Experimentalphysik - Struktur der Materie   Teil 1: Atomphysik

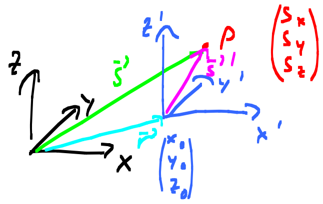
1. Relativistische Kinematik

1.1. Spezielle Relativitätstheorie (SRT)

2 Postulate: 1) Die Gesetze der Physik gelten in allen Inertialsystemen, die sich gleichförmig gegeneinander bewegen.

2) Alle Beobachter messen unabhängig von ihrem Bewegungszustand denselben Wert für die Vakuumlichtgeschwindigkeit c.

Zu 1) Inertialsystem: kartesisches Referenzkoordinatensystem



$$\vec{r} = x_0\,\vec{e}_x + y_0\,\vec{e}_y + z_0\,\vec{e}_z = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}$$

- zeitl. konst. Bezug $\vec{r} \neq f(t)$ offset
- gleichförmig bewegt

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x_0 + v_x t \\ y_0 + v_y t \\ z_0 + v_z t \end{pmatrix} = \vec{r}_0 + \vec{v} t \quad // \ \vec{v} = \text{const.} \quad \vec{v} \neq f(t)$$

$$\vec{s} = \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} , \quad \vec{s}\,' = \begin{pmatrix} s_x' \\ s_y' \\ s_z' \end{pmatrix} = -\vec{r} + \vec{s}$$

$$\vec{s}\,' = \vec{s} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t \quad // \ r_0 = 0 \text{ für } t = 0 \text{ O.b.d.A.}$$

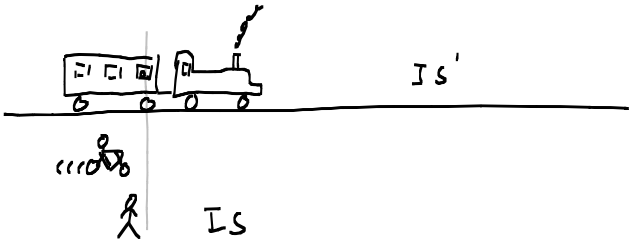
$$\boxed{\Rightarrow \vec{s}\,' = \begin{pmatrix} s_x - v_x t \\ s_y - v_y t \\ s_z - v_z t \end{pmatrix}}$$

$s_x, s_y, s_z \ldots \in \mathbb{R}$

Galilei-Transformation

Newton'sches Relativitätsprinzip:

Unter der Galilei-Transformation ändern sich die phys. Gesetze nicht.



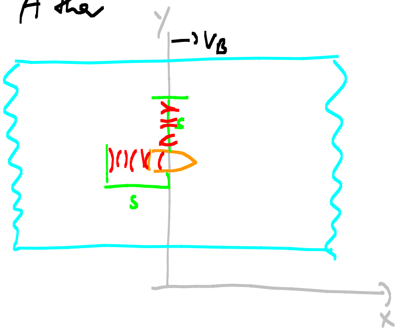
IS: v_Z, v_F $E_{kin,F} = \frac{1}{2} m v_F^2$, $s_F = v_F t$ $(t=0, s=0)$

IS': $v_Z' = 0 = v_Z - v_Z$, $v_F' = v_F - v_Z \neq v_F$ $E_{kin,F}' = \frac{1}{2} m v_F'^2$

Problem: Licht verhält sich anders!

Elektromagnetische Welle : $v_L = v_L'$

Zu 2) 1880 Äther



Laufzeit der Wellen?

X-Richtung

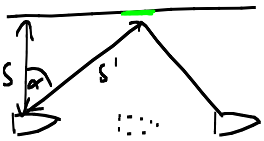
$$V_{x_1} = -V_B + c = c - V_B$$

$$V_{x_2} = V_B + c = c + V_B$$

$$t_{x_1} = \frac{s}{V_{x_1}} , \quad t_{x_2} = \frac{s}{V_{x_2}}$$

$$t_x = s\left(\frac{1}{V_{x_1}} + \frac{1}{V_{x_2}}\right) \; \dots = \frac{2s}{c}\left(1 - \frac{V_B^2}{c^2}\right)^{-1}$$

Y-Richtung



$$\tan\alpha = \frac{v}{c}$$

$$t_y = \frac{2s'}{c} \qquad s'^2 = s^2 + \left(V_B \cdot \frac{t_y}{2}\right)^2 \Rightarrow t_y = \frac{2s}{c}\left(1 - \frac{V_B^2}{c^2}\right)^{-1/2}$$

Zeitdifferenz $\Delta t = t_x - t_y$

$V_B \ll c \qquad (1 \pm \varepsilon)^n = 1 \pm n\varepsilon$
$\varepsilon \ll 1$

$$\Delta t = \frac{s V_B^2}{c^3}$$

Experiment: $s = 1\,m$, $V_B = V_{Erde} \approx 30 \frac{km}{sec}$

$\Delta t = \dots \; 3{,}3 \cdot 10^{-17}\,sec$

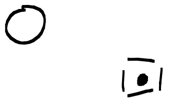
$\Delta s = c \cdot \Delta t \sim 10^{-8}\,m = 10\,nm$

Spektrometer: $\frac{500\,nm}{50} = 10\,nm$

$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = R \nearrow$ einfach

Michelson-Morley-Experiment

Schlüsse:
- Äther nicht relativ zur Erde



geozentr. Weltbild

- c = const. relativ zur Quelle
  ⇒ Doppelsternrotationskurven wären verzerrt
- c = const., ∄ Äther ⇒ Postulat 2

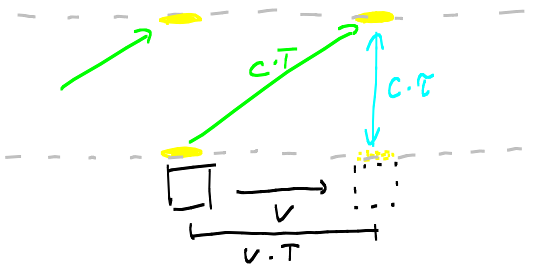
⇒ widerspricht Newton'schem Relativitätsprinzip

Folgerungen

1) stationäre Lichtuhr

$$s = c \cdot \tau$$

2) bewegte Lichtuhr



$$(cT)^2 = (vT)^2 + (c\tau)^2$$

$$T = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\tau = \gamma \tau$$

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

τ: Zeit wahrgenommen vom mitbewegten Beobachter

T: Zeit wahrgenommen vom Beobachter, der sich mit v relativ zur Uhr bewegt.

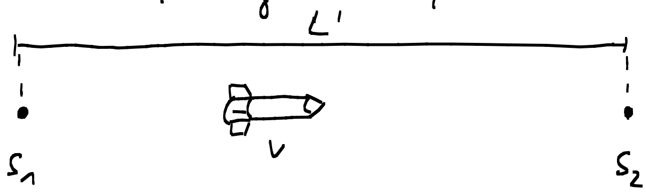
- Für bewegten Beobachter vergeht mehr Zeit zwischen den Schlägen: Zeitdilatation
  - Myonen: $m_\mu = 207\, m_e$ $q_\mu = q_e$ $t_{1/2} = 2{,}2\,\mu sec$

    // Kosmische Strahlung in Hochatmosphäre (Atome)

    $v_\mu \approx 99\%\ c \Rightarrow \gamma \approx 7{,}1 \Rightarrow \gamma t_{1/2} = 16\,\mu sec$

    $S_{2{,}2\mu sec} = c \cdot 2{,}2\,\mu sec = 660\ m$

    $S_{16\mu sec} = 660\,m \cdot 7{,}1 = 4700\,m$ // am Boden nachweisbar
  - Atomuhren in Flugzeugen
  - $\gamma = 1{,}01$ für $v = 0{,}14\,c$



L' von der Erde $t' = \frac{L'}{v}$

$$t_R = \frac{t_R'}{\gamma}$$

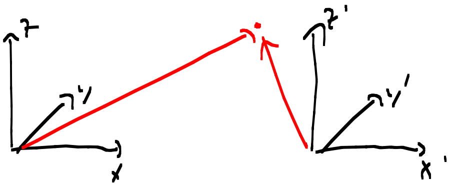
$$L = v \cdot t_R = v \cdot \frac{t_R'}{\gamma} = \frac{L'}{\gamma}$$ Längenkontraktion

1.2 Lorentz-Transformation

- Zeitdilatation
- Längenkontraktion

1890 EM-Strahlung

Ort



$z' = z$

$y' = z$

$x' = (x - vt)\, G_1$

$t' = (t - \Delta t)\, G_2$ ...

$$x' = \gamma(x - vt) \qquad x = \gamma(x' + vt')$$
$$y' = y \qquad y = y'$$
$$z' = z \qquad z = z'$$
$$t' = \gamma\left(t - \frac{vx}{c^2}\right) \qquad t = \gamma\left(t' + \frac{vx'}{c^2}\right)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$v << c$ Lorentz → Galilei : Übung

Geschwindigkeiten:

(x, y, z, t) u_x $u_x = \frac{dx}{dt}$

(x', y', z', t') u_x' $u_x' = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\gamma(dx - v\,dt)}{\gamma\left(dt - \frac{v}{c^2} dx\right)} \;/\; \frac{1}{dt}$ $\frac{dx}{dt} = v_x$

$$\boxed{u_x' = \frac{u_x - v}{1 - \frac{v u_x}{c^2}}} \qquad \boxed{u_x = \frac{u_x' + v}{1 + \frac{v u_x'}{c^2}}}$$

Sei $u_x = c \Rightarrow v_x' = \frac{c - v}{1 - \frac{v \cdot c}{c^2}} = \frac{c(c - v)}{c - v} = c$ Konsistent!

