



Vorlesung 1:

Roter Faden:

Atomphysik beschäftigt sich mit dem Aufbau der Materie auf dem Niveau der Atome unter Berücksichtigung der Quantenmechanik.

Atom:

griechisch: das *Unzerschneidbare*
lateinisch: das *Individuum*

Skripte und Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>



Übungen und Klausur

VL: Di, Do 11:30-13:00

Fragen zur VL: Sprechstunde nach jeder VL.

oder email: wim.de.boer@cern.ch

Übungen Doppelstunde pro Woche

Di. 13:00-19:00 6 Gruppen

Übungsleiter: Frank Hartmann email: frank.hartmann@cern.ch

Klausur: Do. 14.7.2005 während VL-Zeit

Zulassung Klausur: 30% der Aufgaben gerechnet

Bonus Klausur: >50% der Aufgaben gerechnet.

Schein: Klausur bestehen

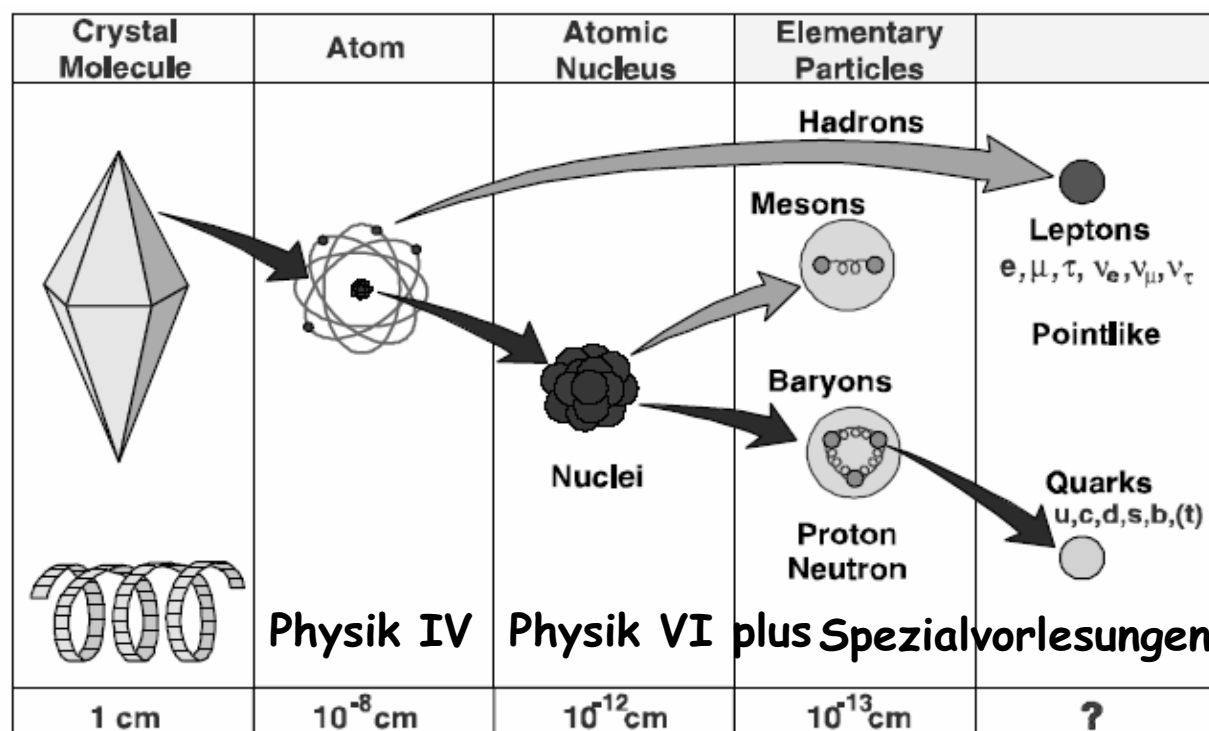
Kontrolle der Aufgaben: Sie in Eigenverantwortung. Wie?

