# Wellen und Quantenphysik

- 1. Eigenschaften von Wellen
- 2. Interferenz und Beugung
- 3. Relativitätstheorie
- 4. Welle-Teilchen Dualismus
- 5. Atome

#### Die frühe Atomphysik

- Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms
- Atome mit vielen Elektronen
- 6. Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

# Alkali-Spektren

# Die frühe Atomphysik

- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell
- Die Spektren der Alkalimetalle
- Die Spektren der Röntgenstrahlung
- Das Frank-Hertz Experiment

#### Das optische Spektrum der Helium und Neon-Atome ist kompliziert



Kommentar 1

Als Beispiel zeigt die Abbildung das Emissionsspektrum der Helium- und Neonatome im Entladungsrohr eines He-Ne-Lasers.

Das Spektrum ist kompliziert und die Spektrallinien der Helium- und Neonatome können nicht durch einfache Formeln, die Energietermen entsprechen, beschrieben werden.

Bohrs Atommodell hilft bei diesen Spektren nicht weiter.

Bei den meisten Atomen können die optischen Spektren nicht ohne die Hilfe der Schrödinger-Gleichung ausgewertet werden.

# Kommentar 2

Eine Ausnahme bilden die optischen Spektren der Alkalimetalle.

Die optischen Spektren der Alkalimetalle ähneln dem Spektrum des Wasserstoffatoms.

Die Spektren enthalten Serien, die auf die Anregung eines Valenzelektrons zurückgeführt werden können.



Note: The subgroup numbers 1-18 were adopted in 1984 by the International Union of Pure and Applied Chemistry. The names of elements 112-118 are the Latin equivalents of those numbers.

Design Copyright & 1997 <u>Michael Davah</u> (michael Bloga), michael Bloga), ann, hap linewe dayah, com/periodio/														
57 28 La 18 Lanthan 138.9055	58 Ce Cer 140.110	59 Pr Praseodym 140.90765	60 100 100 100 100 100 100 100 100 100 1	61 1000 1000 1000 1000 1000 1000 1000 1	62 Samarium 150.36	63 200 200 200 200 200 200 200 200 200 20	64 64 100 100 100 100 100 100 100 100 100 10	65 <b>Tb</b> Terbium 158.92634	66 Dy 162 500	67 Ho Holmium 104.93032	68 58 Er 30 Erbium 22 167.259	69 16 Tm 15 Thulium 108.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20 20
89 200 200 200 200 200 200 200 200 200 20	90 18 18 18 10 232 0381 2	91 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18	92 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18 18	93 Np Neptunium (237)	94 Pu 224 244)	95 Americium (243)	96 Cm 2222 0 0 22	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf 327 Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm 1872 Fermium (257) 22	101 Md Menosientum (258) 2	102 00000000000000000000000000000000000	103 000 000 000 000 000 000 000 000 000



Die Abbildung zeigt als Beispiel die Energieniveauschemata von Lithium und Natrium.

Die Spektren enthalten zwei unterschiedliche Serien (George Liveing und James Dewar 1890), die sich durch schmale Spektrallinien auszeichnen.

Die eine Serie ist die sogenannte Hauptserie (principal series), die nur in Absorption beobachtet werden kann.

Die zweite Serie kann nur in Emission beobachtet werden und wird deshalb die Seiten-Serie (side series) genannt.

Die Hauptserie ist in der Abbildung rot eingezeichnet und die Seitenserie orange.

Kommentar 2

Wie beim Wasserstoffatom kann aus diesen Spektrallinien ein Energieniveauschema abgeleitet werden.

Da die Hauptserie in Absorption beobachtet werden kann, müssen diese Übergänge aus dem Grundzustand des Atoms erfolgen.

Diese Übergänge enden in Niveaus, die mit dem Buchstaben "p" bezeichnet werden.

Die Übergänge der Seitenserie beginnen in Niveaus, die mit dem Buchstaben "s" bezeichnet werden.

Die Energie dieser Niveaus kann ähnlich wie beim Wasserstoffatom durch die Differenz zweier Energieterme berechnet werden:  $\Delta E = E(n) - E(m)$ .

# Kommentar 3

Die Zahlen bezeichnen die Quantenzahlen, die zur Berechnung der Energieterme benötigt werden (Rydberg Schuster Gesetz 1896).

Die Energieterme E(n) sind Verallgemeinerungen der Energieterme, die beim Wasserstoffatom gefunden wurden.

Die Schrödingergleichung ergibt, dass der Grundzustand zu den s-Niveaus gehört. Der Grundzustand wird mit dem Buchstaben "s" bezeichnet.

Zusätzlich zu diesen beiden Serien wird eine Serie mit sehr breiten Spektrallinien beobachtet.

Auch diese Spektrallinien bilden eine Serie, die die "diffuse Serie" genannt wurde.

Die Übergänge können nur in Emission beobachtet werden und beginnen in Energieniveaus, die mit dem Buchstaben "d" bezeichnet werden.

Die Übergänge der diffusen Serie sind in der Abbildung grün eingezeichnet.

1907 entdeckte Arno Bergmann ein vierte Serie, die ursprünglich die Bergmann-Serie genannt wurde.

Die Übergänge dieser Serie beginnen in Niveaus, die mit dem Buchstaben "f" bezeichnet werden.

Der Buchstabe "f" wurde eingeführt, als man erkannte, dass die Bezeichnungen s, p, d, f, … die Quantenzahlen des Bahndrehimpulses der Elektronen bezeichnen.

Den Buchstaben "f" kann man, wenn man möchte, als "fourth series" interpretieren. Manchmal wird sie auch als die "fundamental series" bezeichnet.

Alkali-Spektren Röntgenspektren Frank-Hertz Experiment Die Schrödinger Gleichung Kastenpotential Bahndrehimpuls Revision Inhaltsverzeichnis

# Röntgenspektren

# Die frühe Atomphysik

- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell
- Die Spektren der Alkalimetalle
- Die Spektren der Röntgenstrahlung
- Das Frank-Hertz Experiment



(XRayTube.mp4)



Röntgenstrahlen entstehen in Kathodenstrahlröhren.

Das Video zeigt ein Beispiel für eine Röntgenröhre

Elektronen werden beschleunigt und im Material der Anode gestoppt.

Die ausgebremsten Elektronen geben ihre kinetische Energie als elektromagnetische Strahlung ab.



1895 machte Wilhelm Conrad Röntgen eine Röntgenaufnahme der Hand seiner Frau Anna Berta Röntgen.



Wilhelm Conrad Röntgen war nicht der erste, der mit Röntgenstrahlen experimentierte. Aber er war der Erste, der das große Potenzial von Röntgenstrahlen erkannte.

1901 erhielt er den ersten Nobelpreis für Physik "als Anerkennung des außerordentlichen Verdienstes, den er sich durch die Entdeckung der nach ihm benannten Strahlen erworben hat".



Die charakteristische Röntgenstrahlung wurde 1909 von Charles Glover Barkla entdeckt.

Die Abbildung zeigt das Röntgenspektrum einer Wolfram-Kathode.

Die Elektronen werden mit Spannungen von 60, 90 und 120 kV beschleunigt.

Die Abbildung zeigt das breite Spektrum der Bremsstrahlung, die durch das Abbremsen von Elektronen in der Kathode entsteht.

Die scharfen Spektrallinien der charakteristischen Strahlung ragen aus dem breiten Spektrum der Bremsstrahlung heraus.

Ähnlich wie die optischen Spektren der Alkalimetalle bilden die charakteristischen Linien der Röntgenstrahlen Serien, die jedoch im Gegensatz zu den optischen Spektren für alle Elemente identifiziert werden können.

# Als Barkla die charakteristischen Linien entdeckte, war der Grund für die charakteristischen Röntgenstrahlen unbekannt.

Daher benannte Barkla die Serien der charakteristischen Linien mit den Buchstaben K, L, M, ...

Da Barkla sich nicht ausschließen konnte, dass es Serien mit höheren Energien gibt, begann er die Bezeichnung der Serien mit dem Buchstaben "K", um Raum für zukünftige Entdeckungen zu lassen.

