \cdot x$. Verifiziere $\lambda_3 = \hbar \cdot m$. (S.41)

□ Berechne den Kommutator $[H_{V,S,n}, J_3] = i\hbar\lambda \cdot (J \times S)_z \neq 0$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$ als Eigenwert von J_3 . Recherchiere dazu den Zusammenhang zur *Feinstrukturkonstante*. (S.42)

.....

Es stellt sich heraus, daß die magnetische Quantenzahl unter Beachtung des Spins keine eindeutige Zuordnung der Eigenfunktionen mehr stattfinden. Durch die *Spin-Bahn-Kopplung* muss nun der Gesamtdrehimpuls $\mathcal{J} = J + S$ betrachtet werden. Hier können wir dann eine neue Quantenzahl einführen: die *Gesamtdrehimpulsquantenzahl* $j \in \mathbb{N}$. Dadurch wird das System erweitert: Wir haben $n \in \mathbb{N}$ als Hauptquantenzahl kennengelernt, $l \in [n-1]$ als Nebenquantenzahl, $s \in \{-1/2, 1/2\}$ als Spinquantenzahl und $m \in [l]_{\mathbb{Z}}$ als magnetische Quantenzahl. Nun kommt $j \in \{l-s+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [l-s, l+$

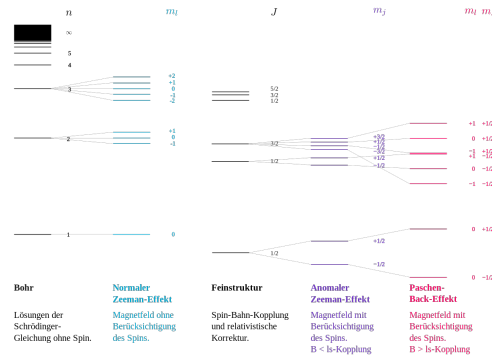


Abbildung 15: Aufspaltung der Spektrallinien des Wasserstoffatoms im Magnetfeld.

s] als *Gesamtdrehimpulsquantenzahl* und $m_j \in \{-j+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [-j, j]$ als *magnetische Gesamtdrehimpulsquantenzahl* hinzu. Unser neues System zur Beschreibung ist also

$$(n, s) \mapsto (n, l_n, s, j_{l,s}, m_j) \in \mathbb{N} \times [n-1] \times \{-\hbar/2, \hbar/2\} \times \mathbb{R} \times [j]_{\mathbb{Z}}$$

für ein Eingabetupel $(n, s) \in \mathbb{N} \times \{-1/2, 1/2\}$.

.....
 (S43) □ Definiere einmal die genauen Mengen, aus welchen die Quantenzahlen stammen. Fülle die Lücken in der obigen Definition aus.

(S44) □ Zeige die Kommutatoreigenschaften $[H_{V,S,n}, J^2] = 0$, $[H_{V,S,n}, S^2] = 0$, $[H_{V,S,n}, \mathcal{J}^2] = 0$ und $[H_{V,S,n}, \mathcal{J}_3] = 0$.

(S45) □ Recherchiere zur *Spin-Bahn-Kopplungskonstante* ξ und füge sie in das Modell ein.

.....
 Für ein Wasserstoffatom ergibt sich beispielsweise $j_+ = l + 1/2$ und $j_- = l - 1/2$. Dadurch spalten die Energieeigenwerte von $H_{V,S,n}$ auf in zwei Energieeigenwerte E_{n,l,s,j_{\pm},m_j} , die *Feinstruktur* des Wasserstoffatoms. Für $l = 1$ und $s = 1/2$ ergibt sich $j_+ = 3/2$ und $j_- = 1/2$. Die Energieeigenwerte sind dann gegeben durch $\xi/2 \cdot (j \cdot (j + 1) - l \cdot (l + 1) - s \cdot (s + 1))$.

.....
 (S46) □ Berechne die Energieeigenwerte auf diesen Grundlagen.