1.3. Relativistische Impulse & Energien

Klassisch $\vec{p} = m_0 \vec{u}$

ok für Galilei-Transformation

~~ok~~ für Lorentz-Transformation

$\vec{p} = \gamma\, m_0 \vec{u}$

$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = \gamma(u)$

$\gamma = \gamma(v)$

$p_x' = \gamma p_x - \gamma \frac{v}{c^2} E$

$p_y' = p_y$

$p_z' = p_z$

$E = \gamma E - \gamma V p_x$

$v << c$

$p_x' = p_x$

⋮

$(1 + \varepsilon)^n = 1 + n\varepsilon$

$$E = m_0 \gamma(u) c^2 = m_0 c^2 \left(1 - \frac{u^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = m_0 c^2 \left(1 + \frac{u^2}{2c^2}\right)$$

$$E' = m_0 \gamma(u') c^2 \qquad = \underline{m_0 c^2} + \frac{1}{2} m_0 u^2 + \ldots$$

Ruheenergie (1905) kin. Energie

- Äquivalenz von Masse und Energie ⇒ $E = m_0 c^2$

$1t$ TNT → $4{,}18 \cdot 10^9$ J

1 Mt H-Bombe Wieviel Masse wird verwandelt.

$$m = \frac{E}{c^2} \quad \frac{4{,}18 \cdot 10^9 J \cdot 10^6}{(3 \cdot 10^8 \, m/s)^2} = 46 \, g$$

- p statt u

$$E = \gamma(u) \, m_0 c^2 , \quad p = \gamma(u) \, m_0 u \quad \Rightarrow \quad E^2, p^2 \to u^2 = \ldots$$

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2$$

$\to$ $m_0 = 0$ (z.B. Photon) $\boxed{E = p \cdot c}$

$\to$ $p = 0$ $\boxed{E = m_0 c^2}$

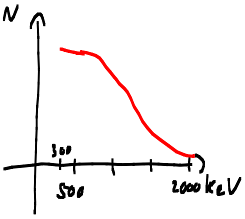
$$m_0^2 c^4 = \text{const} \quad \underbrace{E^2 - p^2 c^2}_{\text{Lorentz-invariant}}$$

Versuch

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} = pc \sqrt{1 + \frac{m_0^2 c^4}{p^2 c^2}} = pc \sqrt{1 + \left(\frac{m_0 c}{p}\right)^2} \qquad p > m_0 c$$

$$E \sim p$$

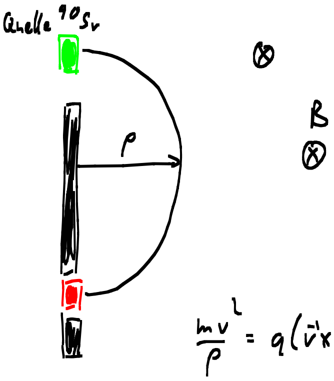
klassisch: $E = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} \sim p^2$

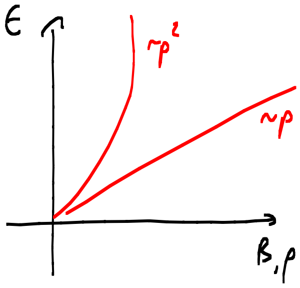


$\to$ Zerfall von ^{90}Sr $t_{1/2} = 28{,}8$ Jahre

$\to$ e^-

Versuch





$$\frac{m v^2}{\rho} = q(\vec{v} \times \vec{B}) = q v b$$

Elektronen von 40 keV: 0,374 c $\boxed{mv = p = q B \rho}$

Messung: $p \cdot c \sqrt{1 + \left(\frac{mc}{p}\right)^2} - m_0 c^2$

2. Quantentheorie des Lichts

2.1. EM-Wellen

- $\vec{E} = \frac{q}{4 \pi \varepsilon_0 r^2} \vec{e}_r = \frac{\vec{F}}{q}$
- El-Felder

$$\oint \vec{E} \, d\vec{A} = \frac{q}{\varepsilon_0} \qquad \text{div} \, \vec{D} = \rho \quad , \vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E}$$

- $-\dot{\phi}_B = \oint \vec{E} \, d\vec{s} \qquad \text{rod} \, \vec{E} = -\dot{\vec{B}}$

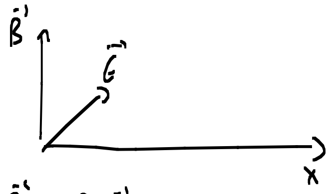
- $\oint \vec{B} \cdot d\vec{A} = 0$ $\quad \operatorname{div} \vec{B} = 0$ $\quad \nexists$ magn. Monopole
- $\oint B \, ds = \mu_0 I$ $\quad \operatorname{rot} \vec{H} = \vec{j}$ $\quad \vec{H} = \mu_0 \vec{B}$
  Stromdichte
- $\oint \vec{B} \, d\vec{s} = \mu_0 I + \varepsilon_0 \mu_0 \dot{\Phi}_E$; $\operatorname{rot} H = \vec{j} + \vec{B}$

Freie Raum $\quad j = 0 \quad \varrho = 0$

$\Rightarrow \operatorname{rot} \vec{E} = -\dot{\vec{B}}$

$\operatorname{rot} \vec{H} = \dot{\vec{D}}$

$\operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \dot{\vec{E}}$



$\vec{E} = E \cdot \vec{e}_y$

$\vec{B} = B \cdot \vec{e}_z$

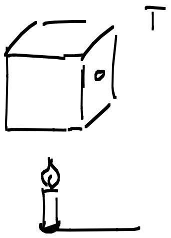
$$\left.\begin{aligned} &\Rightarrow \frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\partial B}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 B}{\partial x \partial t} \\ &-\frac{\partial B}{\partial x} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t} \Rightarrow -\frac{\partial^2 B}{\partial t \partial x} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \end{aligned}\right] \rightarrow \begin{aligned} &\ddot{E} = c^2 E'' \\ &\ddot{B} = c^2 B'' \end{aligned} \qquad \varepsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$$

$$E = E_0 \sin(kx - \omega t) \qquad \omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad c = \frac{\omega}{k} = \lambda \cdot \nu$$

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2 E}{\partial x_i^2} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0 = \Box \vec{E}$$ d'Alembertscher Operator

2.2. Schwarzkörperstrahlung



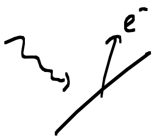
Versuch

$\Rightarrow h$

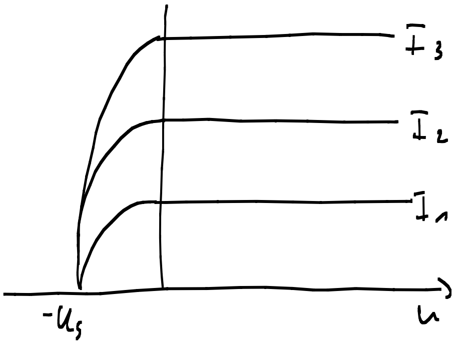
$\underline{E = h\nu}$

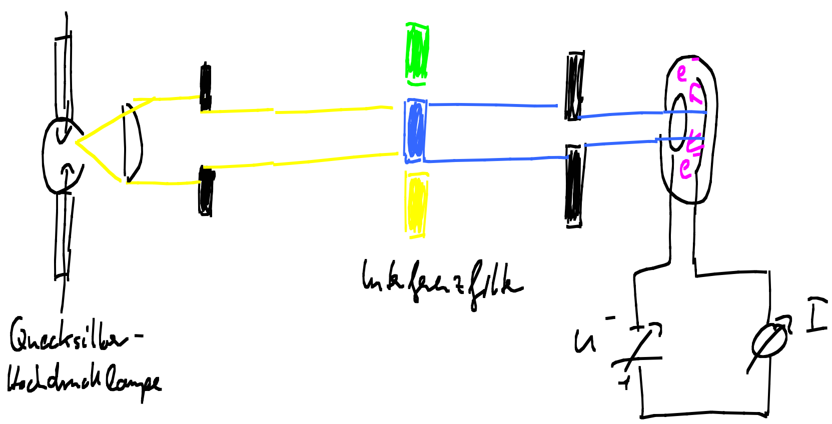
2.3. Photoeffekt

Hertz-Hallwachs 1888



Versuch





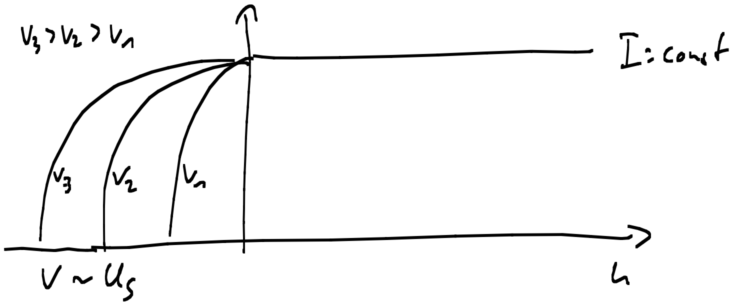
gelb: $\lambda = 578$ nm, $\nu = 5{,}19 \cdot 10^{14}$ s^{-1}
grün: $\lambda = 546$ nm, $\nu = 5{,}49 \cdot 10^{14}$ s^{-1}
blau: $\lambda = 436$ nm, $\nu = 6{,}88 \cdot 10^{14}$ s^{-1}

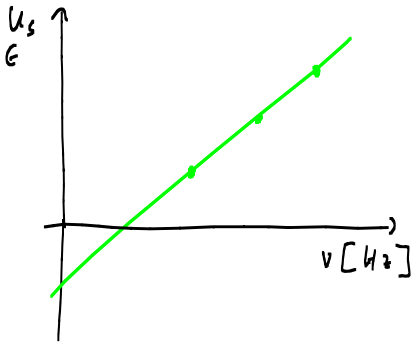
$U > 0$: $I_{photo} \sim$ Photonenstrom $(\nu = const)$

$U < 0$: I_{photo} nimmt ab

$U = -U_S$: $I_{photo} = 0$

Photonenstrom instantan





Erwartung: Licht ist Welle, Energie ist verteilt über die Welle

Elektronen absorbieren kontinuierlich das Licht

$$(E_{kin} \hat{=}) \quad K = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Absorb.} \\ \text{koeff.}}}{C} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Photonen-} \\ \text{strom}}}{I} \cdot \underset{\substack{\nwarrow \\ \text{wirksame} \\ \text{Fläche}}}{A} \cdot t \;\nwarrow \text{Zeit}$$

$$K^e_{max} = C\,I\,A\,t - \overset{\swarrow \text{Austrittsarbeit}}{\phi} \quad \sim I \cdot t$$

$$E_0^2 \cdot t \quad \neq f(\nu) \;↯$$

- kleine I : Beginn des Photonstroms verzögert

$$\frac{E_{K\,max} + \phi}{c\,I\,A} = t_{min} \sim O(\text{Tagen})$$

- $U_S \sim \nu$ ↯

Einstein: $E_{K\,max} = h\underset{\substack{\uparrow \\ \text{quantisierte} \\ \text{Photonen}}}{\nu} - \phi \quad \neq f(I), \neq f(t)$

$$E_{K\,max} = U_s e \Rightarrow U_s = \frac{h\nu - \phi}{e}$$

$$\frac{dU_s}{d\nu} = \frac{h}{e} \rightsquigarrow \frac{\Delta U}{\Delta \nu} \cdot e = h$$

Bestimmung von h aus Experiment

$$h = \frac{0{,}82\,V}{2 \cdot 10^{14}\,Hz}\, 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,C \approx 6 \cdot 10^{-34}\,Ws^2$$

=> Licht wirkt nicht wie eine Welle, sondern wie eine Abfolge von Teilchen.