Die Linien einer Serie benannte er mit ansteigender Energie mit den griechischen Buchstaben  $\alpha$ ,  $\beta$  etc.

Die Abbildung zeigt nur die Linien der K-Serie. Die  $K_{\alpha}$  Linie bildet ein Dublett mit den Linien  $K_{\alpha 1}$  und  $K_{\alpha 2}$ .

# Kommentar 3

Wenn man genauer hinschaut, dann zeigt es sich, dass alle charakteristischen Linien in viele Komponenten aufgespalten sind.

Charles Glover Barkla wurde 1917 "für seine Entdeckung der charakteristischen Röntgenstrahlung der Elemente" mit dem Nobelpreis ausgezeichnet.



Die stärksten Linien der K-, Lund M-Serie für jedes dritte Element von 8 (Sauerstoff) bis 92 (Uran)

Die Abbildung gibt einen Überblick über die stärksten Spektrallinien der K-, L- und M-Serie.

Im Gegensatz zu den optischen Spektren der Elemente sind die Spektren der Röntgenstrahlung vergleichsweise einfach.

Jedes Element kann durch wenige charakteristische Röntgenlinien identifiziert werden.

1912 zeigte Max von Laue experimentell, dass Röntgenstrahlen elektromagnetische Wellen mit sehr kurzer Wellenlänge sind.



#### Walther Kossel 1913:

werden Atome ionisiert, dann entstehen die charakteristischen Röntgenlinien

Vereinfachtes Schema charakteristischer Röntgenstrahlen, das auf dem Bohrschen Atommodell basiert

Die Emission charakteristischer Röntgenstrahlung steht immer im Zusammenhang mit der Emission von Elektronen.

Aufgrund dieser experimentellen Beobachtung erkannte Walther Kossel 1913, dass die charakteristische Röntgenstrahlung auf die Ionisierung der Atome zurückzuführen ist.

Analog zu den Spektren der Alkalimetalle kann man versuchen, die charakteristische Strahlung auf die Differenz von zwei Energietermen E(n) zurückzuführen.

Die Abbildung illustriert die Idee von Kossel anhand des Bohrschen Atommodels.

Die Bohrschen Bahnen können von mehreren Elektronen durchlaufen werden.

Die K-Serie kann dann darauf zurückgeführt werden, dass ein Elektron aus der Bahn mit der Quantenzahl n = 1 geschlagen wird.

Die L-Serie entsteht, wenn ein Elektron aus der Bahn mit der Quantenzahl n = 2 geschlagen wird, und die M-Serie entsprechend, wenn ein Elektron aus der Bahn mit der Quantenzahl n = 3 geschlagen wird.

Schon 1913 war offensichtlich, dass die Feinstrukturaufspaltungen der Serien nicht auf einfache Formeln für Energieterme zurückgeführt werden kann.

Erst die Schrödingergleichung erklärt die Bedeutung der Quantenzahlen *n* und beschreibt die Aufspaltungen der Röntgenlinien korrekt.

Henry G. J. Moseley (1913)

$$h\nu_{nm} = 13.6 \,\mathrm{eV} \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right| \\ \times (Z - \beta)^2$$

β: Abschirmkonstante der Kernladung

"Moseley plot" der charakteristischen Röntgenstrahlung

 $Z \propto \sqrt{
u_{nm}}$ 



#### Kommentar 1

Das soeben gezeigte  $Z(\lambda)$ -Diagramm der charakteristischen Linien ermuntert dazu, nach einer Auftragung zu suchen, welche durch eine einfache Funktion beschrieben werden kann.

Henry Moseley fand 1913, dass sich in vielen Fällen einfache Geraden ergeben, wenn die Kernladung über der Wurzel der Frequenz der charakteristischen Linien aufgetragen wird.

Die Abbildung zeigt, dass die charakteristischen Linien vieler Elemente auf Geraden liegen, welche mit der rot umrandeten Formel berechnet werden können.

Für die Elemente und charakteristischen Linien, welche in der Abbildung gezeigt sind, können die Energieterme des Bohrschen Atommodels verwendet werden, wenn die Kernladung Z durch einen Parameter  $\beta$  reduziert wird.

Der Parameter  $\beta$  kann als Abschirmung der Kernladung Z interpretiert werden.

Nun kann man sich fragen, warum die charakteristischen Linien vieler Elemente durch die Differenz zweier Energieterme beschrieben werden kann, während dieser Ansatz bei den optischen Spektren nur für das Wasserstoffatom und die Atome der Alkalimetalle funktioniert.

Der Grund liegt in der großen Übergangsenergie der charakteristischen Röntgenstrahlung.

Die Übergangsenergie der optischen Strahlung liegt im Bereich zwischen 1 eV und 3 eV.

Die Übergangsenergie der charakteristischen Röntgenstrahlung ist um mindestens drei bis vier Größenordnungen größer.

# Aufgrund der großen Übergangsenergie der charakteristischen Röntgenstrahlung kann ein Übergang zwischen den Energieniveaus als ein Einelektronenprozess beschrieben werden, der durch die übrigen Elektronen nur wenig beeinflusst wird.

Das entspricht der Situation des einzelnen Valenzelektrons bei den Alkalimetallen.

Im Gegensatz dazu muss bei Übergängen kleiner Energie immer die Reaktion der gesamten Elektronenkonfiguration berücksichtigt werden.

# Frank-Hertz Experiment

# Die frühe Atomphysik

- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell
- Die Spektren der Alkalimetalle
- Die Spektren der Röntgenstrahlung
- Das Frank-Hertz Experiment

# Das Frank-Hertz Experiment 1

Beim Frank-Hertz Experiment (1911-14) wird der Energieverlust gemessen, den beschleunigte Elektronen durch die Kollision mit Atomen erfahren



- U<sub>1</sub> Sammelspannung
- *U*<sub>2</sub> Beschleunigungsspannung
- U<sub>3</sub> Bremsspannung

#### Das Frank-Hertz Experiment 1

Kommentar 1

Bei den Experimenten von James Frank und Gustav Hertz wird der Energieverlust beobachtet, den Elektronen bei der Kollision mit einem Atom erfahren.

Diese Experimente wurden in den Jahren von 1911 bis 1914 durchgeführt und hatten in dieser frühen Phase der Quantenphysik eine gewisse Bedeutung, da sie neben der optischen Spektroskopie einen weiteren Hinweis auf die Quantisierung der atomaren Energieniveaus gaben.

Die Abbildung zeigt schematisch, wie in diesem Experiment Elektronen an einer Kathode verdampft werden, mit einer ersten Gitterelektrode aufgesammelt und mit einer zweiten Gitterelektrode beschleunigt werden.

Nach der zweiten Gitterelektrode werden die Elektronen mit einer Elektrode aufgefangen, an der eine negative Bremsspannung angelegt ist.

#### Das Frank-Hertz Experiment 1

Kommentar 2

Die Elektronen benötigen deshalb eine gewisse Mindestenergie, um zu dieser Auffangelektrode gelangen zu können.

Die Röhre ist mit einem Gas gefüllt.

Auf dem Weg von der Kathode zur Anode können die Elektronen mit den Atomen des Gases kollidieren und dabei einen Teil ihrer kinetischen Energie auf die Atome übertragen.
#### Das Frank-Hertz Experiment mit Neon



Anodenstrom und Lichtemission der angeregten Neonatome

(FrankHertzVersuch.mp4)



Die erste Abbildung zeigt den Strom durch die Anode als Funktion der Beschleunigungspannung  $U_2$ .

Der Strom steigt mit wachsender Spannung an, wobei sich Minima ergeben, wenn die Elektronen die Neonatome besonders effektiv anregen können.

Ein Teil der Anregungsenergie wird durch optisch sichtbare Strahlung emittiert.

Das Video zeigt und erklärt das Experiment. (Der Rückgriff auf Bohrsche Bahnen wird der Situation beim Neonatom jedoch nicht gerecht.)

#### vereinfachtes Energieniveau-Schema des Ne-Atoms



Kommentar 1

Die Abbildung zeigt ein vereinfachtes Energieniveauschema des Neonatoms.