(S47) □ Recherchiere zur *Feinstruktur* des Wasserstoffatoms.

Zusammenfassen

Durch die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Bahndrehimpuls bzw. des Bahnmomentes spaltet jedes Niveau des Wasserstoffatoms in zwei Niveaus auf (allgemein $2j + 1$).

→ Für s Terme mit $l = 0$ gibt es keine Aufspaltung, da kein Magnetfeld vorliegt.

→ Niveaus mit größerer Quantenzahl sind energetisch höher.

→ Die Aufspaltung ist proportional zu Z^4 : $\Delta E \approx Z^4 / (h^3 \cdot (l + 1/2) \cdot (l + 1))$.

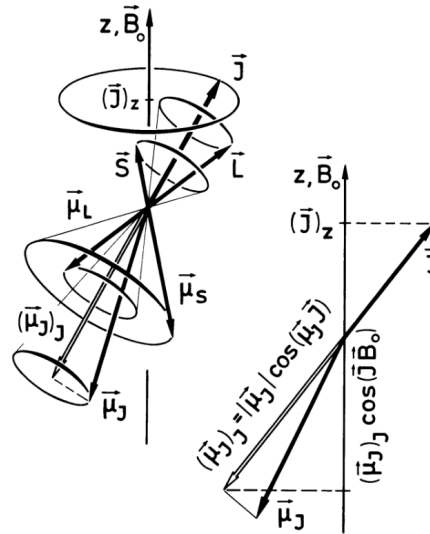


Abbildung 16: Präzession der Drehimpulsvektoren von Elektron und Kern.

4.2 Anomaler Zeemaneffekt

□ Schreibe eine schöne Geschichte zu diesem Thema. [→ Haken-Wolf]

(§48)

□ Berechne die zeitliche Mittelung von μ_j .

(§49)

VL 18

28.06.2023

Betrachtung im schwachen Magnetfeld

In einem Magnetfeld, in welchem die Spin Bahn Kopplung noch erhalten ist, gilt für ein Magnetfeld in z -Richtung $B = (0, 0, B_z)$ der Drehimpuls $J_3 = m_j \cdot \hbar$ mit $m_j \in [j]_{\mathbb{Z}}$. Der zeitliche Mittelwert von μ_j ist damit $\langle \mu_j \rangle_3 = -m_j \cdot g_j \cdot \mu_B$, wobei μ_B das *Bohrsche Magneton* und g_j der *Landé-Faktor* ist.

Spektroskopische Notation

Das Termschema ist eine Darstellungsmethode der Energieniveaus eines Atoms inklusive (aller) erlaubten Energieübergänge. Diese Energieniveaus werden dabei kompakt in Tupelform $(n, L, J, S) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R}^3$ geschrieben, wobei S den *Gesamtspin*, J den *Gesamtdrehimpuls* und L den *Bahndrehimpuls* angibt. Dabei kann analog auch $(n, \mathcal{L}_n, \mathcal{B}_J, S)$ als Zahl- Buchstabentupel notiert werden, wobei \mathcal{B} die Zuordnungen $0 \mapsto S$, $1 \mapsto P$, $2 \mapsto D$ usw. bezeichnet. Man notiert dann als *Termsymbol* einen Zustand der Form

$$(n, L, J, S) \mapsto n^{2S+1}(\mathcal{B}_L)_J.$$

Für Wasserstoff ergibt sich beispielsweise $S = 1/2$, $L = 0$ und $J = 1/2$ zu $^2S_{1/2}$. Für $L = 1$ und $J = 3/2$ ergibt sich $^4P_{3/2}$.

Nuklidnotation

Eine ähnliche Methode zur Sprechweise über *Nuklide*, also eine „Ausführung eines Atoms“, ist die *Nuklidnotation*. Hierbei wird dem Elementsymbol X die Massenzahl A

und die Ordnungszahl Z angehängen, sodaß die Beschreibung sich in der Form

$$(X, A, Z, z) \mapsto A_X^Z z$$

ergibt. Das zusätzliche Symbol z soll einen Ionisierungszustand des Elementes anzeigen und kann daher ersetzt werden durch Vielfache von „+“ oder „-“.