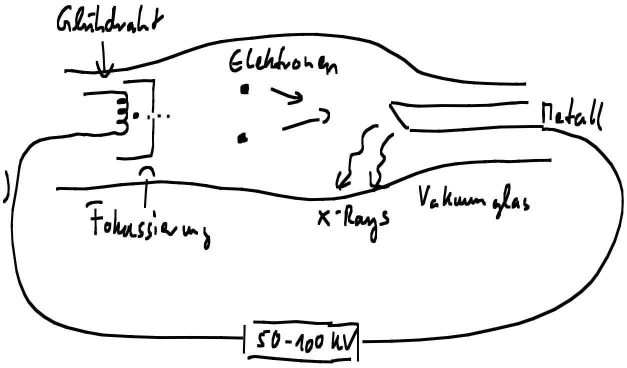
$$E = h\nu \quad , \quad p = \frac{E}{c}$$

2.4. Röntgenstrahlen & Compton Effekt

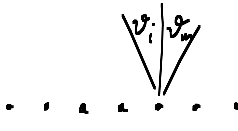
Röntgen (1895)

„Bremsstrahlung" $\lambda_{typisch} \approx 10^{-10}$ m $= 0{,}1$ nm

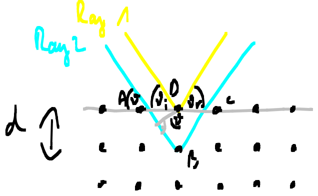
EM-Strahlung



Bragg & Bragg (1912)



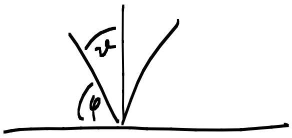
$\vartheta_i = \vartheta_r \neq f(\lambda)$



$$\frac{\overline{AB}}{d} = \cos\vartheta$$

$$\Delta s = \overline{AB} + \overline{BC} = 2d\cos\vartheta = n\cdot\lambda$$

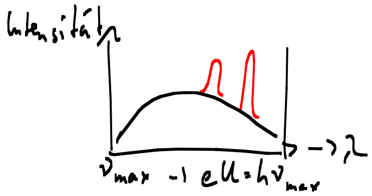
$$\boxed{n\lambda = 2d\sin\varphi}$$



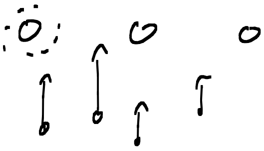
Spektrum auf Film -> λ bestimmen

Spektrum

- Kontinuum



- alle e^- gleiche Energie
- Stoßparameter kontinuierlich (Bestimmt Bremswirkung)



- höchste Frequenzen

$$E_k = eU_{Anode} = h\nu_{max} = \frac{hc}{\lambda_{min}}$$

$$U_{Anode} \sim \frac{1}{\lambda_{min}}$$

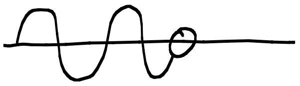
- Diskrete Linien K_α, K_β - abhängig vom Material
  - Hinweis auf atomare Energieniveaus
- Bragg-Reflexion - Wellen

Compton Effekt (1922)

Wechselwirkung EM-Strahlung mit Elektronen

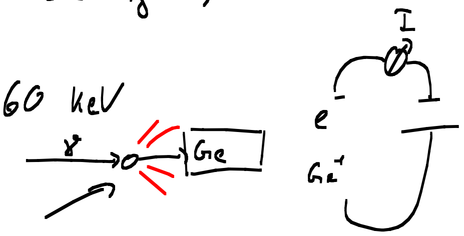
klassisch - elastische Streuung an freien e^- Thompson-Streuung

- elastische Streuung an gebundenen e^- Rayleigh-Streuung
- inelastische Streuung an freien e^- -> Erwartung
  - ○ $\nu_{nach} \leq \nu_{vor}$
    erzwungene Schwingung
  - ● Beschleunigung in Ausbreitungsrichtung der EM-Welle
  - ○ $\nu_{nach} = f$(Einwirkzeit der EM-Welle auf e^-)

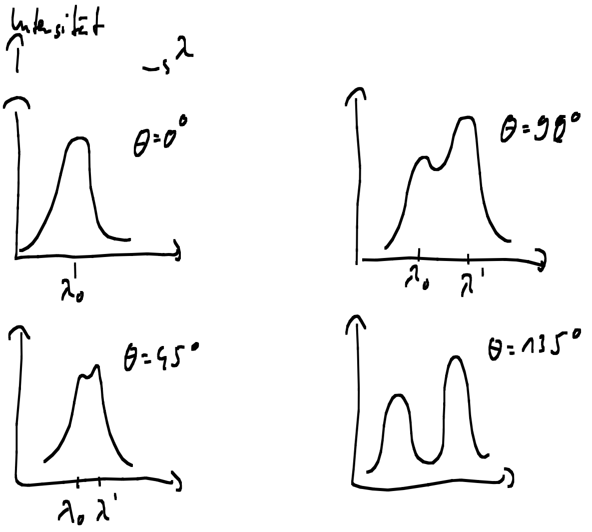


Versuch

^{241}Am γ 60 keV



0° ~ 60keV
45° ~ 58keV
90° ~ 55keV
135° ~ 52keV



- λ der einfallende Welle ändert sich unabhängig von der Intensität der einfallenden Strahlung und der Einwirkzeit

- $\lambda_{Streu} = f$(Streuwinkel)

=> vollständige Beschreibung durch klassische Stoß E & $\vec{p}$ - Erhaltung

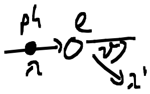
$E_{ph} = h\nu$

$E_e = m_0 c^2$

$p_{\parallel, ph} = \frac{h\nu}{e}$ $\qquad p_{\perp, ph} = 0$

$p_{e^- \perp, \parallel} = 0$

$\Big\} \quad \lambda - \lambda' = \frac{h}{m_0 c}(1 - \cos\vartheta)$



$\vartheta = 0° \rightarrow \lambda' = \lambda$

$\vartheta = 90° \rightarrow \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c}$ $\quad \Rightarrow \Delta\lambda(90°) = \frac{h}{m_0 c} = \lambda_c$

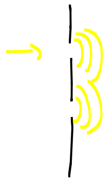
$\vartheta = 180° \rightarrow \lambda' - \lambda = \frac{2h}{m_0 c}$

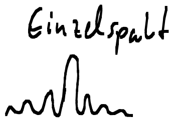
Comptonwellenlänge

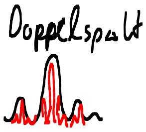
$$\lambda_c = 2{,}43 \cdot 10^{-12}\,m = 2{,}43\,pm$$

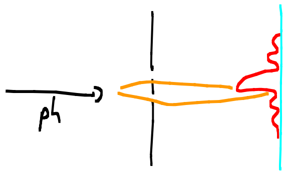
- freie Elektronen?
  - c -> Bindungsenergie ~ 4 eV
  - E_{ph} - 60 keV

Doppelspalt









- wenig Intensität ("einzelne Photonen"), woher weiß das Photon von der Welle / wo es hinmuss?

3. Teilchennatur der Materie

3.1. historisch

400 v. Chr.	Demokrit
	Leukip
1772	Lavoissier: Erhaltung der Materie
1803	Dalton
1811	Avogadro
1833	Faraday: Gesetz der Elektrolyse

$$m = \frac{q \cdot \text{Molmasse}}{96500\,C \cdot \text{Valenz}} \quad [g]$$

→ Atomare Struktur, ⊖; ⊕ - Teilchen

3.2 Elektron

$$\vec{F} = -e\vec{E} = -e\frac{U}{d}\,\vec{e}_E$$

$$\vec{F} = m_e\vec{a}$$

$$\vec{a} = -e\frac{U}{d m_e}\,\vec{e}_E$$

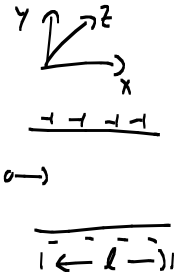
$$\vec{V}_y = \vec{a}\cdot t \Rightarrow t = \frac{l}{V_x}$$

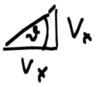
$$\vec{V}_y = -\frac{eUl}{d m_e v_x}$$

$$\frac{V_y}{V_x} = \tan\vartheta = \frac{|e|Ul}{d m_e v_x^2}$$

$$\frac{e}{m} = \frac{d v_x^2\vartheta}{Ul}$$

Thompson-Versuch





$$\vartheta \ll 1 \Rightarrow \tan\vartheta \approx \vartheta$$

magn. Gegenfeld

$$q\cdot\vec{E} = q\,\vec{v}\times\vec{B} \qquad \vec{v} \to v_x$$

$$v_x = \frac{E}{B} = \frac{U}{Bd}$$

$$\frac{e}{m} = \frac{d v}{U \ell} \frac{U^2}{B^2 d^2} = \frac{U v}{B^2 \ell d}$$

- Thompson $\frac{e}{m_e} = 1{,}76 \cdot 10^{11}$ C/kg

  Elektrolyse H $\frac{q_H}{m_H} = 10^8$ C/kg

  wenn $|q_H| = |q_e| \Rightarrow m_e = \frac{m_H}{1833}$ heute

  (1760) historisch

- $\boxed{\frac{e}{m_e}}$ ~> universelle Konstante / Baustein
- Elektron . griechisch "Bernstein" 1891 Stoney

Millikan-Versuch 1910

Öl ○ ↑ Reibung $6\pi a \eta v = F_R$ η Viskosität v Endgeschwindigkeit a Radius

↓ Gravitation

$\frac{4}{3}\pi a^3 \varrho g = F_G$

Freie Fall

$$a = \sqrt{\frac{9\eta v}{2\varrho g}} \rightsquigarrow m = \frac{4}{3}\pi a^3 \varrho$$

$$qE = mg \Rightarrow q = \frac{g}{E} m$$

Schweben

Messung $q = n \cdot e$ $n \in \mathbb{N}$

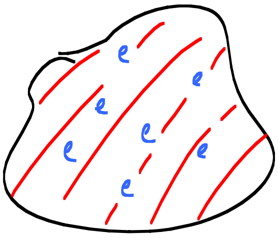
$$e = 1{,}60217733 \cdot 10^{-19}\ \mathrm{C}$$

Energie $E_{el} = qU$ [J] [eV] $[\mathrm{eV}] \xrightarrow{1{,}6 \cdot 10^{-19}} [\mathrm{J}]$

3.3 Atommodelle

* Thompson 1898

- Masse ist kontinuierlich verteilt
- Elektronen diskret eingebettet
- plum-pudding



ABER

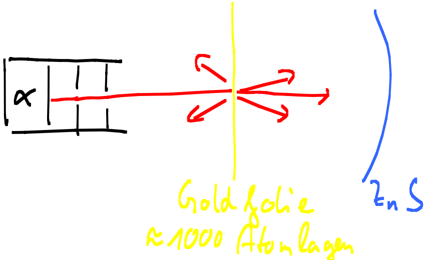
- diskrete Atomspektren ?
- Breiks H-Spektrum

* Rutherford

Streuung von α-Teilchen

(aus Radon)

$v_\alpha \sim 2 \cdot 10^4$ km/sec



- kleine Streuung !
- Rückstreuung ↯ mit kontinuierlicher Massenverteilung
- auch Rückstreuung !

→ Impulssatz lässt erwarten: große diskrete Masse !

