

Integrierter Kurs IV

Experimentalphysik II
Tom Folgmann

24. Juli 2023

Inhaltsverzeichnis

1	Atome und Atommodelle	4
1.1	Größe von Atomen	4
1.2	Typische Bestimmung der Größe eines Atoms	4
1.3	Definition des Atomradius	6
1.4	Der elektrische Aufbau der Atome, das Elektron	6
1.5	Bestimmung der Ladungsverteilung im Atom (Streuexperimente)	8
1.6	Entwicklung der Quantenmechanik	12
1.7	Schwarzkörperstrahlung	13
1.8	Der Photoeffekt	16
1.9	Überblick: Atomeigenschaften	21
2	Das Bohrsche Atommodell	25
2.1	Absorption und Emission	25
2.2	Modell	25
3	Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern	29
3.1	Vorbereitung	29
3.2	Schrödingergleichung im elektromagnetischen Feld	30
3.3	Semiklassische Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld	30
3.4	Auswahlregeln für Wasserstoff	32
3.5	Wasserstoffatom im Magnetfeld und normaler Zeeman Effekt	33
3.6	Der Zeemann-Effekt	34
3.7	Freies Elektron im Magnetfeld	35
3.8	Felder und Potentiale in der Quantenphysik	35
3.9	Lebensdauer angeregter Zustände und Linienbreiten	36
4	Der Spin	39
4.1	Stern-Gerlach-Experiment	39
4.2	Anomaler Zeemaneffekt	41
4.3	Der Paschen-Back-Effekt	43
5	Hyperfeinstruktur und weitere Effekte auf die Energieniveaus des Wasserstoffatoms	45
5.1	Hyperfeinstruktur	45
5.2	Das vollständige Kernschema	45
5.3	Überblick: Spektrale Eigenwertaufspaltung	45

6	Mehrelektronensysteme	47
6.1	Pauli Prinzip	47
6.2	Zwei Teilchen mit halbem Spin	47
6.3	Das Heliumatom	48
6.4	Periodensystem	50
6.5	Aufhebung der l Entartung bei Alkali Atomen	51
7	Moleküle	51
7.1	Das ein Elektron zwei Proton System	51

VL 1 1 Atome und Atommodelle

12.04.2023,

11:45

13.04.2023,

08:15



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 das *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.

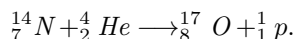
„Man braucht die mindestens die erste Ordnung, sonst haben wir keine Auflösung mehr.“

.....
☐ 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 raster 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 .

- (§4) ☐ 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.

- (§5) ☐ 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*:

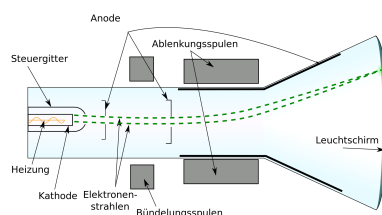


Abbildung 1: Schematischer Aufbau der Kathodenstrahlröhre.

[→ 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]. Ziel des Experimentes ist mithilfe der Annahme eines Kugelvolumens die Masse des Tröpfchens, welche durch Kraftberücksichtigung von Schwerkraft $F_g = m \cdot g$, der Reibung $F_R = 6\pi \cdot \eta \cdot r \cdot v$ und der Auftriebskraft $F_A = V \cdot \rho \cdot g$ indirekt durch den Teilchenradius



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


bestimmbar wird. 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

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

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

.....
 (§7) ☐ Führe die angedeutete Rechnung konkret durch.

Weitere Eigenschaften des Elektrons

\rightarrow  **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 halbzahlgiger Spinzahl, und in der Untergruppe der Leptonen. Teilchen mit ganzzahlgiger 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


$$\mu_{\text{S}} = -g_{\text{S}} \cdot \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \mathbf{s}.$$

.....
 (§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

\rightarrow  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.

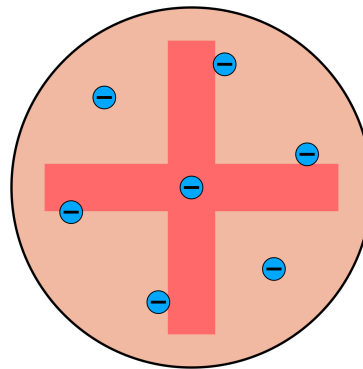


Abbildung 2: Das Thomson'sche Atommodell.

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 →

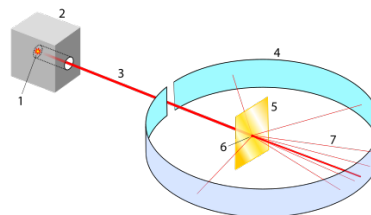


Abbildung 3: Das Rutherford-Experiment.

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.

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 aufgefechert. 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 (\propto -stärke).
- Die Winkelverteilung der Zählraten weist die Proportionalität

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

auf.

Rutherfordsches Atommodell

→  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:

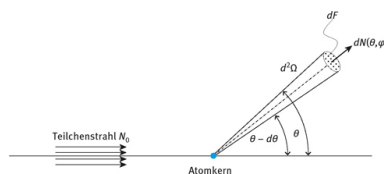


Abbildung 4: Darstellung des schematischen Streuprozesses aus [1].

Für die Coulombkraft an einem Ort $r \in \mathbb{R}^3$ erhalten wir zunächst

→ 

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2 \cdot Z \cdot e^2}{||r||_2^3} \cdot r, \quad (\star)$$

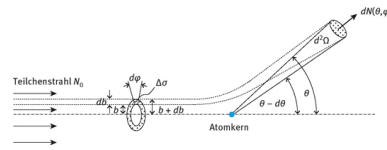


Abbildung 5: Erweiterung der Abbildung 4 um das Ursprungsraumelement [1].

wobei $Z \cdot e$ die Ladung des Kerns angibt. Die Kraft wirkt auf das α Teilchen, welches sich mit der Geschwindigkeit v_0 auf den Kern zubewegt. Die Kraftaufspaltung in orthogonale und parallele Flugrichtung ergibt

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

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 [\rightarrow Abb. 4]. Wir erhalten für das Coulombgesetz

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

und durch Integration

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

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

Bei unserem Experiment [\rightarrow Exp. 3] haben wir die *Anzahl der Ereignisse* auf dem Leuchtschirm gemessen. Diese geschahen alle in einem gewissen Raumwinkelbereich $d\Omega$ [\rightarrow 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

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

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.

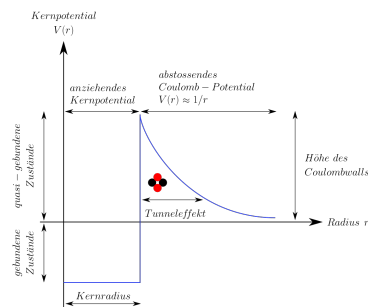
-
- (S11) □ Kläre die Bedeutung des angedeuteten Differenzierens. Wie ist der Prozess sauber definierbar?
- (S12) □ Verifiziere die alternative Definition $dB := b \cdot db \cdot d\varphi$. Verifiziere auch $d\Omega = \sin(\theta) \cdot d\theta \cdot d\varphi$.
-

Die Streuformel für die Rutherford-Experimente lautet nun

→ 
$$\frac{dB}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{4 \cdot m \cdot v_0^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin(\theta/2)^4}. \quad (\star)$$

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.
- 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 und 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:

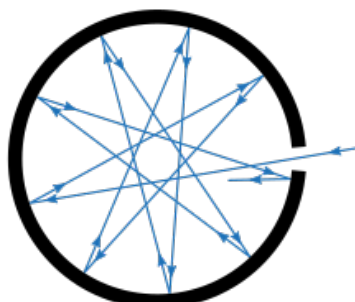


Abbildung 7: Analogon eines Schwarzkörpers [3].

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*. Steht sie im Zusammenhang zu dem Konzept der Hohlkugel? (S.13)

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.

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

Wir sehen einen Peak und Maximum im Infraroten Bereich. Dies ist die Infrarotstrahlung der Glühlampe.

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.

Aus klassischer Sicht ergibt sich für die spektrale Energiedichte

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

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.

.....
 (☞14) ☐ Recherchiere den *Gleichverteilungssatz*. Wie fließt er in das Rayleigh-Jeans-Gesetz ein?

Plancksches Strahlungsgesetz

$\rightarrow \text{☞}$ 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) Absorption und (ii) Emission.

- (i) Bei der Absorption eines Photons mit Energie $E = E_2 - E_1 = h \cdot \nu$ wird das Atom von E_1 auf E_2 angeregt¹.
- (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 wie folgt, 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:

¹Es ist $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{Js}$ die *Planck-Konstante* und $\hbar := h/(2 \cdot \pi)$ die reduzierte Variante.