4.3 Der Paschen-Back-Effekt

Wir wechseln nun in das Setting eines starken Magnetfeldes. Hierbei ist die Spin-Bahn-Kopplung nicht mehr erhalten, da das Magnetfeld die Drehimpulsoperatoren dominiert. Damit orientieren sich L und S unabhängig voneinander im Magnetfeld, j fällt damit als Beschreibungsparameter weg. Die spektrale Energieaufspaltung ist dann gegeben durch

$$\Delta E = (g_l \cdot m_l + g_s \cdot m_s) \cdot \mu_B \cdot B.$$

5 Hyperfeinstruktur und weitere Effekte auf die Energieniveaus des Wasserstoffatoms

VL 19
 29.06.2023,
 10:00
 (18)

5.1 Hyperfeinstruktur

5.2 Das vollständige Kernschema

Wir schulden dem Modell nun noch wenige Korrekturen, wobei wir die Spin-Bahn-Kopplung bereits diskutiert haben:

- (i) Die relativistische Korrektur des Elektrons im Coulomb Potential.
- (ii) Die Verschmierung der Elektronenladung $-e$ über ein Volumen $\lambda_C^3 = (\hbar/(m_e \cdot c_0))^3$.

Zum ersten Punkt finden wir über die Energie $E = \sqrt{p^2 c_0^2 + m^2 c_0^4} - m_c^2 + E_{pot}$ die Beziehung

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_{pot} - \frac{p^4}{8m^3 c_0^2} + \dots = E_{nrel} - \Delta E_{rel}.$$

- (50) □ Leite die Energiebeziehung für das relativistische Elektron im Coulomb Potential mittels Reihenentwicklung her.

Dabei können wir $\Delta E_{rel} = \langle n, l, m | H' | n, l, m \rangle$ bestimmen, indem wir den Hamiltonoperator $H' := -\frac{P^4}{8m^3 c_0^2}$ definieren.

$$V \mapsto \int_V E_{kin}(r) \mu(dr)$$

- (51) □ Entwickle die Funktion E_{kin} um $r \in \mathbb{R}^3$ und klassifiziere die ersten drei Terme durch (i) ungestört, (ii) Kugelsymmetrie und (iii) Korrektur.

5.3 Überblick: Spektrale Eigenwertaufspaltung

Wir haben bereits die möglichen Aufspaltungen von Eigenwerten in verschiedenen Szenarien kennengelernt und diskutiert. Hier wollen wir diese noch einmal zusammenfassen. Beginnend mit dem *idealen* Fall des Hamiltonoperators $H \in L_S(\mathcal{H})$ eines Elektrons in einem Potential $V : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ können wir durch $H|n\rangle = E_n \cdot |n\rangle$ eine Eigenwertfolge $E : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{C}$ mit Eigenvektoren $|n\rangle \in \mathcal{H}$ definieren. In der ersten Erweiterung dieses Modells müssen wir unterscheiden zwischen *spinfreien* und *spinbehafteten* Perspektiven. Wir starten hier nun rückwärts mit dem spinbehafteten Fall.

Spinbehafteter Fall

Der spinbehaftete Fall führt die *Spin-Bahn-Kopplung* ein. Hierbei wird ein erweiterter Hamiltonoperator $H_{SB}|n, l, j, s\rangle = E(n, l, j, s) \cdot |n, l, j, s\rangle$ und ein erweitertes Set an Quantenzahlen $(n, l, j, s) \in \mathbb{N} \times [n-1] \times D_j \times \{\pm 1/2\}$ für $D_j := \{j-s+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [l-s, l+s]$ eingeführt. Diese Zahlen sortieren nun den Eigenvektoren $|n, l, j, s\rangle \in \mathcal{H}$ den entsprechenden Eigenwert durch die Funktionsdefinition

$$E_{SB}(n, l, j, s) := \underbrace{\frac{\lambda}{2} \cdot (j \cdot (j+1) - l \cdot (l+1) - s \cdot (s+1))}_{=: \Phi_{\lambda, l, s}(j, l, s)} + E_n$$

zu. Die Bausteinfunktion Φ definieren wir dabei, um später klarer über die groben Konzepte sprechen zu können³.