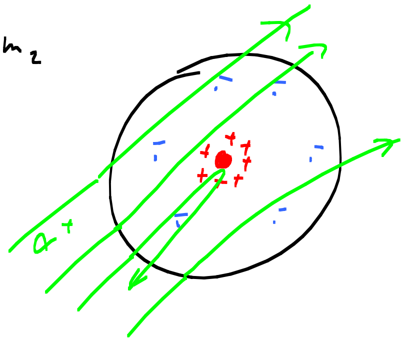
$$v_1' = v_1 \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} + v_2 \frac{2 m_2}{m_1 + m_2}$$

v_1, v_2 Vorher
v_1', v_2' nachher

$v_1 = v_\alpha \sim 2 \cdot 10^7 \ {}^{m}/_{sec}$

$v_2 = 0$

$$\left.\begin{array}{l} m_1 = m_\alpha \\ m_2 = m_{Au} \end{array}\right\} m_{Au} \sim 197 \gg 4 \sim m_\alpha \qquad = m_1 + m_2 \approx m_2$$



$$v_1' = v_1 \frac{m_1 - m_2}{m_2} = - v_1 \underbrace{\frac{m_2 - m_1}{m_2}}_{\approx 1}$$

⇒ Atom hat keine kontinuierliche Massenverteilung

⇒ größerer Teil der Masse als Punktmasse

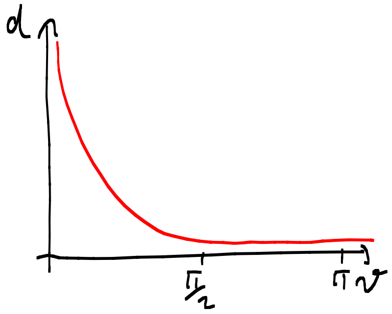
- $$F_{el} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2}$$
  $$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{2e \cdot Ze}{r^2}$$

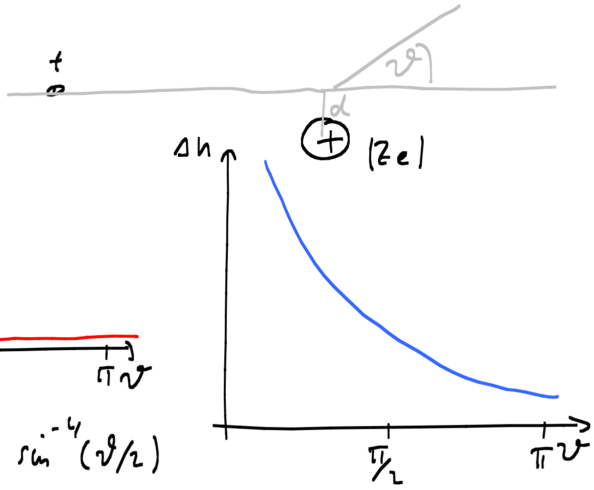
Z: Kernladungszahl / Ordnungszahl

$\vartheta = f(d)$

Anzahl α in $\vartheta + d\vartheta$

$\Delta n = f(\vartheta)$





$$\Delta n = \frac{Z^2 e^2 N n A}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \, 4R^2 \left(\frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2\right)^2 \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)} \sim \sin^{-4}(\vartheta/2)$$

N: Flächendichte der Au-Atome $\left[\frac{1}{m^2}\right]$

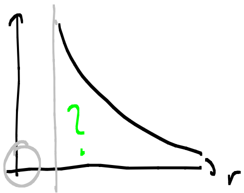
n: Zahl der α-Teilchen/Zeit $\left[\frac{1}{sec}\right]$

A: Fläche des Detektors

⇒ Z bestimmen

Zentraler Stoß

$F \sim \frac{1}{r^2}$



Zentraler Stoß → große E_{kin}^{α}

α trifft Kern

1919 α: 7,7 MeV auf Al (Z=13)

$$E_{pot} = \int_{\text{Anfang}}^{\text{Ende}} F\,ds = \int_{\infty}^{d_{min}} -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1 q_2}{s^2}\,ds$$

$$= \frac{2e\,Ze}{4\pi\varepsilon_0} - \left[-\frac{1}{s}\right]_{\infty}^{d_{min}} = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{d_{min}}$$

$E_{kin} \rightarrow E_{pot}$

$$d_{min} = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{E_{kin}} = 4,9\cdot 10^{-15}\,\text{m} = 4,9\,\text{fm}$$

- $\sim 10^{4-6}$ kleiner als typische Atomdurchmesser
- Nukleare Dichte $\sim 2,4\cdot 10^{17}$ kg/m³ -> Neutronensterne
- Neue Fragen
  - Wie hält der Kern gegen elektr. Kräfte zusammen?
  - Z ⊕-Teilchen im Kern, wo ist die restliche Masse?
  - wo sind e^- und wie bewegen sie sich?

* Bohr'sches Atommodell

Kirchhoff, Bunsen, Fraunhofer, Ångstrom (1 Å = 0,1 nm)

=> H-Atom

$$\frac{1}{\lambda_{g,i}} = R\left(\frac{1}{n_g^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad n_g, n_i \in \mathbb{N}$$

R: Rydbergkonstante $1,9073732\cdot 10^7 \frac{1}{m}$

1888 $\approx \frac{11}{\mu m}$

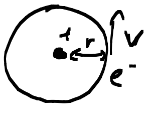
n_g = const.	n_i = frei	-> Spektrallinienserien	Seriengrenze SG ↓
$n_g = 1$	= Lyman-Serie	$n_i = 2..\infty$	~ 91,1 nm
$n_g = 2$	= Balmer-Serie	$n_i = 3..\infty$	~ 364,5 nm
$n_g = 3$	= Paschen-Serie	$n_i = 4..\infty$	~ 820,0 nm
$n_g = 4$	= Brackett-Serie	$n_i = 5..\infty$	~ 1458 µm
$n_g = 5$	= Pfund-Serie	$n_i = 6..\infty$	~ 2,278 µm

$$\frac{1}{\lambda_{g,SG}} = R\frac{1}{n_g^2}$$

Bohr: · e^- außerhalb des Kerns

· e^- bewegt sich auf Kreisbahnen (Coulombkraft)

Planetenmodell



$$F_z = \frac{mv^2}{r}$$

$$F_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m r}}$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2$$

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\boxed{E = E_{kin} + E_{pot} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}}$$

↑ Bindungsenergie

entspricht $n_f = 1$ $n_i = \infty$

$\lambda_{SG} = 91{,}1\,nm$

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 2{,}18 \cdot 10^{-18}\,J = 13{,}6\,eV$$

$$\Rightarrow r_0 = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 E_{tot}} = 5{,}28 \cdot 10^{-11}\,m = 53\,pm$$ Bohrscher Radius r_0

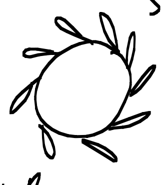
$$v = 2{,}2 \cdot 10^6\,m/sec$$

Mechanik! Elektrostatik!

Problem: Elektrodynamik (Maxwell)

beschl. Ladungen strahlen EM-Wellen ab

$\Rightarrow$ Energieverlust



Synchrotonstrahlung

Lienard-Wichart-Potentiale

$\tau = 13\,psec$ $\Rightarrow$ klassisches Atom nicht stabil !

- e^- Coulombkraft, Kreisbahnen
- bestimmte Bahnen sind stabil (keine Abstrahlung) $E = konst$
- EM-Strahlung wenn e^- zwischen stabilen Bahnen wechselt

$$E_i - E_f = h\nu$$

Bohrsche Postulate

- Größe der Bahn wird durch Quantisierung des Bahndrehimpulses bestimmt

$$\underline{m_e v r = n \hbar} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

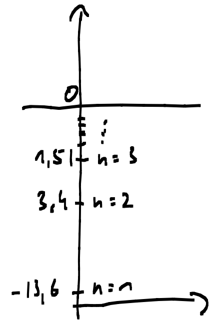
$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m_e r}}$$

$$\left(\frac{n\hbar}{m_e r}\right)^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e r} \rightarrow r = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_e e^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$= 5{,}28 \cdot 10^{-11}\,m\, n^2 \qquad r(n=1) = r_0$$ Bohrsche Radius

$$\boxed{r = r_0 n^2}$$

$$E^H_{total} = -\underbrace{\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0}}_{13{,}6\,eV} \frac{1}{n^2} = -\frac{13{,}6\,eV}{n^2}$$



$$h\nu = E_i - E_f = -\frac{13{,}6\,eV}{n_i^2} - \frac{13{,}6\,eV}{n_f^2} = 13{,}6\,eV\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

$$\left(13{,}6\,eV = \frac{e^4 m_e}{8\varepsilon_0 h^2}\right.$$

$$\frac{1}{\lambda} = \underbrace{\frac{e^4 m_e}{8\varepsilon_0 h^3 c}}_{\text{Rydbergkonstante}} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Triumpf für Bohr !

Gilt ebenso für 1-Elektronensysteme: He^+ ...

Beispiel: Radioübergänge

$$\frac{1}{\lambda} = R\cdot\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right) \qquad n = 109$$

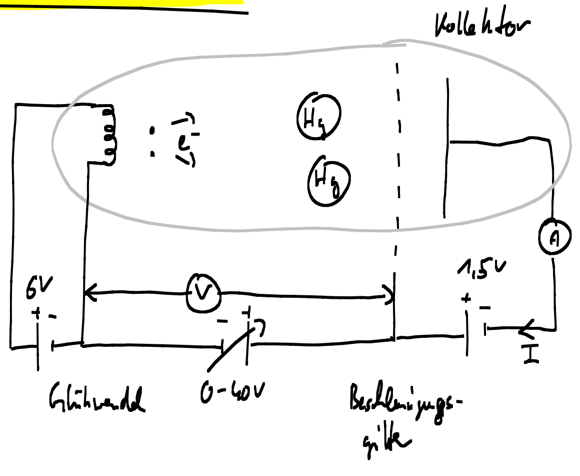
$$H109\alpha \rightarrow \lambda \sim 6\,cm$$

Fragen:
- Quantisierung ad hoc
- Strahlungsfreiheit best. Bahnen?

Aber:
- Erfolg!

Erklärung für Absorptions- und Emissionsspektren

→ **Franck-Hertz-Versuch**



4. Wellennatur der Materie

4.1. de Broglie Wellenlänge

- Photonen
  - Welleneigenschaften
  - Teilcheneigenschaften
- Materie
  - Teilcheneigenschaften
  - Welleneigenschaften ?!