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

$$dN_{1 \rightarrow 2} = \int B_{1 \rightarrow 2} \cdot u(\nu, T) \cdot N_1 dt, \quad (\star)$$

wobei $B_{1 \rightarrow 2}$ 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

$$dN_{2 \rightarrow 1}^{spont} = \int A_{2 \rightarrow 1} \cdot N_2 dt, \quad (\star)$$

mit $A_{2 \rightarrow 1}$ als *Einstein Koeffizient*.

- (iii) Für die *induzierte Emission* können wir mit weiterem Einsteinkoeffizienten $B_{2 \rightarrow 1}$ notieren

$$dN_{I,21}^{ind} = \int B_{2 \rightarrow 1} \cdot u(\nu, t) \cdot N_2 dt. \quad (\star)$$

VL 7
 21.04.2023,
 11:45

Im thermischen Gleichgewicht gilt dann für die Atomanzahländerung

$$dN_{1 \rightarrow 2} = dN_{2 \rightarrow 1}^{spont} + dN_{2 \rightarrow 1}^{ind}, \quad (\star)$$

also nach Definitionen durch den Quotienten $1 = dN_{1 \rightarrow 2} / (dN_{2 \rightarrow 1}^{spont} + dN_{2 \rightarrow 1}^{ind})$ unter Vergleich der Integranden

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{1 \rightarrow 2} \cdot u(\nu, t)}{A_{2 \rightarrow 1} + B_{2 \rightarrow 1} \cdot u(\nu, t)} : \Longleftrightarrow \frac{N_2}{N_1} = \frac{(E_2 / (k_B \cdot T))}{\exp(E_1 / (k_B \cdot T))},$$

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

$$u(\nu, T) = \frac{A_{2 \rightarrow 1}}{B_{1 \rightarrow 2} \cdot \exp(h \cdot \nu / (k_B \cdot T)) - B_{2 \rightarrow 1}}.$$

Beachtet man nun das Verhalten des funktionellen Zusammenhangs in Änderung seiner Variablen, so erkennt man folgendes.

- 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“ $B_{1 \rightarrow 2} = B_{2 \rightarrow 1}$.
- 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

$$u(\nu, T) = \frac{A_{2 \rightarrow 1}}{B_{1 \rightarrow 2}} \cdot \frac{k_B \cdot T}{h \cdot \nu} \implies \frac{A_{2 \rightarrow 1}}{B_{1 \rightarrow 2}} = \frac{8\pi h \cdot \nu^3}{c_0^3}.$$


Aus diesen beiden Bedingungen können wir nun die Einsteinkoeffizienten ersetzen und erhalten den funktionellen Energiedichtezusammenhang

$$u = \left(\frac{8\pi h \cdot \nu^3}{c_0^3} \cdot \frac{1}{\exp(h \cdot \nu / (k_B \cdot t)) - 1} \right)_{(\nu, T) \in \mathbb{R}^2}. \quad (\star) \rightarrow \text{☞}$$

Es ist dann $\int_V u(\nu, T) d\nu$ die spektrale Energiedichte im Frequenzbereich $V \subseteq \mathbb{R}_{>0}$. Für den Fall $V = \mathbb{R}_{>0}$ können wir zunächst schreiben

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

und mit Substitution $\Phi^{-1}(\nu) = h\nu / (k_B \cdot T)$ auf die exp Funktion getrimmt schließlich

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


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

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

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

.....

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

→ 
$$T \cdot \lambda_{\max} = \frac{h \cdot c_0}{4.965114 \cdot k_B} \approx 2.998 \cdot 10^{-3} \text{m K}. \quad (\star)$$

-
- (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.

1.8 Der Photoeffekt

VL 8
 24.04.2023,
 11:45

Experiment 5. *Ladungsnachweis Wimshurstmaschine und Photoplatte.*

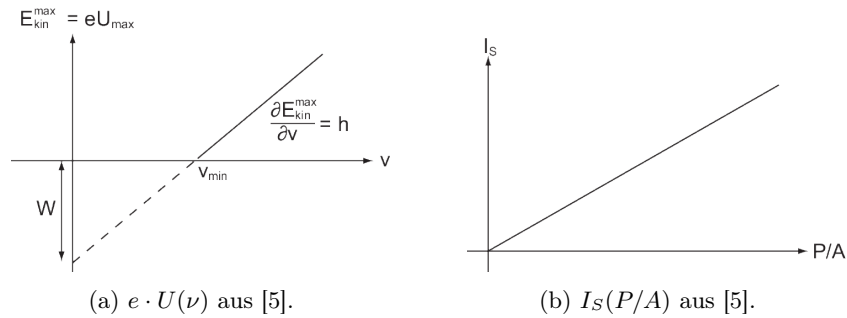
Bestrahlen der Photoplatte mit und ohne Glasscheibe. Ohne Scheibe ist Ladungsabfall erkennbar, mit Scheibe nicht. Wir beobachten:

- *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 hinauslösen 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

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

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.

- (20) ☐ Rechne noch einmal die Dispersionsrelation nach. Wie lautet das Argumentationsergebnis 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:

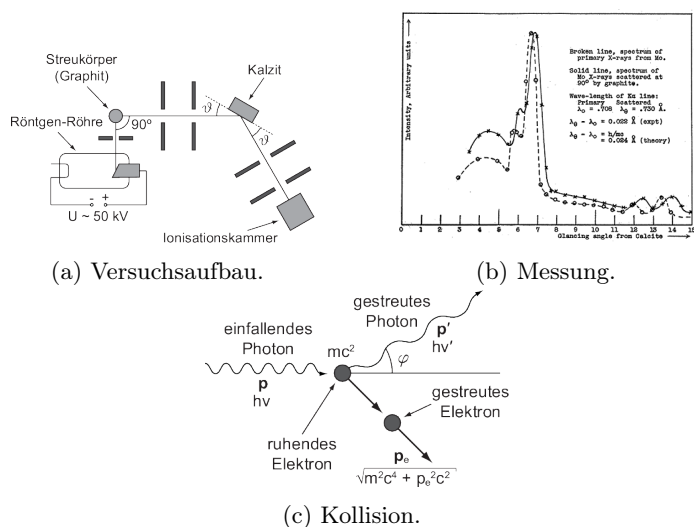


Abbildung 10: Compton Effekt aus [6].

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

.....

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

.....

Eigenschaften des Photons

Wir listen wieder einige Eigenschaften des Photons auf:

- Die Photonendichte wird beschrieben als $n = N/V = U_{em}/(h \cdot \nu) = \varepsilon_0 \cdot E^2/(h \cdot \nu)$.
- 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

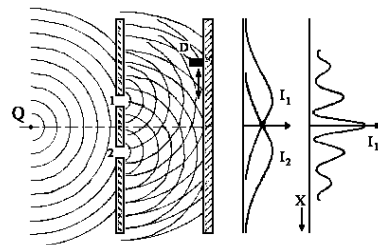


Abbildung 11: Der Aufbau und Ablauf des Doppelspaltexperimentes im Wellenbild aus [7].

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

-
- (S22) ☐ Berechne die Wellenintensität für zwei komplexe Amplituden $\psi_1, \psi_2 \in \mathbb{C}$.
-

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.

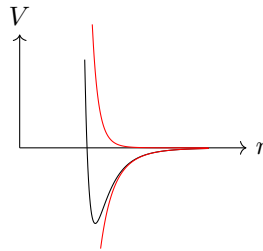
1.9 Überblick: Atomeigenschaften

In diesem Kapitel haben wir uns mit den grundlegenden Entdeckungen und Eigenschaften von Atomen beschäftigt. Wir haben zuerst Abschätzungen zum *Atomvolumen* über die *Gitterkonstante* d durch

$$N \cdot V_{\text{Atom}} = \frac{M}{\rho(M)}, \quad V_{\text{Atom}} = d^3$$

mithilfe zunächst weniger klaren Begriffen M Molekülmasse und ρ Dichtefunktion getroffen.

Im Zusammenhang dazu haben wir die Einheit *Angstrom* auf den approximierten Atomradius von 10^{-10}m eingeführt welche durch verschiedene Techniken bestimmt werden kann. Kennengelernt haben wir dabei die Methode nach *Van der Waals*, bei welcher eine Modellberechnung mit *Binnendruck* und *Kovolumen* das Ergebnis bestimmen, oder die eher experimentelle Methode der Beugung am Gitter, bei welcher der *Bragg Zusammenhang* mithilfe eines gemessenen Kontaktwinkels $\alpha \in \mathbb{R}_{>0}$ die benötigte Gitterkonstante d lieferte. Die nicht Eindeutigkeit desselben Radius mussten wir bei unseren Bemühungen jedoch ebenfalls schnell einsehen. In radialer Richtung konnten wir das *Lennard-Jones-Potential* als Modellpotential etablieren und uns so einen kleinen ersten Blick in die Atomstruktur gewähren:



Daß ein Atom nicht abbildbar ist, haben wir mithilfe der *Abbeschen Theorie* berechnen und eine Abschätzung zur maximalen Auflösung eines Lichtmikroskopes abgeben können.