Die breiten Minima im Anodenstrom im Abstand von rund 19 V zeigen, dass die Neonatome angeregt werden können, sobald die kinetische Energie der Elektronen die Übergangsenergie vom Grundzustand zum 3p-Niveaus bei 18,7 eV aufbringen kann.

Dann können sehr viele Niveaus angeregt werden, die im vereinfachten Energieniveauschema nicht eingezeichnet sind.

Ist ein Neonatom z.B. in das 3p-Niveau angeregt, dann kann es spontan ein Photon der Energie 2 eV emittieren, was einer Wellenlänge von rund 600 nm im roten Bereich des sichtbaren Spektrums entspricht.

#### Kommentar 2

Jedoch ist das Emissionsspektrum der Frank-Hertz-Röhre ähnlich kompliziert, wie das Spektrum der Röhre beim He-Ne-Laser.

Durch eine kleine Modifikation des Experiments kann die Ionisierungsenergie der Neonatome gemessen werden.

Dazu muss die negative Spannung  $U_3$  an der Anode soweit erhöht werden, dass keine Elektronen mehr die Potentialbarriere überwinden können.

Übersteigt die Beschleunigungsspannung  $U_2$  21,6 V, dann können die Neonatome durch den Elektronenstoß ionisiert werden.

Gelangen die ionisierten Neonatome aufgrund ihrer thermischen Bewegung in den Bereich der Spannung  $U_3$ , werden sie zur Anode hin beschleunigt und es beginnt ein Strom zu fließen.

## Wellen und Quantenphysik

- 1. Eigenschaften von Wellen
- 2. Interferenz und Beugung
- 3. Relativitätstheorie
- 4. Welle-Teilchen Dualismus
- 5. Atome
  - Die frühe Atomphysik
  - Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms
  - Atome mit vielen Elektronen
- 6. Elektronische Eigenschaften von Festkörpern

#### Atome Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

#### Die Schrödinger Gleichung

- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

de Broglie: Die Wirkung ist proportional zur Phase einer Materiewelle

mit

$$dS = \vec{p}d\vec{r} - Hdt$$

 $arphi = rac{\mathsf{S}}{\hbar}$ 

Phase einer ebenen Welle

$$arphi = ec{k}ec{r} - \omega t \quad o \quad darphi = ec{k}dec{r} - \omega dt$$

Energieerhaltung H = E: Plancksches Gesetz

 $\underline{E} = \hbar \omega$ 

de Broglie:

$$\underline{\vec{p}} = \hbar \vec{k} \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

### Kommentar 1

de Broglie hatte die Idee, dass die Wirkung der klassischen Mechanik proportional zur Phase einer Materiewelle ist.

Die Wirkung geteilt durch  $\hbar$  ergibt die Phase der Materiewelle.

Auch wenn die Funktion der Wirkung von Fall zu Fall verschieden ist, so ergibt die klassische Mechanik, dass sich die Wirkung gemäß der rot unterstrichenen Formel ändert, wenn der Endpunkt der Bahn in Raum und Zeit verändert wird.

Dabei bezeichnet  $\vec{p}$  den Impuls des Teilchens und *H* die Hamilton-Funktion, welche der Energie des Teilchens entspricht.



Betrachtet man die Phase einer ebenen Welle, dann findet man durch den Vergleich mit dem Differential der Phase das Plancksche Gesetz, wenn die Energie erhalten ist.

Außerdem ergibt sich der von de Broglie propagierte Zusammenhang zwischen dem Impuls und dem Wellenzahlvektor bzw. die Formel für den Zusammenhang zwischen der Materiewellenlänge und dem Impuls der Teilchen.

Schrödinger: einfache Materiewelle

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{irac{S}{\hbar}}$$

Mit dem Differential der Wirkung  $\underline{dS} = \vec{p}d\vec{r} - Hdt$  sind die partiellen Ableitungen der Wirkung

$$\frac{\partial S}{\partial x} = p_x, \quad \frac{\partial S}{\partial y} = p_y, \quad \frac{\partial S}{\partial z} = p_z \quad \text{und} \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H$$

Partielle Ableitungen der Wellenfunktion

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \psi_0 \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} e^{i\frac{S}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar} p_x \psi$$
$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi_0 \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} e^{i\frac{S}{\hbar}} = -\frac{i}{\hbar} H \psi$$



1926 sucht Erwin Schrödinger eine Differentialgleichung, mit der die Wellenfunktion einer Materiewelle berechnet werden kann.

Dazu betrachtet er eine einfache Materiewelle mit der konstanten Amplitude  $\psi_0$ .

Mit der rot unterstrichenen Formel für die Änderung der Wirkung, wenn der Endpunkt und die Endzeit verschoben wird, findet man die partiellen Ableitungen der Wirkung.

Die partielle Ableitung der Wirkung nach dem Ort gibt die entsprechende Komponente des Impulses.

Die partielle Ableitung der Wirkung nach der Zeit ergibt die Hamiltonfunktion multipliziert mit -1.

#### Kommentar 2

Damit können die blau geschriebenen partiellen Ableitungen der Wellenfunktion berechnet werden.

Die Ableitung der Wellenfunktion nach dem Ort ergibt die Wellenfunktion selbst multipliziert mit der entsprechenden Impuls-Komponente und dem Faktor  $\frac{i}{\overline{n}}$ .

Die Ableitung der Wellenfunktion nach der Zeit ergibt die Wellenfunktion selbst multipliziert mit der Hamiltonfunktion und dem Faktor  $-\frac{i}{\hbar}$ 

relativistischer Energie-Impuls Zusammenhang

$$E^2 - c^2 \vec{p}^2 = m_0^2 c^4$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi$$
 und  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi$ 

und

$$E^2 - c^2 \vec{p}^2 = m_0^2 c^4 \quad \rightarrow \quad (E^2 - c^2 \vec{p}^2) \psi = m_0^2 c^4 \psi$$

Klein-Gordon-Gleichung

$$\frac{\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - c^2 \hbar^2 \nabla^2 \psi = -m_0^2 c^4 \psi}{\partial t^2}$$

### Kommentar 1

Nun kann man versuchen, mit der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung eine Differentialgleichung aufzustellen, indem man kurzer Hand in den partiellen Ableitungen der Wellenfunktion die Hamiltonfunktion durch die Energie ersetzt.

Mit der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung und den Ableitungen ergibt sich die rot unterstrichene Differentialgleichung.

Diese Gleichung ist als Klein-Gordon-Gleichung bekannt.

Es zeigt sich jedoch, dass das nicht die gesuchte Differentialgleichung der Materiewellen ist.

## Kommentar 2

Da das Betragsquadrat der Wellenfunktion  $|\psi|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür gegeben soll, das Teilchen an einem bestimmten Ort zu finden, und man zudem fordert, dass das Teilchen nicht einfach verschwinden kann - was 1926 noch eine plausible Annahme war -, muss es für die Wahrscheinlichkeitsdichte in Analogie zur elektrischen Ladungsdichte eine Erhaltungsgleichung geben  $(\nabla \vec{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}).$ 

Mit der Klein-Gorden-Gleichung gibt es für  $|\psi|^2$  jedoch keine Erhaltungsgleichung.

Impulsoperator

$$\hat{p}_{x}=-i\hbarrac{\partial}{\partial x}$$
  $ightarrow$   $\hat{ec{p}}=-i\hbar
abla$ 

Hamilton-Operator

$$\underline{H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + E_{pot}} \quad \rightarrow \qquad \hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + E_{pot}\right)$$

Schrödinger Gleichung

$$i\hbarrac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$$
  $ightarrow$   $i\hbarrac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\;\psi$ 

Kommentar 1

Das Problem mit der Erhaltungsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte löst sich zwanglos, wenn statt der zweiten zeitlichen Ableitung nur die erste zeitliche Ableitung verwendet wird.

Die grau geschriebene Gleichung zeigt, dass die erste zeitliche Ableitung der Hamiltonfunktion entspricht.

Schrödinger definiert nun mit der Ableitung der Wellenfunktion nach dem Ort den Differentialoperator für den Impuls, der in der ersten rot umrandeten Formel für die x-Komponente angegeben ist.