Photon $mc^2 = h\nu$

$$mc = p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \qquad (1924)$$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Makie $p = mv = \gamma m_0 v$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\gamma m_0 v} \sim \frac{1}{m_0} \sim \frac{1}{\underset{m_0 \gamma}{\overset{\shortparallel}{m}}}$$

<u>Bsp.:</u> a) dB-Wellenlänge λ eines Tennisballs:

$$\lambda_{TB}^{dB} = \frac{h}{m_{TB} v} = \frac{6{,}63 \cdot 10^{-34}\,Js}{0{,}046\,kg \cdot 30\,m/sec} = 4{,}8 \cdot 10^{-34}\,m$$

$$v = 30\,m/sec \ll c \Rightarrow m = m_0 = 46\,g$$

$$\lambda_{TB}^{dB} \ll \varnothing_{TB}$$

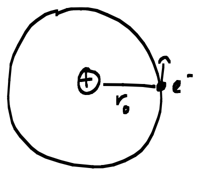
b) dB-λ eines e^-

$$\lambda_{e^-}^{dB} = \frac{h}{m_e \cdot v_e} = 3{,}3 \cdot 10^{-10}\,m \qquad r_0 \sim 5{,}3 \cdot 10^{-11}\,m$$

$v_e = 2{,}2 \cdot 10^{6}\,m/sec$ (Bohrradius)

$m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}\,kg$

$\Rightarrow \lambda_{e^-}^{dB} \sim r_0$ Einfluss des Wellencharakters



$r_0 = 5{,}28 \cdot 10^{-11}\,m$

$U = 2\pi r_0 = 3{,}3 \cdot 10^{-10}\,m$

$\lambda_{e^-}^{dB}(r_0) = U(r_0)$ <u>1. Bohr'sche Bahn</u>

- Materiewellen essentiell für atomare Vorgänge
- Welleneigenschaften dominieren Verhalten auf atomaren Skalen
- H-Atom

deBroglie λ in der n-ten Bahn

$$\lambda_e^{dB}(n\text{-te Bahn}) \cdot 2\pi r_0 n$$

$$\lambda_e^{dB}(n\text{-te Bahn}) = \frac{h}{m_e v_e^n} = \frac{h}{m_e} \frac{m_e r_n}{n\hbar} = \frac{2\pi r_n}{n}$$

$$m_e v_e^n r = n\hbar$$

$$\lambda_e^{dB}(n\text{-te Bahn}) = \frac{2\pi r_n}{n} \qquad r_n = r_0 n$$

$$= 2\pi r_0 n = n \lambda_e^{dB}(1)$$

4.2 Teilchenbeugung

Davisson-Germer (1927 USA), Thompson (1922 GB)

- elastische Streuung von langsamen Elektronen an polykristallinem Nickel

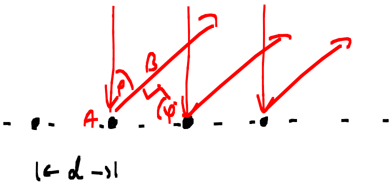
$E_e = 54\,eV$

$\vartheta_{max} = 50°$

$\lambda_e^{dB} = \frac{h}{m_e v_e}$, $E_e = eU = \frac{1}{2} m_e v^2 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$

$= \frac{h}{\sqrt{2eU m_e}} = \ldots 0{,}167\,nm$

$= 1{,}67 \cdot 10^{-10}\,m$



$AB : d \sin\varphi = n\lambda$

Nickelatome als Gitter

$$d \sin \vartheta = n\lambda$$

$\uparrow$

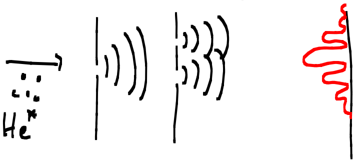
2,15 Å (aus Röntgenbeugung)

$\underline{n\lambda} = 2{,}15 \cdot 10^{-10}\,m \cdot \sin 50° = 1{,}65$ Å

$\sin 51° = 1{,}67$ Å

Atomstrahlinterferenz

He-Strahl gleicher Richtung und Geschwindigkeit



Abstand der Interferenzlinien
-> dB-Wellenlänge der He-Atome

4.3. Welle-Teilchen-Dualismus

- Wellennatur atomarer Teilchen

  Klassische Physik ↯

- Teilchen sind lokalisiert

  können nur 1 Öffnung (im Doppelspaltexperiment) passieren

- Warum Interferenzen?

  keine Funktion der Intensität

=> Unsere klassische Anschauung vom Wesen der Materie und Strahlung (EM) ist falsch.

=> Materie ist nicht nur lokalisiert und Strahlung nicht nur ausgebreitet.

- Der Ort des Teilchens ist der Ort der Wirkung einer phys. Entität, das wir Quant nennen.

=> Bestimmung des Ortes eines Quants ist nur über seine Wirkung

-> ohne Wirkung kein Ort!

- Ein Quant ändert sein "Wesen"/"Zustand" mit jeder Wirkung

=> keine Bahn

Quant: Physikalisches Konstrukt, das in Raum-Zeit-Gefüge Wirkung entfaltet.
Die Zustandsänderung führt zu eine diskreten physikalischen Messgröße.

=> Wellen transportieren Wahrscheinlichkeiten für das Aufdecken von Wirkungen.
Impuls und Energie der Quanten manifestieren sich in $\nu, \lambda, \ldots$ der Wellen.

$$E = h\nu \qquad p = \hbar k$$

-> Quanten und Wellen nicht direkt zugänglich

QM: Lehre vom Verhalten der Quanten

4.4 Wellenfunktionen

$y(t) = A\cos(2\pi\nu t + \varphi)$ zeitlich

$y(x) = A\cos(2\pi x/\lambda + \varphi')$ räumlich

$y(x,t)\ A\cos(\underbrace{2\pi\nu t - 2\pi \frac{x}{\lambda}}_{=0} + \varphi'')$

$2\pi\nu = \omega$

$\frac{2\pi}{\lambda} = k$

Phasengeschwindigkeit $\nu t = \frac{x}{\lambda} \Rightarrow \nu\lambda = \frac{x}{t} = v_0$

$$v_0 = v_p = \frac{\omega}{k}$$

$\Psi(\vec{r},t) = A\cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ oder $\Psi(\vec{r},t)\ A\, e^{+i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$

Ψ: Wahrscheinlichkeitswelle

mit $\Psi(\vec{r},t)$ als Wahrscheinlichkeitswelle ist $\Psi^*\Psi$ die Wahrscheinlichkeit die Wirkung des Quants bei $\vec{r},t$ zu messen $\quad (e^{i\varphi})^* = e^{-i\varphi}$

de Broglie: $v = v_0 \quad m = m_0 \quad \lambda_{dB} = \frac{h}{m_0 v_0}$

$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} \quad p_0 = \hbar k_0$

$$\Psi(x,t) = A\, e^{i(\omega t - k_0 x)}$$

$$\Psi^*\Psi = A\, e^{-i(\omega t - k_0 x)}\, e^{i(\omega t - k_0 x)} = A^2 = \text{const}$$

=> wir brauchen Wellenpaket:

$|\Psi|^2 \neq 0$ am Messort

$|\Psi^2| = 0$ sonst

4.5 Wellenpaket

$$Y(x,t) = y_1(x,t) + y_2(x,t)$$

$$= A_0 [\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t) = 2 A_0 \cos(kx - \omega t)\cos(\Delta k x - \Delta\omega t)$$

- $k = \frac{1}{2}(k_1+k_2)$ $\Delta k = \frac{1}{2}(k_1-k_2)$

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{i(\omega t - kx)}\, dk$$

Gruppengeschwindigkeit $v_G = \frac{d\omega}{dk}$ $v_p = \frac{\omega}{k}$

$$v_p = \frac{\omega}{k} \Rightarrow v_G = v_p + k\frac{dv_p}{dk}$$

1) v_p unabh. von λ : $v_G = v_p$

2) v_p abh. von λ : $v_G \neq v_p$

z.B. Licht im Vakuum

$$\frac{\omega}{k} = v_p = c \qquad v_G = c + k\frac{dc}{dk} = c \Rightarrow v_p = v_G$$

$$v_p^{dB} = \nu\lambda = \frac{\omega}{k} = \frac{mc^2}{h}\frac{h}{mv} = \frac{c^2}{v} > c$$

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi mc^2}{h} = \frac{2\pi\gamma m_0c^2}{h} = \frac{\gamma m_0 c^2}{\hbar}$$

$$k = 2\pi/\lambda = \ldots = \frac{\gamma m_0 v}{\hbar}$$

1) $v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v}$

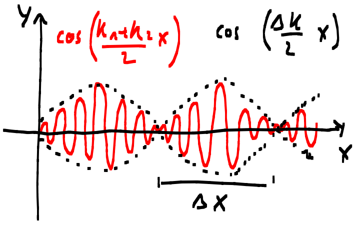
2) $v_G = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega/dv}{dk/dv} = \ldots v$

$v_G = v < c$ Gruppengeschwindigkeit der dB-Wellen ist Teilchengeschw.

$\Rightarrow$ de Broglie-Wellen verhalten sich wie Wellenpakete mit Gruppengeschw. $v_G = v$.

$\Rightarrow$ de Broglie Welle wird als Wahrscheinlichkeitswelle interpretiert.

4.6 Heisenbergsche Unschärferelation



$$\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta k}{2}\Delta x = \pi$$

$$\Rightarrow \Delta p\,\Delta x = h$$

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{ikx}\, dk$$

$A(k)$: Spektrum der vorkommenden Wellenzahlen

$$A(k) : \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

Fouriertransformation

Spezialfall : Gauss

$$\Psi(x,0) = A\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}}\, e^{-ik_0x}$$

$$\Psi^*\Psi = A^2\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}}$$

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} B(k)\, e^{-ikx}\, dk$$

$$B(k) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\sigma_x^2 (k-k_0)^2}$$

$$B(p) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma_x)^2}}$$

$\Psi(x)$ gaussisch, Breite σ_x => FT auch gaussisch Breite $\sim \frac{1}{\sigma_x}$

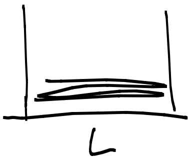
$$\boxed{4\sigma_p^2 = \frac{\hbar^2}{\sigma_x^2}} \Rightarrow \boxed{\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

5. 1-dim QM

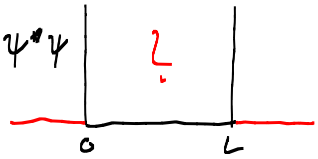
5.1. Teilchen im Kasten

- eingeschränkte Bewegungsfreiheit



- Randbedingungen!

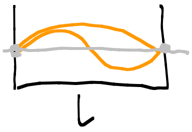
Wahrscheinlichkeitswelle WW



- verschwindet am Rand
  $x=0$, $x=L$ z.B.

  $\Psi(\text{Rand}) = 0$
  -> Knoten

- nur diskrete Ψ haben Knoten bei $x=0$ und $x=L$



=> $\lambda_n = \frac{2L}{n}$ $n \in \mathbb{N}$

=> Einschränkung der Impulse ($p = \hbar k$)

-> Energien $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar}{2m\lambda^2}$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

! • Quant kann nicht bel. Energien haben

- Atom eine Art Kasten
- Wegen $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ => $\Delta p \neq 0$ -> $E \neq 0$
- Da h klein, Quantisierung nur für kleine n, L wichtig
- Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ im Kasten $\int_{\text{Kasten}} \Psi^*\Psi = 1$ -> $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi = 1$

- e^- im Potentialkasten des Kerns, Aufenthaltswahrscheinlichkeiten
  - → Orbitalen
  - im Kern
  - Wechselwirkungen mit dem Kern

5.2. Erwartungswert

Wie muss Information aus $\Psi(x,y,z,t)$ gezogen werden?