Zu Beginn jedes Tutoriums geht eine Matrix herum, in die jeder Student einträgt, welche Aufgaben er vorrechnen KANN! Sollten Sie die *angekreuzte* Aufgabe bei der Übungsstunde nach Aufforderung

- rechnen können: gut - alle Kreuze werden anerkannt
- nicht so richtig, aber man merkt sie haben es versucht: ein Kreuz aberkannt
- überhaupt nicht - deutlicher „Betrugsversuch“: alle Kreuze des Tages aberkannt.



Die elementaren Bausteine der Materie



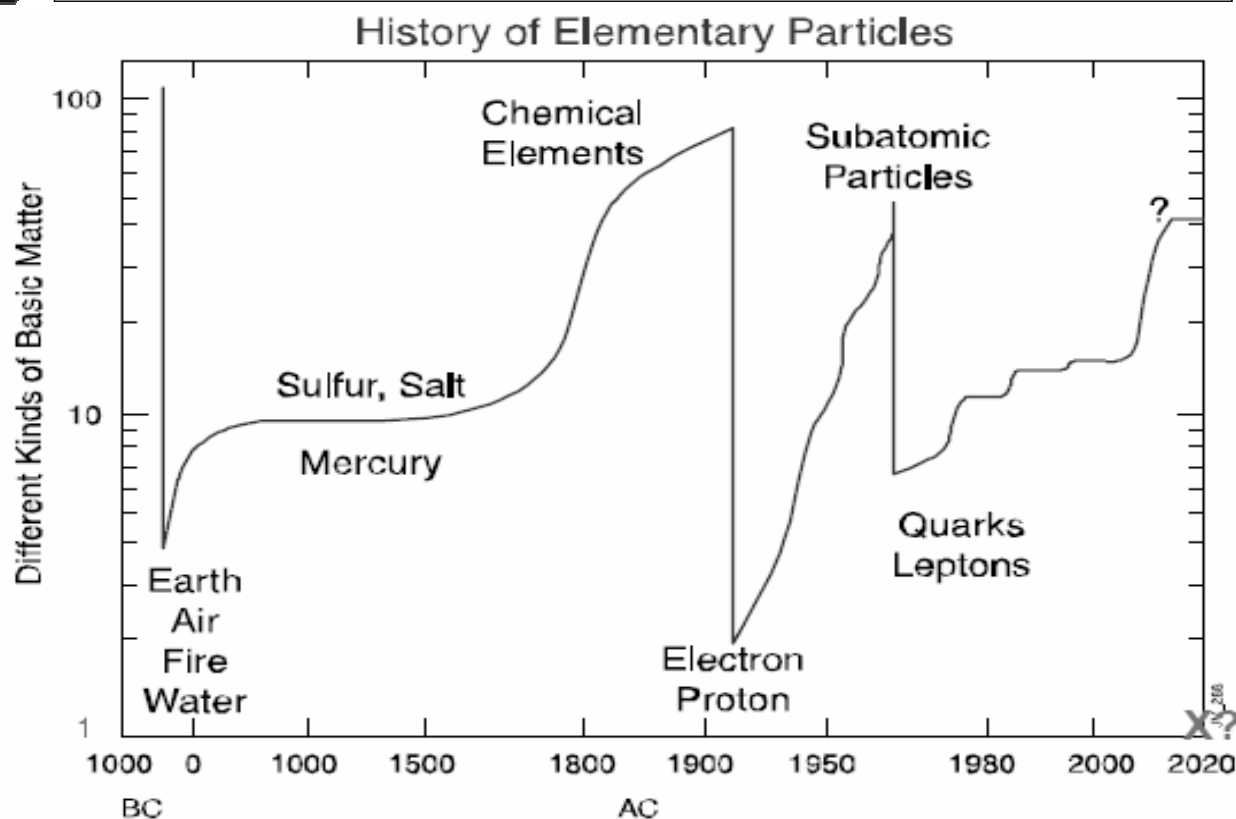
April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