Die Atominteraktion konnten wir experimentell durch die *Nebelkammer* beobachten, welche durch Ablauf der Reaktion ${}^{14}_7\text{N} + {}^4_2\text{He} \rightarrow {}^{17}_8\text{O} + {}^1_1\text{p}$ die Spuren der Teilchen sichtbar machte. Atome selbst konnten wir durch einen Trick selbst erahnbar machen: das *Feldemissionsmikroskop*. Als weitere Beispiele haben wir auch das *Transmissionselektronenmikroskop* und das *Rasterelektronenmikroskop* kennengelernt.

Elektrische Einblicke und Elektron

Mittels Kathodenstrahlröhre oder auch Thomson Spektograph haben wir eine Möglichkeit zur Bestimmung des Quotienten aus Elektronenladung und Masse kennengelernt. Elektrisch- mechanische Betrachtungsansätze lieferten uns schließlich den Zusammenhang

$$\frac{e}{m} = \frac{E}{B^2 \cdot l \cdot (l/2 + s)} \cdot \frac{x_0^2}{y_0},$$

wobei l die Kondensatorlänge und s die nachfolgend feldfreie Strecke zum Schirm darstellt. Da in diesem Modell die Elektronenladung als bekannt vorausgesetzt wird, bestimmten wir experimentell ihren Wert mithilfe des Millikan-Versuchs. Beachtung der Schwer-, Reibungs- und Auftriebskraft durch $F_R = F_G - F_A$ lieferte uns unter Annahme der Kugelform die Radius- und Massenbeziehung

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

Durch Schweben des Teilchens in einem Magnetfeld ändert sich die Kraftbeziehung zu $F_E = F_G - F_A$ und durch Justage des elektrischen Feldes $E = U/d$ folgt die Elektronenladung

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

Weitere Eigenschaften des Elektrons wie der Spin, Pauli-Prinzip und magnetisches Moment deuteten sich durch einen Vorgriff an.

Atomladungsverteilungen

Fragten wir uns nach der Verteilung der Ladungen im Atom, so konnten wir durch das Thomson'sche Atommodell eine erste Abschätzung treffen. Dabei starteten wir mit der Grundidee des *elektrisch neutralen Atoms*, dessen $z \cdot (-e)$ negative Elektronenladungen durch $z \cdot |e|$ positive Ladungen kompensiert werden. Dabei nahmen wir die Ladungsdichte ρ als konstant über das gesamte Atomvolumen an. Das Rutherford-Experiment widersprach der letzten Annahme jedoch direkt durch seine Streuphänomene, sodaß wir die Evolution zum Rutherford'schen Atommodell beschreiten mussten. Mathematisch ließen sich die Streuzusammenhänge an der Goldfolie durch die *Rutherford-Streuformel* beschreiben: Wir begannen bei der Betrachtung der Coulombkraft auf ein anfliegendes α Teilchen Richtung des Kerns $Z \cdot |e|$. Mithilfe einer Kraftaufspaltung und der Drehimpulsbetrachtung in Zylinderkoordinaten fanden wir einen orthogonalen Kraftausdruck $F_{\perp}(t)$, welchen wir über den Zeitparameter t durch $\int F_{\perp}(t) dt$ integrierten. Wir erhielten somit einen ersten Zusammenhang für $b(\Theta)$ als Abstand des Teilchens zur Kernachse:

$$b(\Theta) = \frac{2 \cdot Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot m \cdot v_0^2} \cdot \cot\left(\frac{\Theta}{2}\right).$$

Da wir diesen Parameter experimentell jedoch nicht messen konnten, mussten wir eine Beschreibung über die Anzahl gemessener Teilchen dN pro Raumwinkel $d\Omega$ bestimmen; Über eine Plausibilitätsüberlegung und die Infinitesimalflächenbeschreibung $dB = b \cdot (db) \cdot d\varphi$ bzw. $d\Omega = \sin(\Theta) \cdot d\Theta \cdot d\varphi$ erhielten wir den finalen differentiellen Streuungsquerschnitt

$$\frac{db}{d\Omega} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{Z^2 \cdot e^4}{m^2 \cdot v_0^4} \cdot \frac{1}{\sin(\Theta/2)^4}.$$

Diese Formel lieferte uns für *langsame* α Teilchen eine Approximation, welche jedoch durch den Geltungsbereich der Coulombkraft und dessen Übergang in die starke Kernkraft entscheidend beschränkt ist.

Entwicklung und Notwendigkeit der Quantenmechanik

Im selben Zeitraum der Entdeckung erhielten viele weitere experimentelle Widersprüche zur klassischen Anschauung Aufmerksamkeit, sodaß eine Modellerweiterung und Neukonstruktion notwendig wurde. Wichtige Namen waren hier das Doppelspaltexperiment, die Schwarzkörperstrahlung, die Spektrallinien, der Photoeffekt und die Compton-Streuung. Dabei charakterisierten wir den Schwarzen Körper als idealisierte Materie mit der totalen Absorptionseigenschaft $A = 1$ und $R = 0$, also *maximalem Emissionsvermögen*. Die Energieabgabe erfolgt hier dann in Abhängigkeit der Materientemperatur T , was uns auf die Plancksche Strahlungsformel führte. Hierzu stellten wir uns als Analogon des Schwarzkörpers eine *Hohlkugel* vor: Das Rayleigh-Jeans Gesetz brachte uns für kleine Wellenlängen eine gute klassische Approximation der Spektralbeobachtung einer solchen Hohlkugel. Mithilfe der *Emissions-* und *Absorptionsbetrachtung* eines Atoms mit zwei möglichen Energiezuständen erhielten wir durch die Kombination von *spontan*, *induziert* und *absorbiert* die Atomzahländerung

$$dN_{1 \rightarrow 2} = dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{spont}} + dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{ind}}.$$

Der Quotientenvergleich $1 = dN_{1 \rightarrow 2} / (dN_{2 \rightarrow 1}^{spon} + dN_{2 \rightarrow 1}^{ind})$ unter Verwendung der Boltzmannfaktoren $\exp(-E/(k_B \cdot T))$ brachte uns dann auf die Energiedichte

$$u(\nu, T) = \frac{A_{2 \rightarrow 1}}{B_{1 \rightarrow 2} \cdot \exp(h \cdot \nu / (k_B \cdot T)) - B_{2 \rightarrow 1}}.$$

Funktionelle Betrachtungen unter physikalischer Plausibilitätsüberlegung lieferte uns schließlich für die noch ausstehenden Unbekannten die Bedingungen $B_{1 \rightarrow 2} = B_{2 \rightarrow 1}$ und $A_{2 \rightarrow 1} / B_{1 \rightarrow 2} = 8\pi h \nu^3 / c_0^3$ unter Taylorapproximation, sodaß wir das Plancksche Strahlungsgesetz ernteten:

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

Unter Integration $\int_{\mathbb{R}_{>0}} u(\nu, T) d\nu$ und Substitution $\Phi^{-1}(\nu) = h\nu / (k_B \cdot T)$ erhielten wir schließlich das Stephan-Boltzmann Gesetz:

$$U(T) = \frac{8\pi^5 k_B^3}{15 \cdot c_0^3 \cdot h^3} \cdot T^4.$$

Anschaulich erhielten wir hierdurch eine temperaturabhängige Energiedichte $U(T)$, welche insbesondere die Proportionalität zu T^4 aufwies. Fragten wir nach dem Maximum dieser Funktion U , so erhielten wir mithilfe numerischer Approximation das Wiensche Verschiebungsgesetz $T \cdot \lambda_{max} = const.$

Das Photon

Ein weiterer Baustein der Quantenmechanik war die Entdeckung der Quantisierung von Licht durch Photonen und den photoelektrischen Effekt. Er diente uns im Rahmen der Wimshurstmaschine als direkter Nachweis von quantisiertem Licht durch den Proportionalitätsgraphen $U \cdot e \propto h$. Es führte zu der Einsteinschen Lichtquantenhypothese.