$\Psi \rightarrow |\Psi|^2$ einzelnes Teilchen

Klassisch $\quad x_1, x_2, \ldots, x_n \quad$ Orte

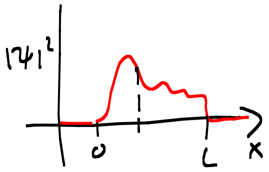
$N_1, N_2, \ldots, N_n \quad$ Häufigkeit des Auftretens

Frage: Mittlerer Ort des Teilchens? $\quad \sum_{i=1}^{n} N_i \quad$ Experimente

$$\bar{x} = \frac{N_1 x_1 + N_2 x_2 + \ldots N_n x_n}{N_1 + N_2 + \ldots N_n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i N_i}{\sum_{i=1}^{n} N_i}$$

QM $\quad$ Ersetze N_i durch $|\Psi_i|^2 dx$

Wahrsch. das Quant im Intervall dx bei x_i zu finden



$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Messgröße}}}{\langle x \rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1} = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx$$

$$\boxed{\langle G(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* G(x) \Psi \, dx}$$

Bsp.: Impuls

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p \, |\Psi|^2 dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p \cdot |c(p)|^2 dx$$

$$\Psi = A e^{i(kx - \omega \cancel{t})} \Big| p = \hbar k$$

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \frac{1}{\hbar} e^{i \frac{p}{\hbar} x} dp$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Operator}}}{\left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]} \Psi \, dx$$

Impulsoperator	$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$
Energieoperator	$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2}$

// $E = \frac{p^2}{2m}$

Im 3-dim. Fall: $x \rightarrow \vec{r}$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\vec{r}) \underbrace{\frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\vec{r}}}_{\text{3 dim Impulsoperator}} \Psi(\vec{r}) \, d\vec{r}$$

Energieoperator $\frac{\hbar^2}{i^2 2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \hat{=} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \underline{\Delta}$ $\quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta}$

$$\langle E_{kin} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right) \psi \, d\vec{r}$$

$$\langle E_{pot} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \, U(r) \, \psi \, d\vec{r}$$

$$\langle E_{ges} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r)\right)}_{\text{Gesamtenergie}} \psi \, d\vec{r}$$

5.3. Schrödingergleichung

Raumzeitliche Entwicklung der Wellenfunktionen

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

- $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x} + U(x)\right) \psi$
- Differentialgleichung -> E_n sind Eigenwerte
- $\exists ?\ \psi, \phi$ mit $\psi_{(x,t)} = \psi(x) \cdot \phi(t)$ -> häufig ja! // Separation

-> oben einsetzen

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + U(x) = i\hbar \frac{\dot{\phi}(t)}{\phi(t)} \qquad \forall\, x,t$$

$\Rightarrow$ const. = const. $\quad$ Erhaltungsgröße in Raum & Zeit

$= E$

rechts : $i\hbar \dot{\phi}(t) = E \phi(t) \Rightarrow \phi(t) = e^{-i\omega t}$ $\quad \Big| \ \frac{d\phi}{dt} = -i\omega \phi(t)$, $\ \omega = \frac{E}{\hbar}$

zeitliche Entwicklung der Wahrsch. welle

links: $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x)}$

- zeitunabhängige / stationäre Schrödingergleichung
- $U(x)$ potentielle Energiefunktion der Kraft F

$$F = -\frac{dU}{dx}$$

- Schr. Gl. beschreibt Quanten unter Einfluss von Kräften
- <u>Bsp.</u>: freies Teilchen, $U(x) = 0$

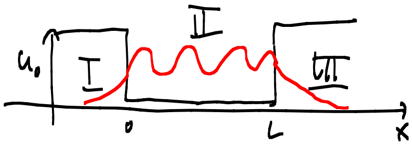
$\Rightarrow \psi'' = -\frac{E\,2m}{\hbar^2} \psi \quad \Rightarrow \psi = e^{ikx}$ $\quad \Big| \ \psi'' = -k^2 \psi$, $\ E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ...

$\Rightarrow$ Freies Teilchen
$\psi = e^{i(kx-\omega t)}$

$\Rightarrow$ konkrete Lösungen nur mit $U(x) \neq 0$, $\frac{\partial k}{\partial x} \neq 0$

5.4. Kasten endlicher Höhe

I $\Rightarrow U = U_0$
II $\Rightarrow U = 0$
III $\Rightarrow U = U_0$



- Schrödingergl. gilt für jedes Gebiet separat $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$
- Lösungen müssen stetig an den Grenzen sein

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0) \quad , \quad \psi_{II}(x=L) = \psi_{III}(x=L)$$

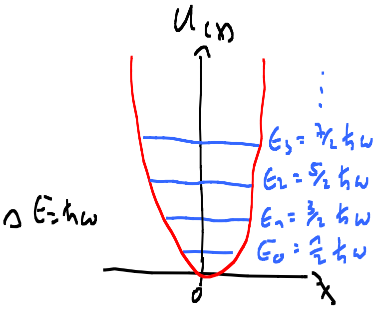
- Ebenso stetig diff'bar

$$\frac{d\psi_I}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=0} \quad , \quad \psi_{II}'(x=L) = \psi_{III}'(x=L)$$

- II Schwingungen d.h. ψ_{II} komplex
  I, III exponentielle Abfälle d.h. $\psi_{I,III}$ reell (≙ Totalreflektion Optik)

$\Rightarrow$ Quantisierung der Energie, E_n, aber bei anderen Werten

$F = -kx$
$U = \frac{k}{2} x^2$



5.5. Tunneln

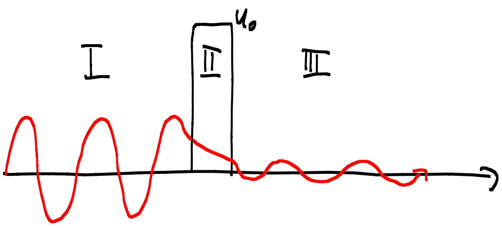
I freies Quant

$$\psi_I(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)} + B e^{i(-kx-\omega t)}$$

II $\psi_{II} = C e^{-\alpha x - i\omega t} + D e^{\alpha x - i\omega t}$

III $\psi_{III} = F e^{i(kx-\omega t)} + G e^{i(-kx-\omega t)}$

$= 0$ ausl. Welle



2 Grenzflächen $\Rightarrow$ 4 Gleichungen für 5 Unbekannte

A frei wählen $\Rightarrow$ B, C, D, F

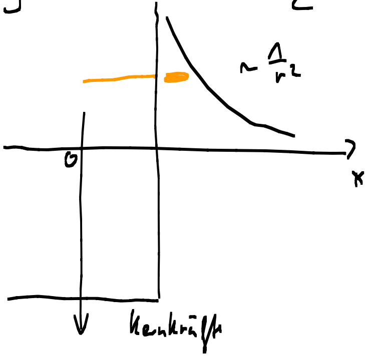
R: Reflexionskoeff. $R = \frac{B^* \cdot B}{A^* \cdot A}$

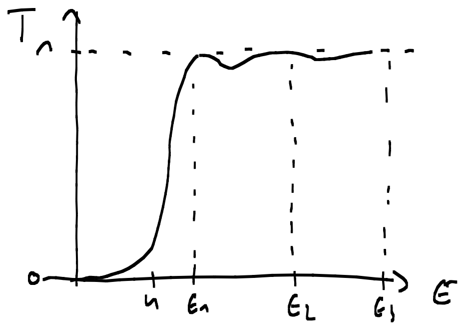
T: Transmissionskoeff. $T = \frac{F^* F^*}{A^* \cdot A}$

$$T(E,U,d) = \left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{U_0^2}{E(U_0-E)}\right)\sinh(\alpha d)\right]^{-1}$$

$\sinh = \frac{e^{x}-e^{-x}}{2}$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$





6. 3-dim QM

6.1. Teilchen im Kasten

$x \to \vec{r}$ in Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

allgemein

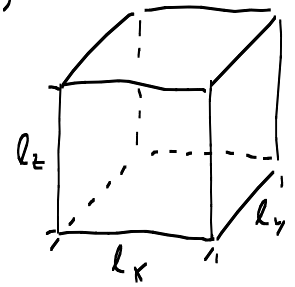
$\phi(t) = e^{-i\omega t}$ abtrennen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$ stationäre Schr.-Gl.

Versuch der Separation (z.B. Quant im Kasten)

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(x,y,z) = \Psi(x)\cdot\Psi(y)\cdot\Psi(z)$$

→ 3 unabhängige Gleichungen



$\Rightarrow \lambda_x = \frac{2L_x}{n_x} \Rightarrow |P_x| = \hbar k_x = n_x\frac{\pi\hbar}{L_x}$

$\lambda_y \qquad |P_y| = n_y\frac{\pi\hbar}{L_y}$

$\lambda_z \qquad |P_z| = n_z\frac{\pi\hbar}{L_z}$

$n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$$

oBdA $L_x = L_y = L_z = L$

$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$

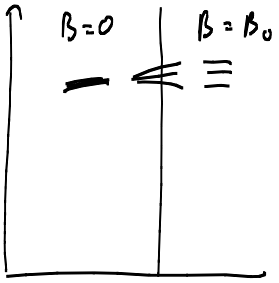
- 3 Quantenzahlen
- $E_{111} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = E_0$ 1

$E_{211} = E_{121} = E_{112} = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 2E_0$ 3

$E_{221} = E_{212} = E_{122} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 3E_0$ 3

$\boxed{\text{Entartung}}$: n- unabhängige Zustände haben identische Energie

↘ Degeneracy



6.2 Drehimpuls

e^- - Kern - Zentralkraft.