3



"elementar" als Fkt. der Zeit



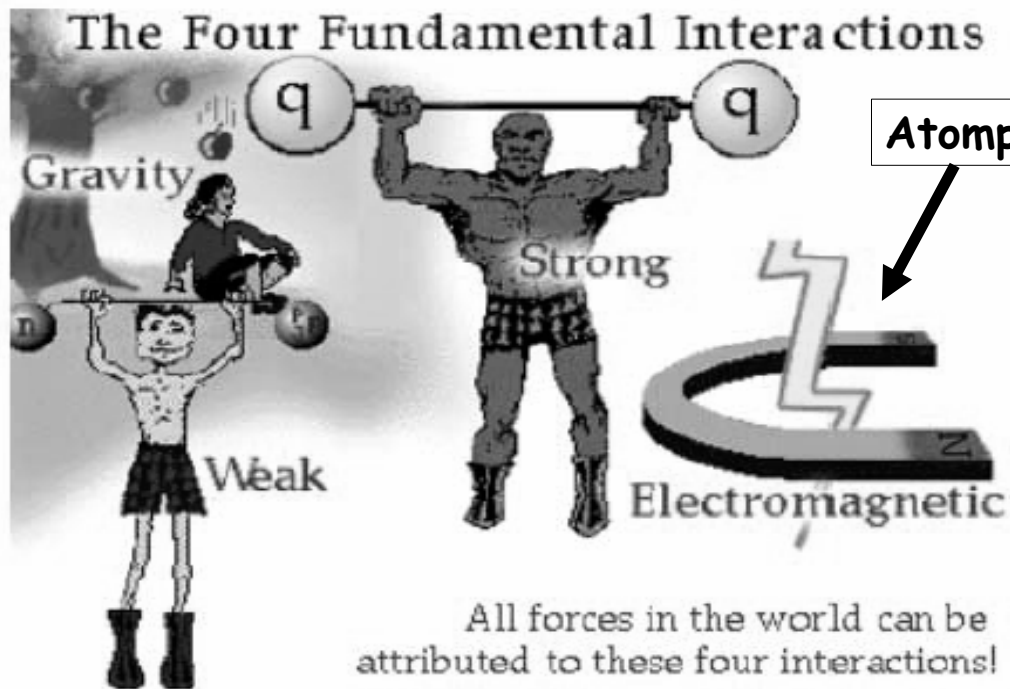
April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

4



Die elementaren Wechselwirkungen



Atomphysik

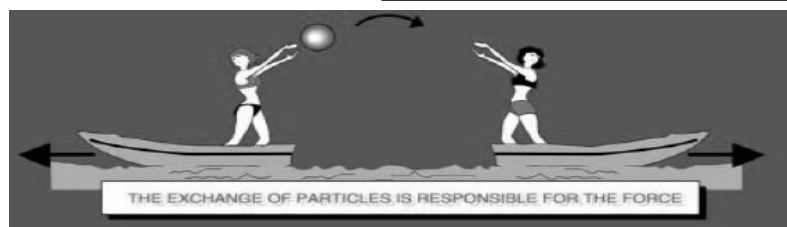
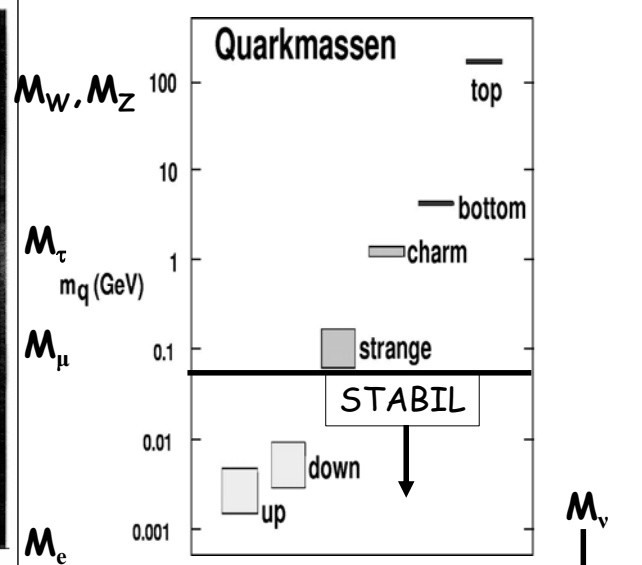
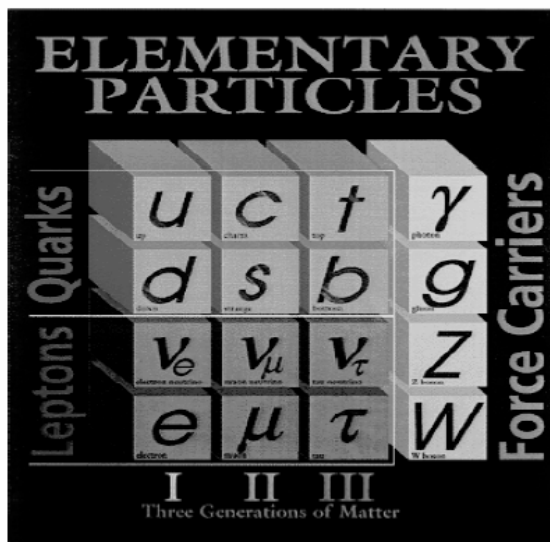
April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