Die fortführende Untersuchung der postulierten Lichtteilchen erfolgte mittels Compton Effekt. Durch Energie- und Impulserhaltung kommt ein Zusammenhang zwischen klassischer Mechanik und neuer Quantenmechanik zustande:

$$\begin{aligned} \hbar \cdot \omega(\nu) + m_0 \cdot c_0^2 &= \hbar \cdot \omega(\tilde{\nu}) + E_e \\ p + 0 &= \tilde{p} + p_e \end{aligned}$$

Der Ausdruck $\omega(\tilde{\nu})$ entsteht nun durch Termumformung der beiden Gleichungen, wobei relativistische Energieaufteilung zur Verwendung kommt. Die resultierende Compton Streuung erhält daher den Zusammenhang

$$\Delta\lambda_e = \frac{2\pi \cdot e}{\omega(\nu) \cdot \omega(\tilde{\nu})} \cdot (\omega(\nu) - \omega(\tilde{\nu})),$$

wobei wir den Vorfaktor als *Compton Wellenlänge* betitelten.

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.

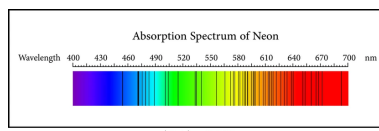


Abbildung 12: Emissionsspektrum am Beispiel von Neon aus [8].

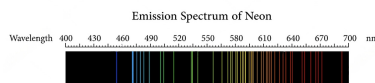


Abbildung 13: Absorptionsspektrum am Beispiel von Neon aus [?].

Diese Spektren stellen sich als *charakteristisch* für Atome heraus. Als Beispiel gilt hier die *Balmer-Serie* [\rightarrow 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

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

.....
☐ Erkläre, warum die Spektren zueinander komplementär erscheinen. Handelt es sich dabei (S23)
um eine Phänomenologie, oder lässt sich dies auch theoretisch begründen?
.....

2.2 Modell

Um die Spektren zu erklären, entwickelte Niels Bohr 1913 ein Modell, welches die Elektronenhülle als diskretes System beschreibt. Es handelt sich dabei im Wesentlichen 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:

VL 10
19.05.2023,
11:45

- (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.

-
- (§24) □ Berechne die Radiusgleichung und folgere daraus die Energiegleichung.
-

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.

.....

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

Für den Bahnradius im Bohr Modell ergibt sich also

$$r = \left(\frac{\epsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m_e \cdot e^2} \cdot n^2 \right)_{n \in \mathbb{N}},$$

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.

VL 11

25.05.2023,
10:00

Beispiele

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

.....

☐ Recherchiere zum Versuch und finde weitere Beispiele. Warum zeigt der Franck Hertz (S.26)

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 $\psi_n \in \mathcal{H}$ mit $H\psi = E_n \cdot \psi_n$ zum Eigenwert E_n und können eine orthonormale Eigenbasis $(\psi_i)_{i \in I}$ des Hilbertraums \mathcal{H} daraus konstruieren. Es erfolgt nun ein *Vorgriff* in Richtung der Störungstheorie, in welchem wir eine *kleine* Störung H_1 des idealen Hamiltonoperators H in einer Skalierung $\lambda \in \mathbb{R}$ betrachten. Wir nehmen unsren systembeschreibenden Hamiltonoperator also an in der Form

$$H = H_0 + \lambda \cdot H_1.$$

Dabei nehmen wir die Eigenvektoren ψ_n und Eigenwerte E_n als Potenzreihengrenzwerte der Form

$$\psi_n = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \cdot \psi_{n,k}, \quad E_n = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \cdot E_{n,k}$$

an. Wir erhalten damit eine angepasste Schrödingergleichung der Form

$$H \left(\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \cdot \psi_n^k \right) = E_n \cdot \left(\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \cdot \psi_n^k \right).$$

Betrachten wir die Summenauswertungen, so erhalten wir nun Koeffizienten $\lambda^0 = 1$ die originale ideale Eigenwertgleichung zu H_0 . Für λ^1 erhalten wir die sogenannte *Korrektur erster Ordnung* der Form

$$H_0 \psi_{n,1} + H_1 \psi_{n,0} = E_{n,0} \cdot \psi_{n,1} + E_{n,1} \cdot \psi_{n,0}.$$

Betrachten wir nun das Skalarprodukt auf \mathcal{H} desselben Ausdruckes mit dem unkorrigierten Eigenvektor $\psi_{n,0}$, so erhalten wir

$$\langle \psi_{n,0} | H_0 | \psi_{n,1} \rangle + \langle \psi_{n,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle = E_{n,0} \cdot \langle \psi_{n,0} | \psi_{n,1} \rangle + E_{n,1} \cdot \langle \psi_{n,0} | \psi_{n,0} \rangle.$$

Nutzen wir nun die Zusammenhänge $\langle \psi_{n,0} | H_0 | \psi_{n,1} \rangle = E_{n,0} \cdot \langle \psi_{n,0} | \psi_{n,1} \rangle$ und $\langle \psi_{n,1} | \psi_{n,0} \rangle = 0$ bzw. $\langle \psi_{n,0} | \psi_{n,0} \rangle = 1$, so erhalten wir die Korrektur erster Ordnung als

$$E_{n,1} = \langle \psi_{n,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle,$$

was wir speziell als *Diagonaleinträge* einer Matrix in $\mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ auffassen können.

Wir stellen also fest, daß die Korrektur der ersten Ordnung der Erwartungswert der Störung in ungestörten Zuständen ist. Der Eigenwert von H entpuppt sich also als Summe des ungestörten Eigenwertes und der Korrektur erster Ordnung mit $E_n = E_{n,0} + E_{n,1}$.

.....
 □ Schlage im Theoriekapitel zur nicht entarteten Störungstheorie alle zur Umformung nötigen Voraussetzungen nach, die wir hier implizit verwendet haben. (S.27)

.....
 Möchte man eine Aussage über die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen einem durch $n \in \mathbb{N}$ charakterisierten Zustand zu einem durch $m \in \mathbb{N}$ charakterisierten, so wird die *Übergangsrate* von n nach m durch

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \gamma(E_m - E_n) \cdot |\langle \psi_m | H_1 | \psi_n \rangle|^2$$

beschrieben, wobei γ die *Dichte der Endzustände* bezeichnet.

3.2 Schrödingergleichung im elektromagnetischen Feld

VL 12

@home

31.05.2023,

08:15

Im elektromagnetischen Feld nehmen wir den Hamiltonoperator in der Form

$$H = \left(\frac{1}{2 \cdot m_e} \cdot \left(P(x) + e \cdot A_t(Q)(x) \right)^2 - e \cdot \varphi_t(Q)(x) + V(Q)(x) \right)_{x \in \mathcal{H}}$$

für ein Vektorpotential $A : \mathbb{R} \rightarrow (\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3)$ und ein Skalarpotential $\varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, sowie ein Potential $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ an.

Der Zusammenhang zu den elektrischen und magnetischen Feldern ist dabei gegeben durch

$$B_t(r) = \text{rot } A_t(r) \quad E_t(r) = -\frac{d}{dt} A_t(r) - d\varphi_t(r)(1).$$

- (28) □ Zeige, daß die felddefinierenden Potentiale A und φ eindeutig oder nicht eindeutig definiert sind.

Für unser Potential A fordern wir die *Coulomb Eichung* $dA_t(r)(h) = 0$ für beliebige $h \in \mathbb{R}^3$. Für die zeitabhängige Schrödingergleichung $i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = H(\psi(t))$ finden wir nun für ein $\psi : \mathbb{R} \rightarrow H^2(\mathbb{R})$ die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \cdot d\psi(t) = & -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_e} \cdot d^2(\psi(t)) - \frac{i \cdot e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e} \cdot A_t \cdot d\psi(t) - \frac{i \cdot e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e} \cdot d(A_t) \cdot \psi(t) \\ & + \frac{e^2}{2 \cdot m_e} \cdot \langle A_t, A_t \rangle \cdot \psi(t) - e \cdot \psi(t) \cdot \varphi_t + V \cdot \psi(t) \end{aligned}$$

für ein beliebiges $x \in \mathbb{R}$ in eine Richtung $h \in \mathbb{R}$. Wir wählen hier bei meistens wie in der Physik üblich $h = 1$.

- (29) □ Betrachte einmal genau die Dimensionen der einzelnen Summanden und bewerte, inwiefern der Ausdruck sinnvoll bzw. missverständlich ist und ob er sogar korrigiert werden muss.