- Beschreibung in kartesischen Koordinaten ungünstig

  → sphärische Koordinaten

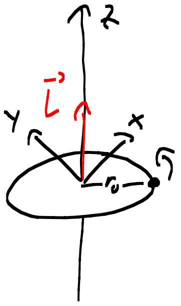
  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r,\vartheta,\varphi)$

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\ell^2$$ dabei ist

  $$\ell^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

- Konservative Zentralfelder:

  Drehimpulserhaltung



$|\vec{L}| = L_z \Rightarrow L_x = L_y = 0$

$\hookrightarrow p_z = 0$

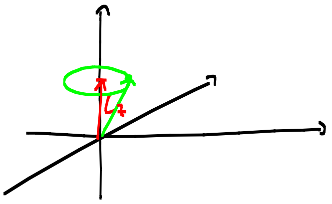
$\hookrightarrow x_z = \text{const.} = z_0$ $\Big\}$ ↯ Heisenberg

$\Delta x\,\Delta p \geq \hbar/2$

$\Delta x_z\,\Delta p_z \geq \hbar/2$

$|\vec{L}|$ = bestimmbar + 1 Richtung (von 2)

wähle o.E.d.A. z-Komponente von L: L_z



- Ansatz: Trennung der Variablen

  $\Psi(\vec{r}) = \Psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\cdot\Theta(\vartheta)\cdot\phi(\varphi)$

- Häufig ja, z.B. H-Atom

  → $\phi(\varphi) = e^{i m_\ell \varphi}$ $\quad m_\ell \in \mathbb{N}$

  → $\Theta(\vartheta)$ = Legendre-Polynome

  ⇒ $\Theta(\vartheta)\cdot\phi(\varphi) \Rightarrow Y_\ell^{m_\ell}(\vartheta,\varphi)$ assoziierte Legendre-Polynome

  ℓ, m_ℓ

$$\boxed{\begin{array}{ll} |\vec{L}| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar & \ell = 0, 1, 2, \dots \\ L_z = m_\ell \hbar & m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \end{array}}$$

- Ergebnis einer mathematischen Rechnung
- ℓ, m_ℓ Drehimpulsquantenzahlen
- Energiequantenzahlen ergeben sich mit $U(r)$ aus $R(r)$

- Einsetzen $\Psi = R(r)\, Y_\ell^{m_\ell}$ in Schrödinger-Gl.

$$-\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right] + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} R(r) + \underset{\substack{\uparrow \\ U(r) \text{ Kennen}}}{U(r)} R(r) = E\, R(r)$$

- Bohrmodell

$$|L| = m \cdot v \cdot r = n\hbar$$

QM

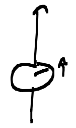
$$|L| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$$

↯ da $\sqrt{\ell(\ell-1)} \notin \mathbb{N}$ außer 0

aber $L_z = m_\ell \hbar$ ↲

Bohr'sche Quantisierung gilt für z-Komponente von L

- Anschauung ℓ, m_ℓ als umlaufendes Teilchen ↯ mit QM



- ℓ: Drehimpulsquantenzahl

m_ℓ: magnetische Quantenzahl

6.3. Wasserstoffatom

- einfach
  - He^+, Li^{++}
  - Prototyp
- zentralsymmetrisches Potential

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{(+Ze)(-e)}{r} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$$

$$\Psi(r,\vartheta,\varphi,t) = R(r)\, Y_\ell^{m_\ell}(\vartheta,\varphi)\, e^{-i\omega t}$$

$$\underbrace{\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{dR}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right)}_{E_{kin} \text{ der Bahn als } f(r)} + \underbrace{\frac{\ell(\ell-1)\hbar^2}{2mr^2}}_{\substack{\text{mit } L \text{ verbundene} \\ \text{Beitrag zu } E_{kin}}}}_{E_{kin}} R(r) + \underset{\substack{\uparrow \\ E_{pot}}}{U(r)} R(r) = E\, R(r)$$

↖ klassisch Kreisbahn

$$E_{kin} = \frac{1}{2} mv^2, \quad L = mvr \Rightarrow E = \frac{|L|^2}{2mr^2}$$

- Lösungen für Θ, ϕ wie vorher:

  " " R erfordern $E_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\underset{\uparrow}{2a_0}}\frac{Z^2}{n^2}$ $n \in \mathbb{N}$

  $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e} 4\pi\varepsilon_0$

→
- Lösungen E_n wie bei Bohr
- $l < n$ für die Lösungen
- $R(r)$ berechenbar , $R_{n,l}(r)$

– Historisch: n : Schale

l : Unterschale

n	Symbol	l	Symbol
1	K	0	s
2	L	1	p
3	M	2	d
4	N	3	f
5	O	4	g
6	P	5	h
–	–	–	–

$\underset{n\nearrow}{1}\,\underset{\nwarrow l}{s}$

– Räumliche Struktur der Wellenfunktion

$R(r) \cdot Y_l^{m_l}$

$|R(r)|^2 \cdot |Y_l^{m_l}|^2$

- s-Zustände sind radialsymmetrisch

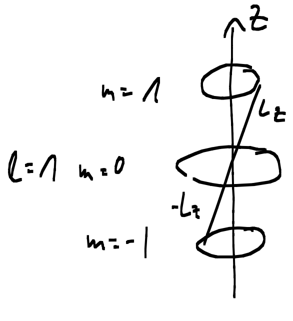
  $l \neq 0$ sind achsensymmetrisch (z-Achse)
- Aufenthaltswahrscheinlichkeiten !

7. Struktur der Materie

7.1 Magnetisches Moment

Sei $L \neq 0$

$|L| = \sqrt{3}\hbar$



$L_z = (0, \pm 1)\hbar$

Klassisch

- Ladung auf Kreisbahn

$\vec{\mu} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Windungen}}}{N}\ \underset{\substack{\nwarrow \\ \text{Strom}}}{I} \cdot \vec{A}$ ← Fläche

- Hier

$$\vec{\mu}_e = \underset{\uparrow}{I}\ \vec{A}\ \nwarrow$$ Bahnradius

$\frac{q_e}{T}$ ← Umlaufzeit

$$\vec{\mu}_e = q_e \frac{\vec{A}}{T} = \underbrace{\frac{q_e}{2m_e}}_{\text{gyromagnetisches Verhältnis}} \vec{L}$$

$$L = mrv = mr^2\omega = m\frac{2\pi}{T}r^2 = \frac{2mA}{T}$$

$$q_e = -e \quad \Rsh\ \vec{\mu}_e \uparrow\downarrow \vec{L} \Rightarrow \vec{\mu}_e = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

Übergang zur QM

- $\vec{\mu}_e = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \cdot g_e$
  - Korrekturfaktor, falls QM anders als klassisch
  - g-Faktor → klassisch $g_e = 1$
- $\vec{L}$ quantisiert → ebenso μ_e
- $\vec{L}$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$ Bohr'sches Magneton

$$\boxed{\mu_e = -\mu_B\, g_e \frac{\vec{L}}{\hbar}}$$

- $\vec{\mu}_e$ verhält sich qm wie $\vec{L}$
- $L_z \to \mu_z \qquad \mu_z = -\frac{e}{2m_e}L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e}m_\ell = -\mu_B\, m_\ell$

  m_ℓ magnetische Quantenzahl

$\vec{\mu}$ im externen Magnetfeld?

- klassisch: Drehmoment $\vec{\tau}$ auf Kreisel → Präzession

$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt} \qquad |\vec{L}| = \text{const} \quad \text{, Richtungsänderung}$$

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \times \vec{B}$$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \dot{\vec{L}} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \times \vec{B}$$

$$\boxed{\omega_L = \frac{e}{2m_e}B}$$ Larmorfrequenz

Potentielle Energie

$$E_{pot}^{mag} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \qquad \vec{\mu} \perp \vec{B} \to E_{pot} = 0$$

$$\vec{\mu} \parallel \vec{B} \to E_{pot} \text{ minimal}$$

$\vec{\tau}$ versucht $\vec{\mu} \parallel \vec{B}$ zu machen

QM: Sei $\vec{B} \parallel z$-Achse

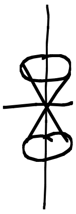
Richtung von $\vec{\mu}$ quantisiert $\Big\}$ E_{pot}^{mag} quantisiert

$$E_{pot}^{mag} = (-)(-)\frac{e}{2m_e}\,\vec{L}\cdot\vec{B} \underset{\vec{L}_z \parallel \vec{B}}{\overset{\uparrow}{=}} \frac{eB}{2m_e} L_z = \omega_L \hbar m_\ell$$

- virtuelle Unschärfe

  Präzession

  zeigen das gleiche Bild



7.2 Zeeman Effekt

H-Atom im Magnetfeld

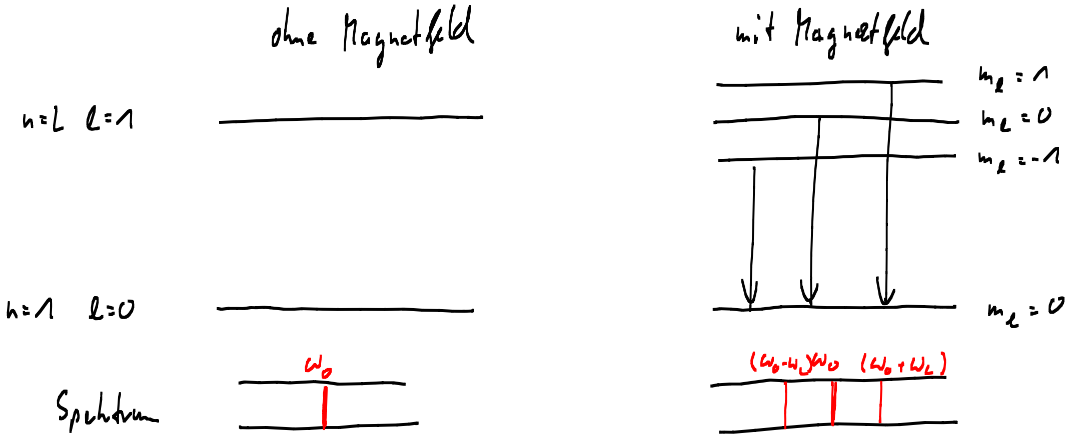
$\ell = 1 \quad m_\ell = 0, \pm 1$

Sei $|\vec{B}| = 1\,T$ $\quad\Big|\quad$ $\hbar\omega_L = \frac{e\overset{\swarrow 1T}{B}}{2m_e} = 5{,}8\cdot10^{-5}\,eV$

$E_{pot}^{mag} = \omega_L \hbar m_\ell$

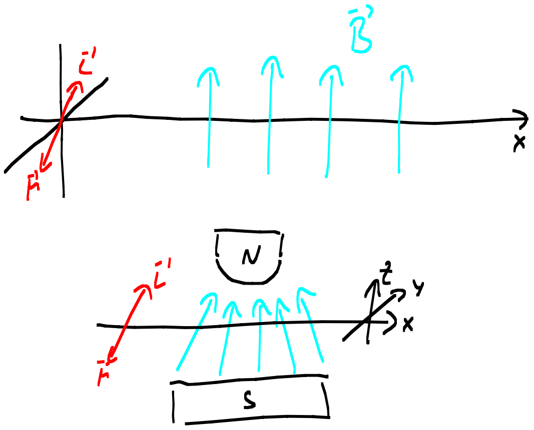
$$E = E_{n=2,\ell=1} + \underbrace{m_\ell \cdot 5{,}8\cdot10^{-5}\,eV}_{E_{pot}^{mag}}$$