Mit dem Nabla-Operator können die drei Impulskomponenten in einer Formel zusammenfasst werden.

## Kommentar 2

Sodann fordert er, dass in der Hamiltonfunktion der Impuls durch den Impulsoperator ersetzt werden muss.

Die Hamiltonfunktion wird dadurch zum Hamiltonoperator.

Als Beispiel ist in der zweiten Zeile die rot unterstrichene klassische Hamiltonfunktion für ein Teilchen mit potentieller Energie aufgeschrieben.

Mit der Formel für den Impulsoperator ergibt sich in diesem Beispiel die rot umrandete Formel für den Hamiltonoperator.

Wird in der grau geschriebenen Gleichung der ersten zeitlichen Ableitung die Hamiltonfunktion durch den Hamiltonoperator ersetzt wird, dann ergibt sich eine Differentialgleichung welche auf einen Erhaltungssatz für die Wahrscheinlichkeitsdichte führt.



Die rot umrandete Formel ist die Schrödinger-Gleichung.

Es zeigte sich sehr schnell, dass die Schrödinger-Gleichung sehr viel allgemeiner ist, als es zunächst den Anschein hat.

So wie die Newtonsche Bewegungsgleichung  $\vec{F} = m\vec{a}$  die Grundgleichung der klassischen Mechanik ist, ist die Schrödinger-Gleichung die Grundgleichung der Quantenmechanik.

#### Schrödinger Gleichung für ein klassisches Teilchen mit potentieller Energie

$$i\hbarrac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-rac{\hbar^2
abla^2}{2m}+E_{pot}
ight)\psi$$

Kommen<u>tar</u>

Die rot umrandete Formel gibt die Schrödinger-Gleichung für ein klassisches Teilchen mit potentieller Energie.

In dieser Vorlesung wird ausschließlich diese Schrödingergleichung mit kleinen Erweiterungen behandelt.

Die Theorie von Schrödinger ist der Ausgangspunkt zu allen modernen Entwicklungen in der Quantenphysik.

Schon 1927 konnte Dirac die Wellengleichung für relativistische Elektronen aufstellen und erweiterte die Wellenmechanik zur Quantenmechanik.

1933 erhielten Erwin Schrödinger und Paul Dirac den Nobelpreis "für die Entdeckung neuer produktiver Formen der Atomtheorie".

In Analogie zu den elektromagnetischen Wellen definiert man

$$\psi\psi^* = |\psi|^2$$

#### als Wahrscheinlichkeitsdichte

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit *t* am Ort  $\vec{r}$  im Volumen *dV* zu finden, ist

Ist das Quantenteilchen in einem Volumen *V* lokalisiert, dann kann die Wellenfunktion normiert werden

$$\int_{V} |\psi|^2 d^3 r = 1$$

$$|\psi|^2 dV$$



Die Bedeutung der Wellenfunktion wurde bereits im Kapitel Welle-Teilchen-Dualismus deutlich.

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion kann bei einer geeigneten Normierung der Wellenfunktion als eine Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden.

Die rot umrandete Formel gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, das Teilchen im Volumen dV zu finden.

Die Wellenfunktion kann durch das rot unterstrichene Integral über das Volumen normiert werden, wenn das Teilchen in einem Volumen *V* lokalisiert ist.

Ist das Teilchen wie bei einem Teilchenstrahl nicht in einem bestimmten Volumen lokalisiert, dann kann man das Betragsquadrat der Wellenfunktion auf eine bestimmte Teilchendichte im Strahl normieren.

**1. Beispiel:** Die Eigenwertgleichung des Impulsoperators  $-i\hbar\nabla$ 

Wenn der Impulsoperator auf eine ebene Welle angewendet wird

$$\psi = \psi_0 e^{i(ec{k}ec{r} - \omega t)} = \psi_0 e^{i(ec{
ho}ec{r} - \mathcal{E}t)/\hbar}$$

ergibt sich

$$\hat{ec{
ho}}\psi=-i\hbar
abla\psi=-i\hbar\left(egin{array}{c} rac{\partial}{\partial \chi}\ rac{\partial}{\partial \psi}\ rac{\partial}{\partial z}\end{array}
ight)\psi=ec{
ho}\,\psi$$

Eigenwertgleichung des Impulsoperators

$$\hat{\vec{p}} \psi = \vec{p} \psi$$

Der Impuls hat den Wert  $\vec{p}$ 



Als erstes Beispiel für die Anwendung der Theorie von Schrödinger soll der Impulsoperator betrachtet werden.

Wird der Impulsoperator auf eine ebene Welle angewendet, dann bringt z.B. die Ableitung nach der x-Koordinate die x-Komponente des Impulses vor die Wellenfunktion.

Insgesamt ergibt sich die rot umrandete Eigenwertgleichung für den Impuls.

Der Eigenwert des Impulses gibt den Messwert für den Impuls.

Unschärferelationen

$$\Delta x \Delta p_x \geq rac{\hbar}{2}, \;\; {
m etc.}$$

Die ebene Welle hat keinen Anfang und kein Ende:  $\Delta x \rightarrow \infty$ . Der Ort des Teilchens ist maximal unbestimmt.

Ist der Ort des Teilchens total unbestimmt, dann gibt es für den Impuls eine Eigenwertgleichung und der Impuls ist exakt bestimmt

$$\hat{\vec{p}}\psi=\vec{p}\psi$$



Gemäß der rot umrandeten Formel für die Unschärferelation bedingt ein exakt bestimmter Messwert für den Impuls eine maximale Unsicherheit bezüglich des Ortes, an dem das Teilchen zu finden ist.

Da eine ebene Welle keinen Anfang und kein Ende hat, ist der Ort des Teilchen tatsächlich unbekannt.

Allgemein gilt damit:

Es gibt eine Eigenwertgleichung für den Impuls, wenn der Ort des Teilchens total unbestimmt ist.

2. Beispiel: Die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators

Unschärferelation für Zeit und Energie

$$\Delta t \Delta E \geq rac{\hbar}{2}$$

Ist die Zeit total unbestimmt  $\Delta t \rightarrow \infty$ , dann ist die Energie exakt bestimmt  $\Delta E = 0$ .

Der Ansatz für die Wellenfunktion, wenn die Zeit total unbestimmt ist, ist eine stehende Welle

$$\boldsymbol{\psi}(\vec{r},t) = \boldsymbol{\varphi}(\vec{r}) \boldsymbol{e}^{-i\boldsymbol{E}t/\hbar}$$



Aus der Unschärferelation für die Zeit und die Energie folgt, dass die Energie einen exakt bestimmten Wert hat, wenn die Zeit total unbestimmt ist.

Für die Wellenfunktion bedeutet eine total unbestimmte Zeit, dass die zeitliche Variation durch eine harmonische Schwingung ohne Anfang und Ende gegeben ist.

Die räumliche Variation und die zeitliche Variation können durch unterschiedliche Funktionen beschrieben werden.

Der Lösungsansatz für die Schrödingergleichung ist eine stehenden Welle, wenn die Energie erhalten ist.

wird der Ansatz  $\underline{\psi}(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$  in die Schrödinger Gleichung eingesetzt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad \rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} = E\varphi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} = \hat{H}\varphi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$$

dann ergibt sich die Eigenwertgleichung für die Energie, wenn der Hamiltonoperator keine explizite Funktion der Zeit ist

$$\hat{H} \boldsymbol{\varphi}(\vec{r}) = \boldsymbol{E} \boldsymbol{\varphi}(\vec{r})$$

Kommentar

Wird der rot unterstrichene Ansatz für die Wellenfunktion in die Schrödingergleichung eingesetzt, dann können die blau geschriebenen Exponentialfunktionen der Schwingung eliminiert werden, wenn der Hamiltonoperator keine explizite Funktion der Zeit ist.

Es ergibt sich die rot umrandete Eigenwertgleichung für die Energie.

Dieses Ergebnis entspricht der klassischen Physik.

In der klassischen Mechanik ist die Energie ist erhalten, wenn die Hamiltonfunktion keine explizite Funktion der Zeit ist.