5



Das Standard Modell der Teilchenphysik



April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

6



Warum braucht man ab dem 4. Semester Quantenmechanik?

Beobachtungen bedeuten Impulsänderungen am Objekt!
Z.B. wenn etwas optisch beobachtet wird, dann werden Photonen am Objekt gestreut.
Wenn das Objekt sehr klein ist, kann dies merkbare Unsicherheiten im Ort und Impuls des Objekts verursachen.

ES GIBT EINE UNTERE GRENZE AN DIE GENAUIGKEIT WOMIT MAN x und p beobachten kann!
(ausgedrückt durch Heisenbergsche Unschärfe-Relation $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$ ($\hbar = h/2\pi$ mit h = Plancksche Konstante der QM))
Folge: man kann x und p NICHT GLEICHZEITIG genau bestimmen, denn wenn x sehr genau bestimmt wird, dann gilt $\Delta p \geq \hbar / \Delta x$ sehr gross. M.a.W. Δx sehr klein verlangt viele Photonen, die Δp sehr gross machen.

Atome sind sehr kleine Objekte, wo Quanteneffekte eine SEHR GROSSE ROLLE spielen!



Weitere Extravaganzen der QM

Der Unterschied zwischen Teilchen und Welle verschwindet im Quantumbereich, d.h.

Elektronen haben Wellencharakter

Wellenlänge eines Elektrons hängt vom Impuls ab:

$$2\pi\lambda = h / p \quad (\text{de Broglie Beziehung})$$

Beispiel: statt ein Lichtmikroskop verwendet man ein Elektronenmikroskop, das eine viel kleinere Wellenlänge und dementsprechend höhere Auflösung hat

Photonen haben Teilchencharakter (sind "quantisiert")

Masse eines Photons gegeben durch: $E = h\nu = mc^2$
(Beispiel: Photoeffekt, Impulse der Photonen auf Elektronen übertragen und somit wird Licht in Strom umgewandelt (digitale Kamera, Photomultiplier,...))



Weitere Extravaganzen der QM

Wenn Teilchen Wellencharakter haben, sind sie NICHT lokalisiert. Daher kann man nur eine AUFENTHALTSWAHRSCHEINLICHKEIT für einen Bestimmten Ort angeben.

Diese Aufenthaltswahrscheinlichkeit wird bestimmt durch $|\Psi|^2$, wobei Ψ die sogenannte Wellenfkt. ist.

Für stabile Bahnen der Elektronen müssen die Wellenfkt. stehende Wellen entsprechen, z.B.

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

Solche Randbedingungen bestimmen erlaubte Bahnen und führen zu "Quantenzahlen" (in diesem Fall n), die die Energie-Niveaus bestimmen.