Aufspaltung der Spektrallinien $\quad E_{pot}^{mag} \sim B$



normaler Zeeman-Effekt

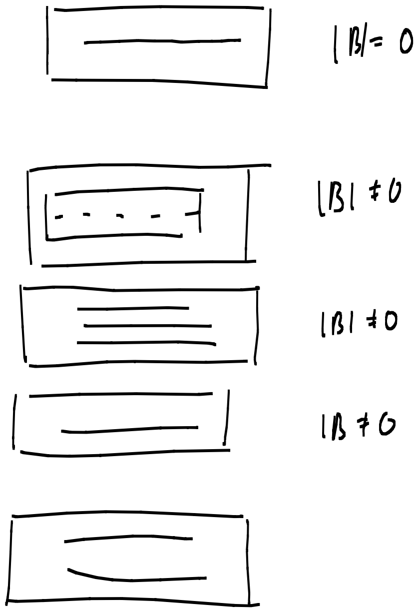
7.3. Elektronenspin



$$\frac{E_{pot}^{mag} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}}{-\frac{dU}{dx} \quad F \qquad U \text{ Potential}}$$

$F = -\underline{\nabla} U = -\underline{\nabla} E_{pot}^{mag}$

B veränderlich in z-Richtung



$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial x} = 0 = \frac{\partial \vec{B}}{\partial y} \qquad \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} \neq 0$$

$$F_z = \vec{\mu} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} = \vec{\mu}_z \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial z}$$

Klassisch

QM Erwartung für H, $n=2, l=1$

Erwartung für H, $n=1, l=0$

Stern-Gerlach-Versuch ↑

Ergebnis unerwartet

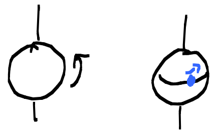
↳ ∃ weiteres magnetisches Moment

Goudsmit + Uhlenbeck 1925 Leiden

→ e^- hat magnetisches Moment

Klassisch : rotierende geladene Kugel

Nettoladung entlang des Äquators



$$\vec{\mu}_s = \frac{e}{2m_e} \vec{L}_s \quad , L_s = \frac{2}{5} m r^2 \omega$$

QM: heuristisch

$$L_s \rightarrow \vec{S} \qquad |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar \quad , \quad S_z = m_s \hbar$$

$s = 1$, $m_s = -1, 0, +1$ → 3 Komponenten

aber nur 2 Komponenten gesehen

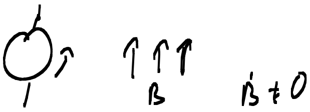
∃ $2s+1$ Komponenten $\quad 2s+1 = 2 \Rightarrow s = 1/2$

Für $s = 1/2$ $\quad |\vec{S}| = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}} = \frac{1}{2}\sqrt{3}\,\hbar \qquad m_s = \pm 1/2$

Spin , Spinquantenzahl $s = 1/2$

$$|\vec{S}| = \frac{1}{2}\sqrt{3}\,\hbar \quad = \text{const.}$$

Klassisch: rotierende Kugel

- 

Faraday-Henry Gesetz $- \frac{d\phi_B}{dt}$ = Elektromagnetische Kraft

→ Bremsung ↯ e: keine geladenen Kugeln

- $\phi_e < 10^{-6}$ Å ⇒ $V_{\text{Oberfläche}} > c$ ↯ e: kein rotierender Ball

$\mu_l = -\mu_B g_l \frac{\vec{L}}{\hbar}$ $\vec{\mu}_{lz} = -\mu_B g_l m_l$	$\lvert\mu_l\rvert = \mu_B g_l \sqrt{l(l+1)}$ $\quad g_l = 1$
$\mu_s = -\mu_B g_s \frac{\vec{S}}{\hbar}$ $\mu_{sz} = -\mu_B g_s m_s$ $= -\frac{1}{2}\mu_B g_s$	$\lvert\mu_s\rvert = \mu_B g_s \frac{1}{2}\sqrt{3}$

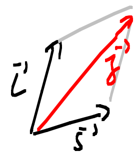
Aus Stern-Gerlach-Versuch : $g_s \approx 2$

$|\mu_s| = 2\times$ so hoch wie klassisch erwartet

$$g_s = \overset{\uparrow}{2},00\underbrace{2319} \longrightarrow \text{Quantenelektrodynamik} \quad \text{Feynman}$$

Dirac 1929

- $\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e}(\vec{L} + g_s \cdot \vec{S})$



$\vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$

- m_s ist die 4. Quantenzahl

n, l, m_l, m_s

7.4. Spin-Bahn-Kopplung

WW zwischen magnetischen Momenten von Spin und Bahn

Ursache: Kippmoment μ_l erzeugt Kippmoment für μ_s

$\rightarrow E_{pot} = f(\measuredangle(\mu_s, \mu_l))$

$\rightarrow$ verschiedene Energieniveaus, je nach Orientierung

$\rightarrow$ Feinstruktur : Verdopplung

- Ohne äußere Drehmomente $\vec{j} = \vec{L} + \vec{S}$ erhalten
  j_z ''

$|\vec{j}| = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar \quad , \; j = l+s, \; l+s-1, \dots, |l-s|$

$j_z = m_j \hbar \qquad m_j = 0, \pm 1, \pm 2 \dots, \pm j$

Quantenzahlen : $n, l, m_l, m_s \rightarrow n, l, j, j_z$

- <u>Notation</u>

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$
$\;\;\;\;\; s \; p \; d \; f \; g \; h$

$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$
$\;\;\;\;\; K \; L \; M \; N \; O \; P$

Konfiguration

$\overset{n}{\downarrow}1s_{\underset{l}{\uparrow}} \quad 2p \quad 3p \; 3d \quad 1e^-$ Systeme

Mehr e^--Systeme $\quad \underset{\underset{n}{\uparrow}}{1}\;\overset{\overset{s(s+1)}{\downarrow}}{2}\underset{\underset{l}{\uparrow}}{S}_{\underset{\underset{j}{\uparrow}}{1/2}} \quad$ z.B.: $2\,{}^2P_{3/2}$

Auswahlregeln

Wahrscheinlichkeiten für Übergange sind unterschiedlich:

abhängig von Ψ_n , Ψ_m

allgemein: $A = \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi_n \Psi_m^* dx$

$A \neq 0$ erlaubter Übergang
$A = 0$ verbotener "

Erlaubte Übergänge: $\int_{-\infty}^{\infty} u \Psi_{n,l,m_l} \Psi^*_{n',l',m_l'} du$

n, l, m_l Grundzustand n', l', m_l' angeregter Zustand

u entlang x, y, z

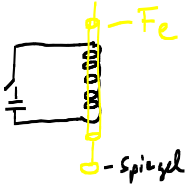
Für unterschiedliche n Übergänge möglich:

Auswahlregeln: $\Delta l = \pm 1$ bedeutet: Photon trägt Drehimpuls $\pm\hbar$

$\Delta m_l = 0, \pm 1$

↓
Rechts/Links
Polarisation

Drehimpuls R/L zirkular polarisiert: Richardson-Einstein-DeHaas-Effekt



Ummagnetisierung

-> Umklappen des Spins

-> Drehimpulsänderung

Pauli-Verbot

4 Quantenzahlen beschreiben Zustand eines Elektrons: n, l, m_l, m_s

Pauli: Ein Quantenzustand kann nur von einem Elektron besetzt werden

Gemeinsame Wellenfunktion für 2 Teilchen

$\Psi = \Psi(r_1, r_2)$

e_1 bei r_1
e_2 bei r_2

$|\Psi(r_1,r_2)| = |\Psi(r_2,r_1)|$ bei ununterscheidbaren Teilchen

ODER

$\Psi(r_1,r_2) = \Psi(r_2,r_1)$ $\Psi(r_1,r_2) = -\Psi(r_2,r_1)$

Bosonen (ganzzahliger Spin) Fermionen (halbzahliger Spin)

-> Bose-Einstein-Statistik -> Fermi-Dirac-Stat.

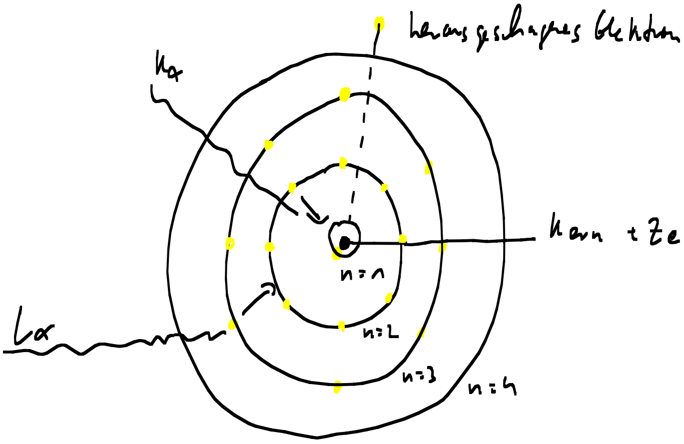
$\Psi(r_1,r_2) = -\Psi(r_2,r_1)$ Forderung an $\Psi(e_1,e_2)$ antisymmetrisch

=> Pauli-Verbot
=> Hund'sche Regel

} Periodensystem

Atom	1s	2s	2p			
Li	↑↓	↑				$1s^2 2s^1$
Be	↑↓	↑↓				$1s^2 2s^2$
B	↑↓	↑↓	↑			$1s^2 2s^2 2p^1$
C	↑↓	↑↓	↑	↑		$1s^2 2s^2 2p^2$
N	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^3$
O	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	$1s^2 2s^2 2p^4$
F	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$1s^2 2s^2 2p^5$
Ne	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	$1s^2 2s^2 2p^6$

Hund'sche Regel



$K_\alpha \hat{=}$ Röntgenstrahlung

Sprung von 1 Bahn in K-Schale

K-Schale: $\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$

Ionisation $n_i = \infty$

$n_f = 1$, K-Schale

$E = \frac{hc}{\lambda} \hat{=} \frac{hcR}{1{,}6\cdot 10^{-19}} = 13{,}6\,eV$

$\lambda = 91{,}2\,nm$

mit Kernladung Z $\frac{1}{\lambda} = R Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \Rightarrow E = 13{,}6\, Z^2$

$\nu \propto \frac{1}{\lambda} \propto Z^2$

$Z \propto \sqrt{\nu}$ → Gerade

MOSLEY's Gesetz

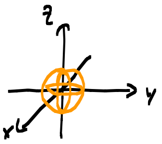
Orbitale

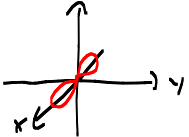
Grenzfläche 3-dim

$|\Psi|^2 = |R\ \Theta\ \Phi|^2$

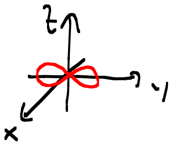
innerhalb derer die Aufenthaltsws. des e^- 90% oder 95%

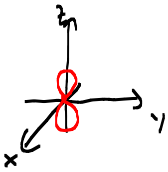
Orbital	n	l	m_l
s	1,2,3,...	0	0
p_x	2,3,4...	1	±1





P_y	2,3,4 ...	1	±1
P_z	2,3,4 ..	1	0





Annäharung -> Überlapp

Erhöhung Wahrsch. zwischen Atomen

Drehimpuls L um Bindungsachse

$L = 0$: σ

$L = \hbar$: π