#### Allgemein gilt in der Quantenmechanik:

#### Zu physikalischen Größen, die einen festen Wert haben, gibt es eine Eigenwertgleichung

#### Operator \* *Eigenfunktion* = Eigenwert \* *Eigenfunktion*

Kommentar

Allgemein gilt in der Quantenmechanik.

Hat eine physikalische Größe einen festen Wert, dann gibt es auch eine Eigenwertgleichung.

Die Wellenfunktion zu einem Eigenwert wird Eigenfunktion genannt.

Zu jedem Eigenwert gibt es mindestens eine Eigenfunktion.

Wird ein Operator auf eine seiner Eigenfunktionen angewendet, dann ergibt sich der Eigenwert multipliziert mit der Eigenfunktion.

# **Kastenpotential**
# Atome

Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

#### Die Schrödinger Gleichung

- Das Kastenpotential
- Bahndrehimpuls
- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

Dieses Beispiel behandelt ein Teilchen, das in einem unendlich tiefen kastenförmigen Potential eingeschlossen ist. Es gilt

$${m {\it E}_{\it pot}}(x) = 0$$
 für  $0 < x < a$  und  ${m {\it E}_{\it pot}}(x) o \infty$  sonst.





Die Abbildung skizziert das Kastenpotential im eindimensionalen Fall.

Das Teilchen kann sich ausschließlich in einem Bereich zwischen den Koordinaten x = 0 und x = a bewegen.

Außerhalb dieser Grenzen ist die potentielle Energie unendlich groß, und die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu finden, ist Null.

die Schrödinger Gleichung ist im Bereich 0 < x < a

$$i\hbarrac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\,\psi=-rac{\hbar^2}{2m}rac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Lösungsansatz:

$$\pmb{\psi} = \pmb{\varphi}(\pmb{x}) \pmb{e}^{-i \pmb{E} t/\hbar}$$

Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$\boldsymbol{E}\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x})}{\partial x^2}$$

Randbedingungen

$$\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0})=\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{a})=\boldsymbol{0}$$

# Kommentar 1

Die Schrödingergleichung kann nur im Bereich zwischen x = 0 und x = a aufgeschrieben werden.

Die potentielle Energie ist im Bereich zwischen x = 0 und x = a eine Konstante, der der Wert Null zugewiesen werden kann.

Der Hamiltonoperator enthält nur den Term für die kinetische Energie.

Da der Hamiltonoperator nicht von der Zeit abhängt, kann der rot unterstrichene Lösungsansatz verwendet werden.

Es ergibt sich die rot umrandete zeitunabhängige Schrödingergleichung.

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist die komplexe Exponentialfunktion, bzw. die Sinus oder Cosinus-Funktion.



Festgelegt wird die Lösung durch die Forderung, dass die Wellenfunktion an den Rändern des Potentialtopfes verschwinden muss, da dort die Energie unendlich groß wird.

Damit ergeben sich die rot unterstrichenen Randbedingungen.

#### Lösung der Schrödinger Gleichung





$$k_n = n \frac{\pi}{a}$$
 und  $n = 1, 2, ...$ 

Energieeigenwerte

also

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2$$



Die rot umrandete Formel gibt die Lösung der Schrödingergleichung.

Mit der Sinus-Funktion für den ortsabhängigen Anteil der Wellenfunktion, ist die Randbedingung am linken Rand des Potentialtopfes für x = 0 automatisch erfüllt.

Die Bedingung am rechten Rand des Potentialtopfes legt die Wellenzahl im Argument der Sinus-Funktion fest.

Es ergibt sich mit der Randbedingung für x = a die rot unterstrichene Formel für die quantisierte Wellenzahl.

Die Wellenzahl ist ein ganzes Vielfaches von  $\pi/a$ .



Die Quantenzahl n kann die Werte 1, 2 usw. annehmen.

Wird die Wellenfunktion in die Schrödingergleichung eingesetzt, dann ergibt sich die rot umrandete Formel für die Energieeigenwerte.

Es handelt sich um die quantisierte kinetische Energie des Teilchens.

Die Abbildung skizziert den räumlichen Anteil der Wellenfunktion.

Die Lösungen der Schrödingergleichung für das Kastenpotential entsprechen den stehenden Wellen einer schwingenden Saite.

#### Normierung der Wellenfunktion

$$1 = \int_{x=0}^{a} \psi^{*} \psi dx = \int_{x=0}^{a} \psi^{*}_{0} \psi_{0} \sin^{2}(k_{n}x) dx = \frac{a}{2} \psi^{*}_{0} \psi_{0}$$

normierte Eigenfunktionen

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) e^{-iE_n t/\hbar}$$



Um die Amplitude der normierten Wellenfunktion zu bestimmen, muss das Betragsquadrat der Wellenfunktion über das Intervall von x = 0 bis x = a integriert werden.

Das Integral über Sinus-Quadrat ergibt unabhängig von der Wellenzahl  $k_n$  den Wert a/2.

Die rot umrandete Formel gibt die normierten Eigenfunktionen für ein Teilchen im Kastenpotential.

Alkali-Spektren Röntgenspektren Frank-Hertz Experiment Die Schrödinger Gleichung Kastenpotential Bahndrehimpuls Revision Inhaltsverzeichnis

# Bahndrehimpuls

# Atome

Die Schrödinger Gleichung des Wasserstoffatoms

#### Die Schrödinger Gleichung

Das Kastenpotential

#### Bahndrehimpuls

- Die Lösung der Schrödinger Gleichung für das H-Atom
- normaler Zeeman Effekt
- Das Stern-Gerlach Experiment und der Spin des Elektrons
- Spin-Bahn-Kopplung
- Addition von Drehimpulsen

Kepler stellte fest, dass Planeten die Sonne auf elliptischen Bahnen umkreisen



Newton definiert den Bahndrehimpuls

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Der Bahndrehimpuls ist erhalten und steht senkrecht auf der Bahnebene

$$rac{dec{L}}{dt}=0$$
  $ec{L}=ec{r} imesec{p}$  und  $ec{p}=mec{v}$ 



Kepler stellt fest, dass Planeten sich auf elliptischen Bahnen um die Sonne bewegen.

Newton definierte den Bahndrehimpuls, der gemäß der rot unterstrichenen Formel durch das Kreuzprodukt von Ortsvektor und Impuls gegeben ist.

Mit dem Gravitationsgesetz zeigte Newton, dass der Bahndrehimpuls sich bei der Bewegung der Planeten nicht ändert und senkrecht auf der Bahnebene steht.

Aus der Definition des Bahndrehimpulses sieht man unmittelbar, dass die Ableitung nach der Zeit den Wert Null ergeben muss.



Die Ableitung des Ortsvektors nach der Zeit ergibt die Geschwindigkeit, die parallel zum Impuls ist.

Die zeitliche Ableitung des Impulses ergibt die Kraft, die gemäß dem Gravitationsgesetz parallel zum Ortsvektor ausgerichtet ist.

Beide Terme, die sich bei der Differentiation des Bahndrehimpulses nach der Zeit ergeben, haben jeweils den Wert Null.

 $\frac{d\vec{L}}{dt} \neq 0$ 

# Bahndrehimpuls 2

Für ein Quantenteilchen kann es keine Bahnebene geben. Folglich gilt

#### Der Drehimpuls in der Quantenphysik:

Unschärferelation für den Drehimpuls Lz

 $\Delta \varphi \Delta L_z \geq rac{\hbar}{2}$ 



# Kommentar 1

Aufgrund der Unschärferelationen kann sich ein Quantenteilchen nicht in einer Bahnebene bewegen.

Der Bahndrehimpuls wird deshalb im Gegensatz zur klassischen Mechanik keine feste Richtung im Raum einnehmen und ändert sich mit der Zeit.

Dennoch bestimmt der Bahndrehimpuls in der Quantenphysik entscheidend die Wellenfunktion der Quantenteilchen.

Die rot umrandete Formel gibt die Unschärferelation für den Drehimpuls.

Die Unsicherheit im Winkel  $\varphi$  bei einer Drehung um die z-Achse multipliziert mit der Unsicherheit der Drehimpulskomponente entlang der z-Achse ist größer oder gleich  $\hbar/2$ .