Die Coulomb Eichung liefert uns dann die verkürzte Form

$$\begin{aligned} i\hbar \cdot d\psi(t) = & -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_e} \cdot d^2(\psi(t)) - \frac{i \cdot e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e} \cdot A_t \cdot d\psi(t) \\ & + \frac{e^2}{2 \cdot m_e} \cdot \langle A_t, A_t \rangle \cdot \psi(t) - e \cdot \varphi_t \cdot \psi(t) + V \cdot \psi(t). \end{aligned}$$

3.3 Semiklassische Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld

In der semiklassischen Betrachtung nehmen wir das elektromagnetische Feld als *nicht quantisiert* an, sodaß wir einen Rotator A wählen können. Weiter nehmen wir an, daß A^2 vernachlässigbar klein ist und das Feld *quellenfrei* ist, also $\varphi_t(x) = 0$ für alle $t, x \in \mathbb{R}$. Die elektromagnetische Welle ist im physikalischen Anschauungssinne also weit von ihrer Quelle entfernt. Der Störoperator H_1 hat demnach dann die Form

$$H_1 = \left(-\frac{i \cdot e \cdot \hbar}{m_e} \cdot A_t(Q)(x) \cdot P(x) \right)_{x \in \mathcal{H}}.$$

Stellen wir A_t in Form komplex rotierender Summanden dar, so finden wir

$$A_t(x) = A_0 \cdot \exp(i \cdot (\langle k, x \rangle - \omega \cdot t)) + \text{conj}((A_0) \cdot \exp(-i \cdot (\langle k, x \rangle - \omega \cdot t))),$$

wobei wir $A_0 \in \mathbb{C}^3$ als *Amplitude* und $k \in \mathbb{R}^3$ als *Wellenvektor* bezeichnen. Wir nehmen ferner an $\omega = c_0 \cdot \|k\|_2$, die Orthogonalität von k und A_0 und die Zerlegung von A_0 in $a_0 \cdot e_r$ mit $e_r \in \mathbb{R}^3$ als Richtungsvektor der Amplitude, also Polarisationsvektor der Welle. Damit ist der Hamiltonoperator oben gegeben als

$$H(\psi) = -\frac{i \cdot \hbar \cdot e}{m_e} \cdot a_0 \cdot \exp(i \cdot k r) \cdot e_r \cdot d \exp(-i \cdot \omega \cdot t) + \dots,$$

sodaß der Term $\exp(-i \cdot \omega \cdot t)$ eine *zeitliche Störung* darstellt.

.....
☐ Rechne die Punkte ... in der Gleichung aus.

(§30)

☐ Ist die periodische Störung schon in $\Gamma_{a \rightarrow b}$ enthalten?

(§31)

.....
 Wir stellen eine Proportionalität zwischen $\Gamma_{n \rightarrow m}$ und dem Skalarprodukt $|\langle \psi_{m,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle|$ fest. Es lässt sich zunächst ausformulieren

$$-\langle \psi_{n,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle = -\frac{i \cdot \hbar \cdot e}{m_e} \cdot a_0 \cdot \langle \psi_{n,0}, \exp(i \cdot \langle k, r \rangle) \cdot e_r \cdot d\psi_{n,0} \rangle,$$

wobei wir nun den exponentiellen Ausdruck mittels C^∞ Analytizität in einer Potenzreihe zu

$$\exp(i \cdot \langle k, r \rangle) = 1 + i \cdot \langle k, r \rangle + \frac{(i \cdot \langle k, r \rangle)^2}{2} + \dots$$

ausschreiben können. In der sogenannten *Dipolnäherung* vernachlässigen wir alle Terme höherer Ordnung und erhalten die Abschätzung $\exp(i \cdot \langle k, r \rangle) \approx 1$. Wenn jedoch die Übergangsrate $\Gamma_{n \rightarrow m}$ gegen Null verschwindet, so müssen höhere Terme der Reihe berücksichtigt werden. Hier klassifizieren wir drei Übergangstypen.

→ *Erlaubte Übergänge (Dipolnäherung)*: Für nicht verschwindendes $\Gamma_{n \rightarrow m}$ gilt die Näherung über den ersten Summanden der Potenzreihe.

→ *Verbotene Übergänge*: Für kleine $\Gamma_{n \rightarrow m}$ müssen höhere Summanden der Potenzreihe berücksichtigt werden.

→ *Streng verbotene Übergänge*: Für $\Gamma_{n \rightarrow m} \rightarrow 0$ kann keine Näherung mehr vorgenommen werden.

Für den ersten Fall der Dipolnäherung können wir weiter schreiben

$$-\langle \psi_{n,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle \approx -\frac{i \cdot \hbar \cdot e}{m_e} \cdot a_0 \cdot \langle \psi_{n,0}, e_r \cdot d\psi_{n,0} \rangle = \frac{e}{m_e} \cdot \langle \psi_{n,0}, e_r \cdot P(\psi_{n,0}) \rangle.$$

Mit einem Kommutatortrick können wir den Ausdruck weiter umschreiben und den idealen Hamiltonoperator H_0 ins Spiel bringen:

$$\begin{aligned} [Q, P^2] &= P \circ [Q, P] + [Q, P] \circ P = 2 \cdot i \cdot \hbar \cdot P, \\ [Q, H_0] &= \frac{1}{2 \cdot m_e} \cdot [Q, P^2] + [Q, V(Q)] = \frac{i \cdot \hbar}{m_e} \cdot P. \end{aligned}$$

Damit können wir den Impulsoperator P in der Form $P = m_e \cdot [Q, H_0] / (i \cdot \hbar)$ ausdrücken. Bringen wir dies ein in die Dipolnäherung, so ergibt sich

$$\begin{aligned} -\langle \psi_{n,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle &\approx \frac{e}{\hbar} \cdot a_0 \cdot \langle \psi_{n,0} | e_r \cdot (Q \circ H_0 - H_0 \circ Q) | \psi_{m,0} \rangle \\ &= \frac{e}{\hbar} \cdot a_0 \cdot \langle \psi_{n,0} | e_r \cdot Q \circ H_0 | \psi_{m,0} \rangle - \frac{e}{\hbar} \cdot a_0 \cdot \langle \psi_{n,0} | H_0 \circ e_r \cdot Q | \psi_{m,0} \rangle. \end{aligned}$$

Verwenden wir nun die Eigenwerte $E_{n,0}$ zu $\psi_{n,0}$ bzw. $E_{m,0}$ zu $\psi_{m,0}$, so erhalten wir mit $\omega_{n,m} := E_{n,0} - E_{m,0}$ den Zusammenhang

$$-\langle \psi_{n,0} | H_1 | \psi_{n,0} \rangle \approx -e \cdot a_0 \cdot \omega_{n,m} \cdot \langle \psi_{n,0} | e_r \cdot Q | \psi_{m,0} \rangle.$$

Damit können wir dann schließlich die Proportionalität der Übergangsrate $\Gamma_{n \rightarrow m}$ für die Dipolnäherung beschreiben durch

$$\Gamma_{n \rightarrow m}^{dipol} \propto e^2 \cdot a_0^2 \cdot \omega_{n,m}^2 \cdot |\langle \psi_{n,0} | e_r \cdot Q | \psi_{m,0} \rangle|^2.$$

(S32) □ Zeige die Konvergenz der behaupteten Reihenentwicklung.

(S33) □ Überlege dir, wo hier Indizes vertauscht sein könnten.

3.4 Auswahlregeln für Wasserstoff

Die Lösungen des Wasserstoffatoms lassen sich geschickterweise durch die Kugelflächenfunktionen $(l, m) \mapsto Y_{l,m} : (\Theta, \varphi) \mapsto \mathbb{R}$ für Winkel $(\Theta, \varphi) \in [0, \pi] \times [0, 2\pi]$ und zugehörige Radiusfunktionen $(n, l) \mapsto R_{n,l} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ darstellen. Für eine Eigenfunktion $\psi_{n,l,m}$ des Wasserstoffatoms $H(\psi) = E \cdot \psi$ findet sich dann der Ausdruck

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l} \cdot Y_{l,m}.$$

Ihre eindeutige Charakterisierung findet über die drei Quantenzahlen $(n, l, m) \in \mathbb{N} \times [n-1] \times D_{m,l}$ mit $D_{m,l} := \{-l+n : n \in \mathbb{N}_0\} \cap [-l, l]$ statt. Nun wollen wir die Übergänge durch Auswahlregeln klassifizieren.