Führen wir unsere Überlegungen für die Anwesenheit eines Magnetfeldes fort, so fordern wir in einem vereinfachten Modell stets $B = (0, 0, B_z) \in \mathbb{R}^3$. Man klassifiziert hier weiter durch die *Stärke*, also $\|B\|_2$, welchen Effekt man erwartet und zur Eigenwertbestimmung verwendet: für ein *schwaches* Magnetfeld $\|B\|_2$ verwendet man das Modell des *anormalen Zeeman-Effekts* und für ein *starkes* Magnetfeld $\|B\|_2$ das Modell des *Paschen-Back-Effekts*. Hierzu definieren wir erneut eine Bausteinfunktion $\Psi := (x \cdot \mu_B \cdot B_z)_{x \in \mathbb{R}}$, sodaß komparabel die Eigenwertfolgen festhalten können:

$$\begin{aligned} E_{aZ}(n, l, j, s, m_j) &:= E_n + \Phi_{\lambda}(j, l, s) + \Psi(g_j \cdot m_j), \\ E_{PB}(n, l, j, s, m_j, m_s) &:= E_n + \Phi_{\lambda}(j, l, s) + \Psi(g_j \cdot m_j) + \Psi(g_l \cdot m_l). \end{aligned}$$

Eine leicht veränderte Sammlung von Quantenzahlen ordnen hierbei nun als Funktionsargumente die Eigenwerte zu; Sie sind hier von der Form $(n, l, j, s, m_j, m_s) \in \mathbb{N} \times [n-1] \times D_j \times \{\pm 1/2\} \times D_{m,j} \times D_{m,s}$, wobei $D_{m,j} := \{-j+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [-j, j]$ und $D_{m,s} := \{-s+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [-s, s]$.

Die zweite Erweiterung liefert nun die Hyperfeinstruktur, welche die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Kern beschreibt. Hierbei wird ein weiterer Hamiltonoperator $H_{HF}|n, l, j, s, I, F\rangle = E_{HF}(n, l, j, s, I, F) \cdot |n, l, j, s, I, F\rangle$ und ein weiteres Set an Quantenzahlen $(n, l, j, s, I, F) \in \mathbb{N} \times [n-1] \times D_j \times \{\pm 1/2\} \times \mathbb{N} \times D_F$ für $D_F := \{F-s+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [I-s, I+s]$ eingeführt. Diese Zahlen sortieren nun den Eigenvektoren $|n, l, j, s, I, F\rangle \in \mathcal{H}$ den entsprechenden Eigenwert durch die Funktionsdefinition

$$E_{HF}(n, l, j, s, I, F) := E_n + \Phi_{\lambda}(j, l, s) + \Phi_A(F, j, I)$$

zu. Dabei ist A die *Hyperfeinstruktur-Konstante*⁴.

³Strenggenommen unterschlagen wir den Definitionsbereich des ersten Argumentes λ von Φ : Wir interpretieren den Eintrag hier als „Funktion mit passendem Definitionsbereich“, wobei für unsere Zwecke Abb $(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$ ausreicht; Dann ist $\lambda : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ die *Feinstrukturkonstantenabbildung*.

⁴Hier beachten wir in Anknüpfung an oben die Funktion $A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ mit $x \mapsto A$ als konstante Abbildung auf die Hyperfeinstruktur-Konstante.

.....
 (§52) □ Recherchiere zu einer allgemeineren Beschreibungsmöglichkeit eines Flussvektors $B \in \mathbb{R}^3$.