Die Abbildung zeigt die Konsequenz dieser Unschärferelation.

Hat die Drehimpulskomponente in *z*-Richtung einen festen Wert, dann ist der Winkel  $\varphi$  total unbestimmt.

Damit ist es nicht mehr möglich, den Drehimpulskomponenten in *x*- und in *y*-Richtung einen fest Wert zuzuweisen.

Allein die *z*-Komponente des Drehimpulsvektors und seine Länge haben einen exakt bestimmten Wert.



Es zeigt sich:  $L_z$  und  $\vec{L}^2$  sind durch Eigenwertgleichungen festgelegt



Es zeigt sich, dass neben der Eigenwertgleichung für  $L_z$  auch eine Eigenwertgleichung für  $\vec{L}^2$  gefunden werden kann.

Die Abbildung veranschaulicht dieses Ergebnis.

Ist die *z*-Komponente durch einen Eigenwert festgelegt, dann liegt der Drehimpulsvektor auf einem Konus um die *z*-Achse.

Die Länge des Vektors hat einen festen Wert, doch die Lage auf dem Konus ist vollständig unbestimmt.

Die Zahlenwerte von *z*-Komponente und Betrag des Drehimpulsvektors sind durch Eigenwertgleichungen festgelegt.

#### Eigenwertgleichung für die z-Komponente:

Drehimpulsoperator für die z-Komponente

$$\hat{p}_{x}=-i\hbarrac{\partial}{\partial x}$$
  $ightarrow$   $\hat{L}_{z}=-i\hbarrac{\partial}{\partial arphi}$ 

Eigenwertgleichung für den Drehimpuls

$$\hat{L}_{z}f(oldsymbol{arphi})=-i\hbarrac{\partial}{\partialoldsymbol{arphi}}f(oldsymbol{arphi})=\mathsf{Eigenwert}\,\cdot\,f(oldsymbol{arphi})$$

Lösung

$$\frac{f(\boldsymbol{\varphi}) = \boldsymbol{e}^{im\boldsymbol{\varphi}}}{f(\boldsymbol{\varphi}) = f(\boldsymbol{\varphi} + 2\pi) \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{m} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots}$$

Eine Drehung um 360° stellt den Ausgangszustand wieder her

# Kommentar 1

Die Eigenwertgleichung für die *z*-Komponente des Drehimpulses ist leicht gefunden.

Es zeigt sich, dass der Operator für die *z*-Komponente die gleiche Form hat wie der Operator für den Impuls.

Die grau geschriebene Formel gibt den Operator für die *x*-Komponente des Impulses.

Für den Drehimpuls muss lediglich die Koordinate x durch die Variable  $\varphi$  ausgetauscht werden.

Damit ergibt sich die rot umrandete Formel für z-Komponente des Drehimpulses,

und die Eigenwertgleichung für den Operator  $L_z$  kann aufgeschrieben werden.



Die Lösung der Differentialgleichung ist die rot unterstrichenen Exponentialfunktion.

Die Bedingung für die Quantenzahl *m* im Exponenten ergibt sich aus der Forderung, dass die Funktion nach einer Drehung um den Winkel  $2\pi$  bzw. 360° wieder den ursprünglichen Wert halten muss.

*m* kann also nur die Werte 0,  $\pm 1$ ,  $\pm 2$  usw. annehmen.

Eigenwertgleichung für die z-Komponente des Bahndrehimpuls

 $\hat{L}_{z} f_{m}(\boldsymbol{\varphi}) = m \hbar f_{m}(\boldsymbol{\varphi})$ 

mit der Quantenzahl m

 $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ 

Eigenfunktionen für die z-Komponente des Bahndrehimpuls

 $f_m(\boldsymbol{\varphi}) = \boldsymbol{e}^{im\boldsymbol{\varphi}}$ 

Eigenwerte für die z-Komponente des Bahndrehimpuls

 $L_z = m\hbar$ 



Die rot umrandete Formel gibt die Eigenwertgleichung für die *z*-Komponente des Bahndrehimpulses.

Die erste rot unterstrichene Formel gibt die Eigenfunktionen der *z*-Komponente des Drehimpulsoperators an.

Die zweite rot unterstrichene Formel gibt die Eigenwerte der *z*-Komponente des Drehimpulsoperators an.

#### Der Betrag des Drehimpulsvektors:





Die Abbildung skizziert dieses Ergebnis.

Die z-Komponente des Drehimpulsvektors hat den Wert  $m \cdot \hbar$ .

Nun muss eine Eigenwertgleichung gefunden werden, mit der der Betrag des Drehimpulsvektors bestimmt werden kann.

Es zeigt sich, dass es keine direkte Eigenwertgleichung für den Betrag des Drehimpulsoperators gibt.

Statt dessen gibt es eine Eigenwertgleichung für das Betragsquadrat des Drehimpulsoperators, d.h. für  $\hat{\vec{L}}^2$ .



$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times \vec{p}_r + \vec{r} \times \vec{p}_t = r p_t \vec{e}_z$$

kinetische Energie

$$E_{kin} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{p}_t^2}{2m} = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{r^2 \vec{p}_t^2}{2mr^2} = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}$$

# Kommentar

Diese Eigenwertgleichung ergibt sich am einfachsten, wenn man die kinetische Energie eines Teilchens betrachtet.

Die Skizze zeigt, dass der Impuls in eine longitudinale Komponente zerlegt werden kann, die parallel zum Ortsvektor ausgerichtet ist und in eine transversale Komponente, die senkrecht zum Ortsvektor orientiert ist.

Mit der Definitionsgleichung für den Drehimpuls erkennt man, dass nur die transversale Impulskomponente zum Drehimpuls beiträgt.

Rechnet man sich mit dieser Zerlegung die kinetische Energie eines Teilchens aus, dann ergibt sich ein Anteil aufgrund der Bewegung in Richtung des Ortsvektors und ein zweiter Anteil, der mit der transversalen Bewegung und damit mit dem Betragsquadrat des Drehimpulses verknüpft ist.

Hamilton-Operator der kinetischen Energie

 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ 



Laplace Operator in Kugelkoordinaten

$$\nabla^{2} = \frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}}$$
$$= \frac{1}{r^{2}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2}\frac{\partial}{\partial r^{2}}\right) + \frac{1}{r^{2}}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^{2}\theta}\frac{\partial^{2}}{\partial\varphi^{2}}\right\}$$

(https://de.wikipedia.org/wiki/Laplace-Operator)

# Kommentar

Bislang wurden in der Vorlesung ausschließlich kartesische Koordinaten verwendet.

Für ein Elektron jedoch, das sich im Potential eines Atomkerns bewegt, sind Kugelkoordinaten besser geeignet.

Bei den Kugelkoordinaten wird ein Ortsvektor durch seine Länge *r*, den Winkel  $\theta$  zur *z*-Achse und der Winkel  $\phi$  in der *xy*-Ebene bestimmt.

Der Operator Nabla-Quadrat, der die kinetische Energie eines Teilchens bestimmt, wird üblicherweise mit seinen kartesischen Koordinaten aufgeschrieben.

Ebenso kann man Nabla-Quadrat in Kugelkoordinaten ausdrücken. Die rot umrandete Formel für den Laplace-Operator kann in einer Formelsammlung beziehungsweise im Internet nachgeschlagen werden.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r^2} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Hamiltonoperator für die kinetische Energie

$$\hat{H} = rac{\hat{ec{p}}^2}{2m} = -rac{\hbar^2 
abla^2}{2m}$$
 und  $E_{kin} = rac{ec{p}_r^2}{2m} + rac{ec{L}^2}{2mr^2}$ 

Differentialoperator für das Betragsquadrat des Drehimpulses in Kugelkoordinaten ist

$$\hat{ec{L}}^2 = -\hbar^2 \left\{ rac{1}{\sin heta} rac{\partial}{\partial heta} \sin heta rac{\partial}{\partial heta} + rac{1}{\sin^2 heta} rac{\partial^2}{\partial arphi^2} 
ight\}$$

# Kommentar

Setzt man diese Formel in den blau geschriebenen Hamiltonoperator für die kinetische Energie ein, dann erkennt man, dass es wie bei der Zerlegung der klassischen kinetischen Energie einen radialen und einen transversalen Anteil der kinetischen Energie gibt.