Durch Integration über das Argument $(r, \Theta, \varphi) \in \mathbb{R}_{>0} \times (0, \pi), (-\pi, \pi)$ können wir für einen Übergang $a := (n_a, l_a, m_{l,a}) \rightarrow (n_b, l_b, m_{l,b}) =: b$ als Skalarprodukt unter Verwendung der Separationsmöglichkeit für entsprechende Zustände ψ_a, ψ_b schreiben

$$\begin{aligned} M_{n \rightarrow m} := \langle \psi_a | H | \psi_b \rangle &= \int_{\mathbb{R}_{>0}} R_a \cdot R_b |\det(Jf)| \cdot \int_{(0,\pi)} \tilde{P}_a \cdot \tilde{P}_b \cdot |\det(Jf)| \\ &\cdot \int_{(-\pi,\pi)} \exp(-i \cdot (m_a - m_b)) \cdot |\det(Jf)|. \end{aligned}$$

Hierbei ist zunächst besonders das letzte Integral interessant, denn es verschwindet überhaupt der gesamte Ausdruck nicht, wenn das letzte Integral nicht verschwindet und $m_a = m_b$ gilt. Es gibt hier noch eine zweite Möglichkeit, auf welche wir später zu sprechen kommen; hier folgern wir zuerst noch die erste *Auswahlregel* für Wasserstoff:

$$\Delta m = m_b - m_a = 0 \implies \text{linear polarisiertes Licht.}$$

(S34) □ Berechne das Matrixelement $M_{n \rightarrow m}$. Nutze hierzu die Aufspaltung $Y_{l,m} = \tilde{P}_{l,m}(\cos(\Theta)) \cdot \exp(i \cdot m \cdot \varphi)$ - die *normierten Legendre Polynome*. Zerlege dann das Skalarprodukt in die entsprechenden Integrale und zeige die Nullhypothese.

Um den Zusammenhang für *zirkulär polarisiertes Licht* deutlicher hervorzuheben, wollen wir auf die genauen Integralfaktoren optisch verzichten und uns die Proportionalitäten genauer ansehen. Wir finden durch die Definition der zirkulär polarisierten Welle durch zwei linearkombinierte lineare Wellen mit Phasenverschiebung $\pi/2$ zunächst die Form

$$M_{a \rightarrow b}^{\pm} \propto \int_{(-\pi, \pi)} \exp(i \cdot (m_a - m_b) \cdot \varphi) \cdot \underbrace{(\cos(\varphi) \pm i \cdot \sin(\varphi))}_{\exp(\pm i \cdot \varphi)} d\varphi.$$

Daraus können wir durch das Integral $\int \exp(i \cdot (m_a - m_b \pm 1) \cdot x) dx$ die Folgerung der zweiten und dritten Auswahlregel vollziehen:

$$\Delta m = \pm 1 \implies \text{zirkulär polarisiertes Licht.}$$

Aus physikalischer Sicht bezwecken die Auswahlregeln die Einhaltung der *Drehimpulserhaltung* und der *Paritätserhaltung*. Im Falle der zirkulären Polarisation entlang der e_3 Achse muss sich bei einem abgesonderten Photonendrehimpuls $\pm \hbar$, also σ^{\pm} Licht, der Atomdrehimpuls um die Negation $\mp \hbar$ ändern. Für linearpolarisiertes Licht können wir aus diesem Konzept die Änderung des Atomdrehimpulses um 0 begründen, da die Überlagerung von σ^+ mit σ^- die linear polarisierte Welle π ergibt.

Bei unserer Überlegung über das Verschwinden des Matrixelementes $M_{n \rightarrow m}$ sprachen wir bereits eine zweite Möglichkeit an: Der Raumwinkel Θ . Wir überlegen uns ein Szenario: Für ein Integral der Form $\int_{\mathbb{R}} f$ gilt die Gleichheit zu 0, wenn f zum Beispiel die Bedingung der *Ungeradheit* erfüllt. Liegt diese Charakteristik vor, so können wir das Integral sauber aufspalten zu $\int_{\mathbb{R}_{<0}} f + \int_{\mathbb{R}_{\geq 0}} f$ und erhalten durch das Auslöschen der Terme das Ergebnis 0. Das spezifische Verhalten der Funktion f bei Spiegelung des Arguments x zu $-x$ bezeichnen wir als *Parität*. Sie ist in positiv und negativ unterteilt mit den Definitionen

$$f(x) = +f(-x) \quad f(x) = -f(-x).$$

Da wir das Verschwinden des Integrales oben gerade nicht erzielen wollen, fordern wir für den Integranden seine *Geradheit*. Wir können dies verschärfen auf die Zustände ψ_a, ψ_b : Wir fordern von ihren Darstellungen in \tilde{P}_a und \tilde{P}_b *unterschiedliche Parität*. Damit erhalten wir mit der Darstellung $\tilde{P}_{l,m}(\pi - \Theta, \varphi + \pi) = (-1)^l \cdot \tilde{P}_{l,m}(\Theta, \varphi)$ die Forderung *bei einem Übergang muss l ungerade werden* die vierte, l betreffende Auswahlregel:

$$\Delta l = \pm 1, \text{ denn der Drehimpuls des Photons ist } \pm \hbar.$$

Zuletzt halten wir noch fest, daß es für die Hauptquantenzahl n keine solchen Auswahlregeln gibt. Für die Spinquantenzahl s werden wir noch $\Delta s = 0$ feststellen, für j finden wir noch $\Delta j \in \{-1, 0, 1\}$, wobei der direkte Übergang $j = 0 \rightarrow 0 = j$ verboten ist.

.....

- ☐ Weil bei $\Delta s = 0$ die Änderung von $\Delta l = \pm 1$ durch $\Delta m_s \mp 1$ kompensiert werden kann. (§35)

Ordne diese Aussage im Kontext der letzten Auswahlregeln ein.

- ☐ Bestimme alle Möglichkeiten, wie der Matrixterm $M_{a \rightarrow b}$ verschwinden kann, indem du (§36)

seine Faktoren untersuchst.

.....

3.5 Wasserstoffatom im Magnetfeld und normaler Zeeman Effekt

Semiklassische Beschreibung

Wir stellen uns im semiklassischen Modell das Elektron als klassisch bewegend mit quantisiertem Drehimpuls auf einer Kreisbahn um den Kern mit Radiusvektor $r \in \mathbb{R}^3$

VL 13
02.06.2023,
11:45
@home

und $\|l\| = \sqrt{l \cdot (l+1)} \cdot \hbar$ vor. Für die Umlaufzeit gilt dann $T = 2 \cdot \pi / \omega$ und für den Strom $I = -e/T$. Daraus bestimmt sich das magnetische Moment als

$$p_m = -I \cdot A_{0,r} = -I \cdot \pi \cdot \|r\|_2^2 \cdot n_{A(0,r)},$$

wobei $A_{0,r}$ die Fläche der Kreisbahn und $n_{A(0,r)}$ die Normale der Fläche ist. Mit dem Bahndrehimpuls $l = r \times p = m_e \cdot v \cdot \|r\|_2 \cdot n_{A(0,r)}$ durch $r \perp p \perp n_{A(0,r)}$ folgt kombiniert

$$p_m \propto -\frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot l \parallel \mu_l.$$

.....
 (S37) □ Berechne die Proportionalitätskonstante.

Legt man im nächsten Schritt ein B Feld nichtparallel zum magnetischen Moment des Elektrons μ_l an, so beginnt der Drehimpuls l um die Richtung des B Feldes zu präzedieren. Orientieren wir unser Koordinatensystem in der Art, daß $B \parallel e_z$, so wird der Drehimpuls um e_z erhalten und der Drehimpulsoperator $L_z := L_3$ interessant. Wir können zeigen, daß die Eigenwerte von L_3 die Form $m \cdot \hbar$ annehmen, wobei $m \in D_l$ die *magnetische Quantenzahl* ist. Die Präzessionsfrequenz ist dann gegeben durch die *Larmor Frequenz*

$$\omega_p = \frac{D}{\sin(\Theta) \cdot \|l\|_2} = \frac{\|\mu_b\|_2 \cdot \|B\|_2 \cdot \sin(\Theta)}{\|l\|_2 \cdot \sin(\Theta)} = \frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \|B\|_2.$$

Die Energie des Elektrons als Anschauungsdipol im Magnetfeld ist über die Skalarproduktverknüpfung von μ_l und B gegeben durch

$$E = -\langle \mu_l, B \rangle = -\frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot \langle l, B \rangle.$$

Fassen wir nun $B = (0, 0, B)$ als Vektor und $n \mapsto L_n \in L_S(\mathcal{H})$ als Operatortupel auf, so wird die Energie über die Eigenwerte von L_3 weiter bestimmt durch den Einschub der $L_S(\mathcal{H})$ Identität

$$E = -\frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot B \cdot \text{id}_{\mathcal{H}} \circ L_3 = -\frac{e}{2 \cdot m_e} \cdot B \cdot m \cdot \hbar \cdot \text{id}_{\mathcal{H}} = \frac{e \cdot \hbar}{2 \cdot m_e} \cdot m \cdot B \cdot \text{id}_{\mathcal{H}}.$$

Den Bruch $\mu_B := e \cdot \hbar / (2 \cdot m_e)$ bezeichnet man als das *Bohrsche Magneton*.

(S38) □ An dieser Stelle vergisst man in der Physik häufig wieder den Raum, aus welchem E entspringt. Wie ist unter Beachtung dessen die Anschauung des Ergebnisses?