Spinfreier Fall

Für den spinfreien Fall haben wir bereits alle Werkzeuge genannt. Hier bleibt nur noch eine Zuordnung zu leisten: die *Feinstruktur* ordnet als erste Erweiterung des Hamiltonoperators H_{HF} den Eigenvektoren $|n, l, j, F, I\rangle$ die Eigenwerte der Hyperfeinstrukturfolge zu. Hierbei beachten wir eine technische Besonderheit: da eine Spinabwesenheit vorausgesetzt ist, folgern wir $s = 0$ und schreiben $E_{HF}(n, l, 0, F, I)$.

Beim hinzuschalten eines externen Magnetfeldes B unter derselben Voraussetzung wie oben erhalten wir den *normalen Zeeman-Effekt* mit der Eigenwertfolge

$$E_{nZ}(n, m) := E_n + \Psi(m).$$

6 Mehrelektronensysteme

VL 20 Heute war der letzte Versuch des IKs, präsentiert von Frau Kiliani.
 30.06.2023,

11:45 Wir können eine Wellenfunktion $\psi \in \mathcal{L}^2((\mathbb{R}^3)^2)$ für ein Zweielektronensystem beschreiben durch Separation: $\psi(x, y) = \varphi_x(x) \cdot \varphi_y(y)$.

(§53) □ Verallgemeinere die Aussage auf $n \in \mathbb{N}$ Teilchen. Schreibe das Wahrscheinlichkeitsmaß für zwei Teilchen auf.

Da die Teilchen *ununterscheidbar* sein sollen, muss die Wellenfunktion ψ *symmetrisch* sein, also die Wahrscheinlichkeiten sich bei umgedrehter Ortsauswertung gleichen:

$$|\varphi_x(x) \cdot \varphi_y(y)|^2 \stackrel{!}{=} |\varphi_x(y) \cdot \varphi_y(x)|^2.$$

VL 21 Unter Berücksichtigung des Spins kann die Gesamtwellenfunktion aufgespalten werden zu
 06.07.2023,

10:00
$$\Psi(r_1, r_2, s, m_s) = \psi_{a,b}(r_1, r_2) \cdot \chi(s, m_s)$$

mit $r \in (\mathbb{R}^3)^2$ und $s \in \mathbb{R}^3$ und $m_s \in \{-1/2, 1/2\}^2$.

6.1 Pauli Prinzip

Die Gesamtwellenfunktion eines Systems mit mehreren Elektronen ist immer antisymmetrisch gegen Vertauschung zweier Elektronen. In anderen Worten: Ein durch die Quantenzahlen $(n, l, m, m_s) \in \mathbb{N} \times [n-1] \times [l]_{\mathbb{Z}} \times \{1/2, -1/2\}$ vollständig beschriebener Zustand eines Atoms kann höchstens von einem Elektron besetzt werden. Wir können Teilchen anhand der Wellenfunktion und ihrer Symmetrie bzw. Antisymmetrie in zwei Klassen aufteilen:

- (i) Die *Fermionen* sind Teilchen mit halbzahligem Spin, welche durch eine antisymmetrische Wellenfunktion beschrieben werden. In diese Kategorie fallen beispielsweise Elektronen, Protonen oder Neutronen.
- (ii) Die *Bosonen* sind Teilchen mit ganzzahligem Spin, welche durch eine symmetrische Wellenfunktion beschrieben werden. In diese Kategorie fallen beispielsweise Photonen.

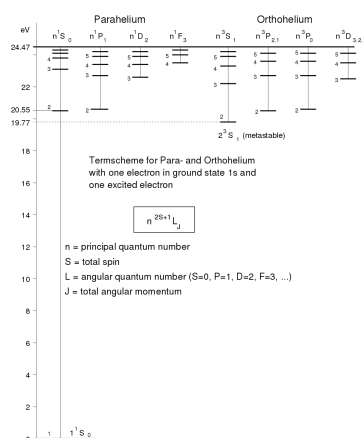


Abbildung 17: Termschema des Heliumatoms aus [10].