Aus dem Vergleich mit dem Hamiltonoperator kann der Differentialoperator für das Betragsquadrat des Drehimpulses bestimmt werden.

Die untere blaugeschriebene Formel gibt den Differentialoperator für das Betragsquadrat des Drehimpulses an.

Die Eigenwerte und Eigenfunktionen dieses Operators sind wohlbekannt.

Eigenwertgleichung für das Quadrat des Bahndrehimpuls

$$\hat{\vec{L}}^2 \mathbf{Y}_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi}) = \boldsymbol{\ell}(\boldsymbol{\ell}+1)\hbar^2 \mathbf{Y}_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi})$$

mit der Quantenzahl  $\ell$ 

 $\ell = 0, 1, 2, \dots$  und  $|m| \leq \ell$ 

Eigenwerte für das Quadrat des Bahndrehimpuls

 $\underline{L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2}$ 

Die Eigenfunktionen sind Kugelflächenfunktionen  $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ 

# Kommentar

Die rot umrandete Formel gibt die Eigenwertgleichung für das Quadrat des Bahndrehimpulses an.

Die Quantenzahl *l* hat die Werte 0,1,2..

Die rot unterstrichene Formel gibt die Eigenwerte für  $\vec{L}^2$  an.

Die Eigenfunktionen dieser Differentialgleichung sind Kugelflächenfunktionen, die durch die zwei Quantenzahlen  $\ell$  und *m* bestimmt werden.

Die Quantenzahl *m* ist identisch mit der Quantenzahl für die *z*-Komponente des Bahndrehimpuls.

Der Wertebereich der Quantenzahl *m* und ist auf das Intervall von  $-\ell$  bis  $+\ell$  beschränkt.




Die Abbildungen fassen die Ergebnisse der Eigenwertgleichungen graphisch für die Quantenzahlen  $\ell = 1$  und  $\ell = 2$  zusammen.

Der Vektor des Bahndrehimpulses liegt auf Kegelflächen, welche durch die Quantenzahlen m und  $\ell$  bestimmt werden.

Der Bahndrehimpulsvektor hat die Länge  $\hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$ .

Die Orientierung des Vektors ist zwar unbestimmt, aber doch auf diese Kegelflächen eingeschränkt.

## Bahndrehimpuls 12: Rotation zweiatomiger Moleküle

Rotation einer punktförmigen Masse

$$E_{rot} = \frac{\vec{L}^2}{2mr^2}$$

Rotation eines zweiatomigen Moleküls um den Schwerpunkt

$$E_{rot} = rac{ec{L}^2}{2I}$$

Trägheitsmoment:  $I = \sum_{i=1,2} m_i r_i^2$ 

$$E_{rot} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I} \quad \rightarrow \quad E_{rot} = B\ell(\ell+1)$$

## Kommentar 1

Die Drehimpulsquantisierung kann direkt in den Rotationsspektren von zweiatomigen Molekülen in der Gasphase beobachtet werden.

Die rot unterstrichene Formel gibt die Rotationsenergie für ein Teilchen der Masse m im Abstand r von der Drehachse an.

Für ein Molekül mit zwei Atomen muss das Trägheitsmoment / verwendet werden und es ergibt sich die zweite rot unterstrichene Formel.

In der Formel für das Trägheitsmoment bezeichnen  $r_{i=1,2}$  die Abstände der beiden Atome zum Schwerpunkt des Moleküls.

Für den Hamiltonoperator der Rotation muss in der Hamiltonfunktion der Impuls durch den Impulsoperator ersetzt werden, so dass sich das Quadrat des Drehimpulsoperators ergibt.

## Kommentar 2

Der Hamiltonoperator der Rotation ist folglich  $\hat{H} = \hat{L}^2/2I$  und die Eigenwerte der Rotation werden durch die Eigenwerte des Drehimpulsoperators bestimmt. Für die Eigenwert der Rotationsenergie ergibt sich die rot umrandete Formel. Die Rotationsenergie ist proportional zu  $\ell(\ell + 1)$ .

## Bahndrehimpuls 13: Rotation zweiatomiger Moleküle







Die Abbildung zeigt das erwartete Energieniveauschema für die Rotation eines zweiatomigen Moleküls.

Für den Fall elektrischer Dipolstrahlung findet man mit der Schrödinger-Gleichung die Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$ .

Mit dieser Auswahlregel ergeben sich die rot gezeichneten Übergänge zwischen den Energieniveaus.

Die Energiedifferenz zwischen den Spektrallinien beträgt somit stets 2 · B.

## Bahndrehimpuls 14: Rotation zweiatomiger Moleküle

#### Mikrowellenspektrum von CO:



# Kommentar 1

Die Abbildung zeigt das Mikrowellenspektrum von Kohlenmonoxid.

Wie erwartet haben die Spektrallinien den gleichen Abstand.

Die Intensität wird einerseits durch die Übergangswahrscheinlichkeit bestimmt, die mit zunehmenden Werten der Quantenzahl  $\ell$  ansteigt.

Andererseits muss die thermische Besetzung der Energieniveaus berücksichtigt werden.

Die Intensität der Spektrallinien wächst auf der linken Seite aufgrund der zunehmenden Übergangswahrscheinlichkeit an und nimmt aufgrund der thermischen Besetzung der Energieniveaus auf der rechts Seite des Spektrums wieder ab.



Aus dem Abstand der Spektrallinien von rund 116 GHz kann das Trägheitsmoment von Kohlenmonoxid und daraus der Abstand der beiden Atome bestimmt werden.

Dieses Beispiel illustriert, dass mit der Schrödinger-Gleichung eine neue Stufe im Verständnis der Natur erreicht worden ist.

#### Die Eigenfunktionen des Bahndrehimpuls

Die  $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$  sind Eigenfunktionen von  $\hat{L}_z$  und  $\hat{\vec{L}}^2$ 

$$\begin{split} \hat{\boldsymbol{L}}_{\boldsymbol{z}} \boldsymbol{Y}_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}) &= \boldsymbol{m}\boldsymbol{\hbar}\boldsymbol{Y}_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}) \\ \hat{\boldsymbol{L}}^2 \boldsymbol{Y}_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}) &= \boldsymbol{\ell}(\boldsymbol{\ell}+1)\boldsymbol{\hbar}^2 \boldsymbol{Y}_{\ell,m}(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\varphi}) \end{split}$$



Die Animation veranschaulicht des Drehimpulseigenfunktionen.

Es verbergen sich dahinter die Sinus- und Cosinus-Funktionen für die Drehimpulsquantenzahlen  $\ell = 0, 1$  und 2, die in der folgenden Tabelle zusammengestellt sind.

ł	m	$Y_{\ell,m}(oldsymbol{ heta})$
0	0	$\propto$ 1
1	0	$\propto \cos  heta$
1	±1	$\propto {\sf sin} {m  heta}{m e}^{\pm i m arphi}$
2	0	$\propto 3\cos^2 heta-1$
2	±1	$\propto \sin  heta \cos  heta e^{\pm i arphi}$
2	±2	$\propto \sin^2  heta e^{\pm 2 i arphi}$

Die Kugelflächenfunktionen sind auf die Oberfläche der Einheitskugel normiert, d.h. es gilt

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\sin\theta d\theta d\varphi Y_{\ell,m}Y_{\ell,m}^{*}=1$$

(https://en.wikipedia.org/wiki/Table\_of\_spherical\_harmonics)



Die Tabelle stellt die Kugelflächenfunktionen für die Quantenzahlen  $\ell = 0, 1$  und 2 zusammen.

Die Proportionalitätskonstanten, die ich in der Tabelle unterschlagen habe, ergeben sich aus der rot unterstrichenen Normierungsbedingung für die Kugelflächenfunktionen.

Die Kugelflächenfunktionen mit den Vorfaktoren können im Internet nachgeschlagen werden.