VL 14

19.06.2023,

11:45

3.6 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 *anomalen* Zeeman-Effekt.

3.7 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? (S.39)

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

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

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 [\rightarrow 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

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

3.8 Felder und Potentiale in der Quantenphysik

Mit der Felddarstellung $E = -\text{div} \varphi - \frac{d}{dt} A$ und $B = \text{rot } A$ können wir in die Quantenphysik durch die Transformation $\Phi := \varphi - \frac{d}{dt} \Lambda$ und $\mathcal{A} := A + \text{div } \Lambda$, 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

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

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

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

(S40) □ 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

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

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.

(S41) □ Recherchiere zu diesem Problem weiter unter Aharonov-Bohm-Effekt und Quantenmechanik Skript.

VL 16

22.06.2023,

10:00

3.9 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*. (§42)

.....
 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 (§43)

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 $\tau = 1/\gamma$, $\tau_n = 1/A_n$ (§44)
 aus früheren Überlegungen.

.....

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

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

.....

□ Führe eine Transformation auf die Frequenz durch und bestimme die Verteilung $P(\omega)$. (§45)

.....

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:

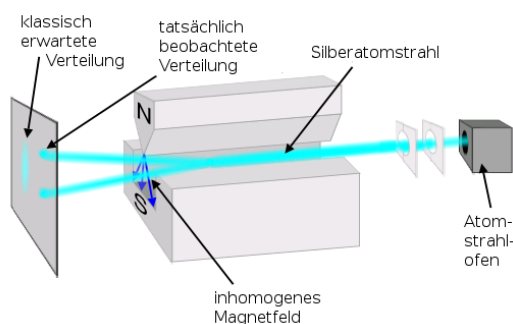


Abbildung 14: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Experiments.

Der Spinnachweis gelingt dabei dadurch, daß die Atome in zwei verschiedene Richtungen abgelenkt werden.

.....
☐ Zur Anschauung des Prinzips betrachte das hinterlegte →Video. (S.46)

☐ Betrachte die hinterlegte →Grafik und erkläre die dazu führenden Prozesse. (S.47)

.....
 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

VL 17
 26.06.2023
 11:45

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

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.48)

☐ 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.49)

☐ 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.50)

.....
 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.

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

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.

- (52) □ Wann ist ein Operator $S \in L_S(\mathbb{R}^3)$ zerlegbar in ein Tupel aus Operatoren $n \mapsto S_n$ mit $S_n \in L_S(\mathbb{R})$?
- (53) □ Berechne die Eigenwerte von S_3 durch $S_3(x) = \lambda_3 \cdot x$. Verifiziere $\lambda_3 = \hbar \cdot m$.
- (54) □ 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*.

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 $j \in \{l-s+n : n \in \mathbb{N}\} \cap [l-s, l+s]$ 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

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

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

- (55) □ Definiere einmal die genauen Mengen, aus welchen die Quantenzahlen stammen. Fülle die Lücken in der obigen Definition aus.
- (56) □ 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 $[H_{V,S,n}, \mathcal{J}_3] = 0$.
- (57) □ Recherchiere zur *Spin-Bahn-Kopplungskonstante* ξ und füge sie in das Modell ein.

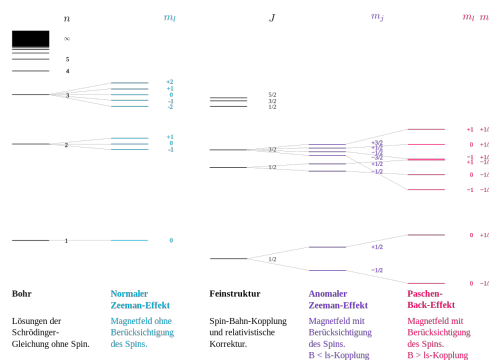


Abbildung 15: Aufspaltung der Spektrallinien des Wasserstoffatoms im Magnetfeld.

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 $\xi/2 \cdot (j \cdot (j + 1) - l \cdot (l + 1) - s \cdot (s + 1))$.

.....
☐ Berechne die Energieeigenwerte auf diesen Grundlagen. (S.58)

☐ Recherchiere zur *Feinstruktur* des Wasserstoffatoms. (S.59)

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 : $\Delta E \approx Z^4 / (h^3 \cdot (l + 1/2) \cdot (l + 1))$.

4.2 Anomaler Zeemaneffekt

In vektorieller Darstellung ist die Entstehung von J durch die Kopplung von L und S gegeben. Ebenso koppeln die magnetischen Momente μ_L und μ_S zu μ_J , dessen Richtung jedoch im Allgemeinen nicht mehr mit derjenigen von J zusammenfällt (siehe Abbildung 16a). Projiziert man die Vektoren J und μ_J jedoch auf eine Ebene, so lässt sich mittels Trigonometrie die Projektion von μ_J auf J bzw schließlich auf das Magnetfeld B durch den Landé-Faktor g bestimmen (siehe Abbildung 16b)

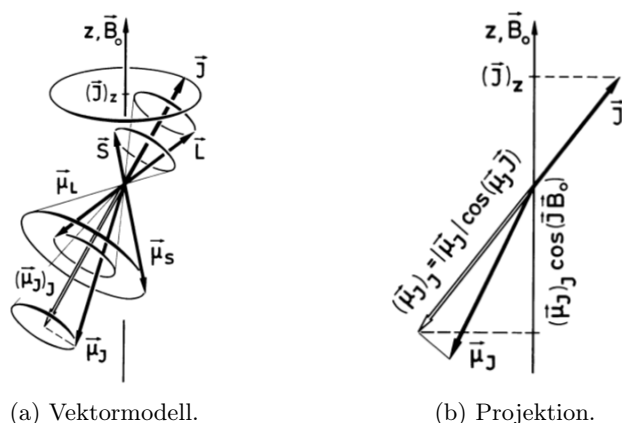


Abbildung 16: Vektormodell und Projektion des anomalen Zeeman Effektes.

-
- (60) ☐ Schreibe eine schöne Geschichte zu diesem Thema. [→ Haken-Wolf]
- (61) ☐ Berechne die zeitliche Mittelung von μ_j .
-

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 und in einem späteren Modell erneute Verwendung finden wird. 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

5.1 Hyperfeinstruktur

VL 19

29.06.2023,

10:00

(18)

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

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

.....
☐ Leite die Energiebeziehung für das relativistische Elektron im Coulomb Potential mittels Reihenentwicklung her. (S.62)

.....
 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.

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

.....
☐ 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. (S.63)

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

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

zu. Die Bausteinfunktion Φ definieren wir dabei, um später klarer über die groben Konzepte sprechen zu können².

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*³.

.....
 (S64) □ 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

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

²Strenggenommen 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*.

³Hier 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.

6 Mehrelektronensysteme

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

VL 20

30.06.2023,

11:45

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

.....

□ Verallgemeinere die Aussage auf $n \in \mathbb{N}$ Teilchen. Schreibe das Wahrscheinlichkeitsmaß für zwei Teilchen auf. (S.65)

.....

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

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

Unter Berücksichtigung des Spins kann die Gesamtwellenfunktion aufgespalten werden zu

VL 21

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.

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

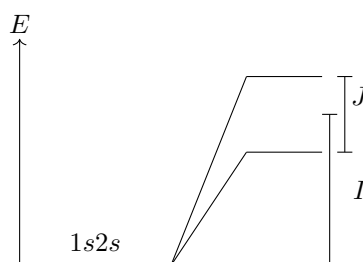
$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle).$$

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? (S.66)

.....



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

.....
☐ Recherchiere zu dem versteckten Integral des Skalarproduktes und dessen Lösung. (S.67)

☐ Aus der Störtheorie wissen wir, daß nur kleine Störungen zu guten Ergebnissen führen. (S.68)

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

$$E_{e-e}^{sing} = \psi^{sing} H_{e-e} \psi^{sing} = I + J,$$

$$E_{e-e}^{trip} = \psi^{trip} H_{e-e} \psi^{trip} = I - J.$$

Dabei sind I und J Abkürzungen für komplizierte mehrdimensionale Integralausdrücke. Dabei bedeutet I die *Coulomb-Wechselwirkung* und J die *Austausch-Wechselwirkung*. Es spiegelt die Energie wieder, welche zwischen den beiden Elektronen bei einem Übergang ausgetauscht wird.