6.2 Zwei Teilchen mit halbem Spin

Für zwei Teilchen können die Spinsumationen $\mathcal{S} = m_s(1) + m_s(2) = 1$ oder $\mathcal{S} = 0$ vorkommen. Im ersten Fall können wir dann die Zustände $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ und $|1, -1\rangle$ bilden, im zweiten Fall nur $|0, 0\rangle$. Diese Schreibweise ist dabei als $(\mathcal{S}, M_{\mathcal{S}}) \mapsto |\mathcal{S}, M_{\mathcal{S}}\rangle$ zu verstehen. In Pfeilnotation können wir die Zustände dann schreiben als

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle).$$

Alle Zustände mit einer 1 im ersten Eintrag nennt man in einer Menge zusammengefasst ein *Triplet*, der übrig bleibende Zustand ist dann ein *Singulett*.

.....
 □ Zeige $S^a \cdot S^b = \hbar^2/4$ für $\mathcal{S} = 1$ und $S^a \cdot S^b = -3\hbar^2/4$ für $\mathcal{S} = 0$. Welches Mal verbirgt sich zwischen den Spinoperatorentupel? (54)

.....
 Daraus können wir für die Energieeigenwerte von $H = A \cdot S^a \cdot S^b$ für $A \in \mathbb{R}$ ableiten durch

$$\mathcal{S} \mapsto \begin{cases} \frac{\hbar^2 \cdot A}{4} & \mathcal{S} = 1 \\ -\frac{3\hbar^2 \cdot A}{4} & \mathcal{S} = 0 \end{cases}.$$

Unter dem Vorfaktor A verstehen wir das sogenannte *Austauschintegral*.

VL 22
 13.07.2023,
 10:00

6.3 Das Heliumatom

Bei dem Heliumatom handelt es sich um ein *zwei Elektronen System*. Den Grundzustand beschreiben wir dabei durch 1^1S_0 , also $S = s_1 + s_2 = 0$, $n = 1$ und $L = J = 0$. Das beschreibende Quantenzahl-tupel ist also $(n, L, J, S) = (1, 0, 0, 0)$. Betrachte nun die folgende Abbildung. Es gibt zwei Zustände des Wasserstoffatoms, einmal den Singulettzustand 1^1S_0 und den Triplettzustand 1^3S_1 .

Für den Hamiltonoperator des Heliumatoms gilt der Zusammenhang

$$H_{He} = \underbrace{\left(\frac{P_1^2(x_1)}{2m_e} + \frac{P_2^2(x_2)}{2m_e} - \frac{2 \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot ||x_1||} - \frac{2 \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot ||x_2||} \right)}_{=: H_{He,0}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot ||x_1 - x_2||}}_{H_{e-e}} \Bigg|_{x \in (\mathbb{R}^3)^2}.$$

Die Wellenfunktion hat dann die Form

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_{1,0}(x_1, x_2) \cdot \chi_{1,0}(s_1, s_2) \cdot \chi_{0,0}(m_{s_1}, m_{s_2}),$$

wobei $\psi_{1,0}$ die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms ist. Die Spinwellenfunktion ist dabei gegeben durch

$$\chi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle).$$

Die Gesamtwellenfunktion ist dann antisymmetrisch, da die Spinwellenfunktion antisymmetrisch ist. Für das Eigenwertproblem ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung der Form $H_{He,0}\Psi = \lambda \cdot \Psi$ erhalten wir dann eine Eigenwertfolgensumme $E_{He,0} = E_{x_1} + E_{x_2}$. Dabei ist $E_{He,0}$ gegeben durch $E_{He,0} = (-R_y \cdot 2 \cdot Z^2/n^2)_{n \in \mathbb{N}}$, wobei $R_y = 13.6 \cdot \text{eV}$ die *Rydberg-Energie* ist. Dadurch ergibt sich für $E_{He,0}(1) = -8 \cdot R_y \approx -108.8 \cdot \text{eV}$. Diese Energie müssen wir jedoch noch durch die Elektron - Elektron Wechselwirkung korrigieren; diesen Korrekturterm erhalten wir durch

$$E_{He,1} = \langle \psi | H_{e-e}(x) | \psi \rangle = \frac{5}{4 \cdot a_0} \cdot \left(\frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \right) \approx 34 \cdot \text{eV}.$$

Damit erhalten wir die Summe $E_{He,0} + E_{He,1} \approx -108.8 \cdot \text{eV} + 34 \cdot \text{eV} \approx -74.8 \cdot \text{eV}$.