#### Bahndrehimpuls 17: Drehimpulsorbitale

Einige wenige Drehimpulseigenzustände sind zur Beschreibung von Atomorbitalen wichtig und werden mit Buchstaben bezeichnet

s:  $\ell = 0$ , p:  $\ell = 1$ , d:  $\ell = 2$ , f:  $\ell = 3$ , usw.

**s-Orbital:** *ℓ* = 0

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$



Die kleinsten Werte der l-Quantenzahl werden mit Buchstaben gekennzeichnet.

s-Orbitale haben keinen Drehimpuls.

p-Orbitale haben den Drehimpuls 1,

d-Orbitale den Drehimpuls 2 usw.

Die Kugelflächenfunktion für das s-Orbital ist eine Konstante.

Der Wert  $1/\sqrt{4\pi}$  ergibt sich unmittelbar aus der Fläche der Einheitskugel von  $4\pi$ .

## Bahndrehimpuls 18: Drehimpulsorbitale

p-Orbitale:  $\boldsymbol{\ell} = 1$  und  $m = 0, \pm 1$ 

 $p_z$ -Orbital (m = 0)







Das  $p_z$ -Orbital ist proportional zum  $\cos \theta$ 

Die Orbitale werden dadurch veranschaulicht, dass der Wert des Polynoms für die Winkel  $\theta$  und  $\varphi$  die Länge eines Vektors bestimmt, der unter diesen Winkeln orientiert ist.

Die Skizze zeigt dieses Verfahren für das  $p_z$ -Orbital.

Das Orbital wird  $p_z$ -Orbital genannt, da cos  $\theta$  die Projektion eines Einheitsvektors auf die *z*-Achse angibt.

## Bahndrehimpuls 19: Drehimpulsorbitale

 $p_{x,y}$ -Orbitale ( $m = \pm 1$ )

 $Y_{1,\pm1}\propto \sin\theta e^{\pm i\varphi}$ 



- $p_x$ -Orbital: Realteil von  $Y_{1,\pm 1}$  (also  $\sin \theta \cos \varphi$ )
- $p_{y}$ -Orbital: Imaginärteil von  $Y_{1,\pm 1}$  (also  $\sin \theta \sin \varphi$ )





Für die Kugelflächenfunktion zu  $\ell = 1$  und  $m = \pm 1$  ergibt der Realteil gerade die Projektion eines Einheitsvektors auf die *x*-Achse und der Imaginärteil die Projektion auf die *y*-Achse.

Entsprechend nennt man diese Orbitale  $p_x$  bzw.  $p_y$ -Orbitale.

Sie haben dieselbe Form wie das  $p_z$ -Orbital, sind aber entlang der *x*- bzw. *y*-Achse orientiert.

Die Abbildung illustriert diese Orbitale.

### Bahndrehimpuls 20: Drehimpulsorbitale

d-Orbitale:  $\boldsymbol{\ell}=2$  und  $m=0,\pm1,\pm2$ 

 $d_{3z^2-1}$ -Orbital (m = 0):

$$Y_{2,0} \propto (3\cos^2\theta - 1)$$



Für 
$$\theta_M = 54,74^{\circ}: 3\cos^2\theta_M - 1 = 0$$



Die Abbildung illustriert das  $d_{3z^2-1}$ -Orbital, das der Kugelflächenfunktion mit den Quantenzahlen  $\ell = 2$  und m = 0 entspricht.

Der Ring ergibt sich, da die Funktion  $3\cos^2 \theta - 1$  für den Winkel  $\theta = 54,74^{\circ}$  den Wert Null ergibt.

- 1. Was ist die Ursache für die charakteristischen Linien im Spektrum einer Röntgenröhre.
- 2. Skizzieren Sie den Aufbau einer Röntgenröhre.
- 3. Was ist der Grund für die charakteristische Röntgenstrahlung?
- 4. Was ist eine  $K_{\alpha}$ -Linie?
- 5. Wie hat Moseley das Bohrsche Atommodell erweitert?
- 6. Wieso können Elemente durch ihre Röntgenspektren identifiziert werden?
- 7. Schreiben Sie die Schrödingergleichung auf.
- 8. Wie lautet die Hamiltonfunktion für ein klassisches Teilchen mit potentieller Energie?
- 9. Wie lautet der Differentialoperator für den Impuls in der Schrödingertheorie?



- 10. Wie lautet der Hamiltonoperator für ein klassisches Teilchen mit potentieller Energie?
- 11. Wie lautet die Schrödingergleichung für ein klassisches Teilchen mit potentieller Energie?
- 12. Wie lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung für ein klassisches Teilchen mit potentieller Energie?
- 13. Wie lautet der Lösungsansatz für die Schrödingergleichung, wenn der Hamiltonoperator die Zeit nicht explizit enthält?



- 14. Wie lautet die Unschärferelation für den Drehimpuls?
- 15. Weshalb kann in der Quantenphysik nur einer Drehimpulskomponente ein fester Wert zugewiesen werden?
- 16. Wie lautet der Differentialoperator für die z-Komponente des Drehimpulses?
- 17. Wie lautet die Eigenwertgleichung für die z-Komponente des Drehimpulses?
- 18. Schreiben sie die Eigenwerte und die Eigenfunktionen für die *z*-Komponente des Drehimpulses auf.
- 19. Wie lautet die Eigenwertgleichung für das Quadrat des Drehimpulses?
- 20. Schreiben Sie die Eigenwerte und Eigenfunktionen für das Quadrat des Drehimpulses auf?
- 21. Welche Eigenwerte hat die *z*-Komponente des Drehimpulses für die Drehimpulsquantenzahl *l*?

Δ

- 22. Welche Länge hat der Drehimpulsvektor?
- 23. Skizzieren Sie den Drehimpulsvektor für die Drehimpulsquantenzahl  $\ell = 1$ .
- 24. Skizzieren Sie ein s-Orbital.
- 25. Skizzieren Sie ein  $p_z$ -Orbital.
- 26. Wie hängt ein  $p_x$  und  $p_y$ -Orbital mit der Kugelflächenfunktion  $Y_{1,\pm 1}$  zusammen?
- 27. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Ortsvektor in die Richtung  $\theta$ ,  $\varphi$  zeigt, wenn sich das Teilchen in einem  $p_z$ -Orbital befindet.
- 28. Schreiben Sie die Rotationsenergie für ein zweiatomiges Molekül mit dem Trägheitsmoment *I* auf.

- 29. Wie lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die Rotation eines zweiatomigen Moleküls?
- 30. Welche Werte ergeben sich für die quantisierte Energie?
- 31. Skizzieren Sie das Rotationsspektrum eines Moleküls und geben Sie den energetischen Abstand der Spektrallinien an.

#### 1. Vorlesung

- Eindimensionale Wellengleichung
- Reflexion und Transmission
- Stehende Wellen
- Dreidimensionale Wellen
- Schallwellen

#### 2. Vorlesung

- Elektromagnetische Wellen
- Kohärenz
- Michelson Interferometer
- Interferenz an dünnen Schichten
- Beugung am Doppelspalt
- Beugung am Gitter

#### 3. Vorlesung

- Fabry-Perot Interferometer
- Beugung am Einzelspalt
- Bragg'sches Gesetz
- Laue Bedingung
- Michelson Morley Experiment

#### 4. Vorlesung

- Die Einsteinschen Postulate
- Lorentz Transformation
- Zeitdilatation und Längenkontraktion
- Das Experiment von Hall und Rossi
- Zwillingsparadoxon
- "sichtbare Effekte" der Lorentz Transformation
- Der invariante Abstand
- Relativistische Invarianten
- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik

#### 5. Vorlesung

- Doppler-Effekt
- Relativistische Mechanik
- Wärmestrahlung

#### 6. Vorlesung

- Plancksches Strahlungsgesetz
- Laser

### 7. Vorlesung

- Photoelektrischer Effekt
- Compton Effekt

#### Materiewellen

#### 8. Vorlesung

- Unschärferelationen
- Elektron und Elementarladung
- Kern und Elektronenwolke
- Das Spektrum des Wasserstoffatoms
- Das Bohrsche Atommodell