.....
☐ 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. (S.69)

.....
 Für den effektiven Hamiltonoperator in diesem Problem können wir mithilfe der Spinoperatoren für die beiden Elektronen schreiben

VL 23
 19.07.2023,
 08:15

$$H^{eff} = \underbrace{\frac{1}{4} \cdot (E^S + 3 \cdot E^T)}_{\text{const.}} - \underbrace{(E^S - E^T) \cdot \frac{1}{\hbar^2} \cdot (S_1 \circ S_2)}_{\text{Abhängig von Spin}}.$$

Den zweiten Summanden kann man dabei noch umformen zu $-2 \cdot J/\hbar^2 \cdot (S_1 \circ S_2)$, sodaß wir die Austausch-Wechselwirkung erneut ins Spiel bringen. Über dieses Integral können wir eine Klassifizierung durchführen:

→ Ist $J > 0$, so folgt $E^S > E^T$ und $s = 1$ bzw. der Triplettzustand ist energetisch günstiger.

→ Ist $J < 0$, so folgt $E^S < E^T$ und $s = 0$ bzw. der Singulettzustand ist energetisch günstiger.

6.4 Periodensystem

Die Verteilung von einer Anzahl N Elektronen auf den möglichen Energieniveaus beschrieben durch (n, l, m_l, m_s) erfolgen im Atom gerade so, daß das Pauli-Prinzip erfüllt ist und die Gesamtenergie der Elektronen minimal wird.

Die gesamte zeitlich gemittelte Ladungsverteilung aller (maximal möglicher) $2 \cdot n^2$ Elektronen mit gleicher Hauptquantenzahl n ergibt sich durch die Summation über alle l und m_l Nebenquantenzahlen. Diese Ladungsverteilung ist dabei *radialsymmetrisch* und wird durch die *Radialverteilungsfunktion* $R_{n,l}(r)$ beschrieben. Die *Radialverteilungsfunktion* ist dabei gegeben durch

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{r^2} \cdot |\psi_{n,l}(r)|^2.$$

Sie hat optisch die Form einer Glockenkurve. Der Hauptanteil der Ladung befindet sich dabei im Bereich $r \pm \Delta r/2$ mit Δr als *Breite* der Glockenkurve.

Schalennotation

Spricht man von Schalen eines Atoms oder Elektronenkonfiguration, so bedarf es einer weiteren standardisierten Sprechweise. Für ein Zustandstupel (n, l) notiert man dabei mit der schon in der spektroskopischen Notation verwendeten Buchstabenzuordnung der Form $B : 0 \mapsto S, 1P, 2 \mapsto D$ und $3 \mapsto F$, bzw. alle nachfolgenden alphabetisch geordnet. Damit ergibt sich der Baustein

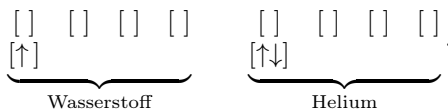
$$(n, l, N) \mapsto n\mathcal{B}(l)^N,$$

wobei N die Elektronenanzahl in dem jeweiligen Orbital beschreibt. Diese unterscheiden sich dann lokal in den Zahlen (m_l, m_s) . Beispiele sind hier $1s^2, 2s^2$ usw.. Da hier mehrere Tupel (n, l) pro Hauptquantenzahl n durch die Variation von l möglich sind, werden hier neue Gruppen zusammengefasst durch die Obermengen $n \mapsto \{(n, l) : l \in [n-1]\}$ beschränkt. Diese Mengen werden durch die Schalenbuchstaben P, L, M, N, O usw. bezeichnet.

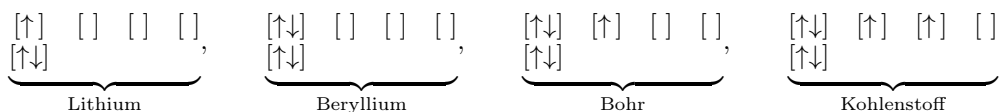
(S.70) □ Notiere zur Übung die Elektronenkonfigurationen der Elemente H, He, Li, Be , und B .

Auffüllen der Schalen

Nach dem obigen Modell kann nun die Einsortierung gedanklich „dazukommender“ Elektronen vollzogen werden.



Für die nächsten Elemente haben wir dann die Form



Auffällig ist dabei die „parallele Orientierung“ des Spins der Elektronen beim Kohlenstoffatom in der P Unterschale. Dies bringt uns auf die *Hundschen Regeln*:

- Im Grundzustand eines Atoms hat der Gesamtspin \mathcal{S} den maximalen, mit dem Pauli Prinzip verträglichen Wert.
- Für Terme mit maximalem \mathcal{S} liegen die Zustände mit maximalem \mathcal{L} am niedrigsten.
- (a) Bei weniger als halbgefüllten Schalen bildet der Term mit $\mathcal{H} = |\mathcal{L} - \mathcal{S}|$ den Grundzustand.
- (b) Bei mehr als halbgefüllten Schalen bildet der Term mit $\mathcal{H} = \mathcal{L} + \mathcal{S}$ den Grundzustand.

Als Begründung dieser Regeln führen wir Energieminimierungsargumente an, welche wir in diesem Rahmen jedoch nicht weiter ausführen wollen.

-
- ☐ Berechne die möglichen Elektronenanzahlen auf den Schalen K , L , M und N . (S.71)
 - ☐ Recherchiere zu der Begründungsstruktur der Hundschen Regeln. (S.72)
-

6.5 Aufhebung der l Entartung bei Alkali Atomen

Die Energieniveaus

7 Moleküle

Moleküle sind stabile Einheiten, welche aus mindestens zwei Atomen bestehen. Zwischen den Atomen herrscht dabei eine Bindungskraft, welche relativ zur Bindungskraft innerhalb eines Atomes jedoch vernachlässigbar ist. Die Struktur der Atome bleibt innerhalb eines Molekülverbundes also erhalten, die interatomare Bindung beeinflusst nur die Elektronen in äußeren Atomschalen, die sogenannten *Valenzelektronen*. Für die chemischen Effekte und Reaktionen ist diese Eigenschaft von immenser Bedeutung.

VL 24
 21.07.2023,
 11:45
 last one!

7.1 Das ein Elektron zwei Proton System

Für ein Elektron im Coulombpotential zweier Protonen können wir das gemeinsame Potential Durch

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left(\frac{1}{||r_1||} + \frac{1}{||r_2||} - \frac{1}{||R||} \right),$$

wobei wir r_i als Differenzvektor vom Kernmittelpunkt des i ten Protons zum Elektron und R als Differenzvektor der beiden Protonenkerne definieren.

Dies führt uns auf die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-H_{A,E_{pot}} - H_{B,E_{pot}} - H_{e,E_{pot}} \right) (\psi) = E \cdot \psi,$$

wobei $H_{A,E_{pot}}$ und $H_{B,E_{pot}}$ die Hamiltonoperatoren der Protonen und $H_{e,E_{pot}}$ der des Elektrons ist. Betrachten wir nur $H_{e,E_{pot}}(\psi) = E \cdot \psi$ für einen Molekülzustand ψ , so können wir das erhaltene System nicht analytisch lösen. Hier müssen wir auf Näherungsmethoden wie die *Born-Oppenheimer-Näherung* oder die *LCAO-Methode* (Linear Combination of Atomic Orbitals) zurückgreifen. Bei letzteren Methode versuchen wir, die molekulare Zustandsfunktion ψ als Linearkombination von Atomzustandsfunktionen ψ_i zu schreiben. Wir stellen hier unser konkretes Beispielsystem H_2^+ durch eine

Kombination des Wasserstoffatoms H und des Wasserstoffionen H^+ dar, wobei sich H im Grundzustand $1s$ befinden soll. Damit ist für die erste Atomzustandsfunktion

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot a_0^3}} \cdot \exp\left(\frac{-||x||^2}{a_0}\right),$$

wobei a_0 die *Bohrsche Länge* ist. Für die zweite Atomzustandsfunktion φ_2 fordern wir, daß diese orthogonal zu φ_1 ist. Damit erhalten wir

$$\psi(x) = c_1 \cdot \varphi_1(x) + c_2 \cdot \varphi_2(x).$$

Für die Normierbarkeit fordern wir weiter, daß $||\psi|| = |c_1| \cdot ||\varphi_1|| + |c_2| \cdot ||\varphi_2|| = 1$ gilt.

.....

(S73) □ Berechne $||\psi||^2$ und isoliere das *Überlappintegral* $\int \varphi_1 \cdot \varphi_2 \lambda$.

.....

Ist $S_{1,2}$ das in der Aufgabe bestimmte Überlappintegral, so erhalten wir

$$H_{1,1} = \int \varphi_1^* \cdot H(\varphi_1) \lambda, \quad H_{1,2} = \int \varphi_1^* \cdot H(\varphi_2) \lambda.$$

.....

(S74) □ Betrachte in den Vorlesungsfolien die eingebundene Graphik zur Linearkombination von φ_1 und φ_2 .

.....

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 (?). *Absorptionsspektrum 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.