.....

(S55) □ Recherchiere zu dem versteckten Integral des Skalarproduktes und dessen Lösung.

(S56) □ Aus der Störtheorie wissen wir, daß nur kleine Störungen zu guten Ergebnissen führen. Warum ist dies hier nicht der Fall? Durch welche Methoden können die Ergebnisse verbessert werden?

.....

In einem angeregten Singulett bzw. Triplett Zustand ergeben die Energiet Terme der Elektron-Elektron Wechselwirkung in der Skalarproduktauswertung mit den Wellenfunktionen ψ^{sing} bzw. ψ^{trip} die Separierung

$$\begin{aligned} E_{e-e}^{sing} &= \psi^{sing} H_{e-e} \psi^{sing} = I + J, \\ E_{e-e}^{trip} &= \psi^{trip} H_{e-e} \psi^{trip} = I - J. \end{aligned}$$

Dabei sind I und J Abkürzungen für komplizierte mehrdimensionale Integralausdrücke. Dabei bedeutet I die *Coulomb-Wechselwirkung* und J die *Austausch-Wechselwirkung*.

.....

(S57) □ Recherchiere zu den Integralen I und J und notiere deren Ausdrücke, indem du die Namen beider anhand ihrer Integranden verifizierst. Ziehe dazu die Seite zum Austauschintegral herbei.

.....

Literatur

- [1] Degryer (2018). *Der differentielle Wirkungsquerschnitt – die Rutherfordsche Streuformel*. URL: <https://www.degruyter.com/database/PHYSIK0/entry/physiko.21.45/html>. Abgerufen am 19.04.2023.
- [2] Wikipedia (2023). *Kernpotential*. URL: <https://de.wikipedia.org/wiki/Kernpotential>. Abgerufen am 19.04.2023.
- [3] Wikipedia (2023). *Black body*. URL: https://commons.wikimedia.org/wiki/Category:Black_body?uselang=de, abgerufen am 20.04.2023.
- [4] Universität Ulm (?). *Ableitung der Planckschen Strahlungsformel nach Einstein*. URL: https://www.uni-ulm.de/fileadmin/website_uni_ulm/nawi.inst.251/Didactics/quantenchemie/html/AbleitF.html, abgerufen am 20.04.2023.
- [5] ETH Zürich (?). *Kapitel 2: Der Photoeffekt*. URL: <https://qudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch2.html>, abgerufen am 24.04.2023.
- [6] ETH Zürich (?). *Kapitel 4: Der Photonenimpuls*. URL: <https://qudev.phys.ethz.ch/static/content/science/BuchPhysikIV/PhysikIVch4.html>, abgerufen am 24.04.2023.
- [7] TU Braunschweig (?). *Experimente mit Wellen, Teilchen und Kugeln*. URL: http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC3/Kap_II/Experimente.htm, abgerufen am 17.05.2023.
- [8] Shutterstock (?). *Absorbtionsspektrum Neon*. URL: <https://www.shutterstock.com/image-vector/absorption-spectrum-neon-element-2025986030>, abgerufen am 17.05.2023.
- [9] Shutterstock (?). *Emissionsspektrum Neon*. URL: <https://www.shutterstock.com/image-vector/emission-spectrum-neon-element-2025986753>, abgerufen am 17.05.2023.
- [10] Wikipedia (2023). *Helium Atom*. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Helium_atom, abgerufen am 13.07.2023.