Klassische Mechanik und Quantenmechanik

	k l e i n $\Rightarrow$	
s	KLASSISCHE MECHANIK	QUANTENMECHANIK
c	$F = ma$	$i\hbar\partial_t\psi = H\psi$
h		
n	SPEZ. RELATIVITÄTSTHEORIE	RELAT. QUANTENMECHANIK
e	$x' = \gamma(x + vt)$	Klein-Gordon-Gln.
l	$t' = \gamma(t + vx/c^2)$	Dirac-Gln.
l	$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} ; \beta = \frac{v}{c}$	Proca-Gln.
↓		und QUANTENFELDTHEORIE
		Symmetrien
		Eichtheorien



Literatur

Literaturangaben

1. Haken-Wolf: Atom und Quantenphysik (Springer)
2. Mayer-Kuckuck: Atomphysik (Teubner)
3. Hänsel+Neumann: Physik (Band III):
Atome, Atomkerne, Elementarteilchen

Haken-Wolf behandelt AP +QM in gleicher Notation. Gleichzeitig ein Kapitel über Molekülphysik. Daher wird sich die Vorlesung an Haken-Wolf orientieren.

Zusätzliche Angaben:

4. Alonso+Finn: Quantenphysik und Statistische Physik
(übersetzt aus Fundamental Univ. Phys., Vol III)
5. D. Griffiths: Introduction to QM
Von Griffiths auch: (kein VL.-Stoff, aber ausgezeichnet)
Introduction to Electrodynamics
Introduction to Elementary Particle Physics



Überblick der Vorlesung

- | | |
|--|--|
| <ol style="list-style-type: none">1. Experimentelle Grundlagen der Atomphysik
Masse und Größe der Atome
Struktur der Atome
Rutherfordstreuung
Schwarzkörperstrahlung
Bohrsche Postulate
Photoeffekt, Comptoneffekt2. Elemente der Quantenmechanik
Wahrscheinlichkeitsdeutung in der QM
Heisenbergsche Unsicherheitsrelation
Schrödingergleichung3. Das Wasserstoffatom
Wellenfkt. des H-Atoms aus der Schrödingergleichung
Energiezustände des Wasserstoffatoms
Bahn- und Spinmagnetismus,
Stern-Gerlach Versuch
Spin-Bahnkopplung, Feinstruktur
Kernspin, Hyperfeinstruktur | <ol style="list-style-type: none">4. Atome im magnetischen und elektrischen Feld
Zeeman-Effekt
Paschen-Back-Effekt
Spinresonanz
Stark-Effekt
Lamb-shift5. Mehrelektronensysteme
Heliumatom
Kopplung von Drehimpulsen
Periodensystem
Schalenstruktur
Röntgenstrahlung
Laser
Maser6. Molekülphysik
Molekülbindungen
Molekülspektroskopie |
|--|--|



Themen der einzelnen Vorlesungen

1. Einführung,
2. Größe und Masse der Atome
3. Rutherfordstreuung -> Atomstruktur
4. Das Photon (als Teilchen) -> Photoeffekt, Comptoneffekt, Gravitationseffekte
5. Temperaturstrahlung -> Plancksche Strahlungsformel
6. Das Elektron (als Welle)
7. Heisenbergsche Unsicherheitsrelation, Wahrscheinlichkeit in QM
8. Bohrsche Atommodell
9. Schrödingergleichung
10. Lösung der Schrödingergleichung
11. Der harmonische Oszillator
12. Das Wasserstoffatom
13. Energieniveaus des Wasserstoffatoms
14. Spin- und Bahnmagnetismus
15. Atome im Magnetfeld und elektrischen Feld
16. Spinresonanz, Paschen-Back-Effekt
17. Mehrelektronensystem
18. Kopplung von Drehimpulsen
19. Röntgenstrahlung
20. Pauli-Prinzip, Periodensystem
21. Laser und Maser
22. Moleküle
23. Molekülbindungen
24. Vielatomige Moleküle
25. Klausur

April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

13



Historischer Überblick

Proust, Dalton, Mendelejeff, Gay-Lussac, Avogadro:
Atomistik der Materie aus chemischen Reaktionen.
⇒ Periodisches System der Elemente

Clausius, Boltzmann:
Atomistik der Wärme ⇒ kinetische Gastheorie.

1833 Faraday: Atomistik der Elektrizität aus Elektrolyse:
abgeschiedene Menge $\propto$ Ladung, d.h. wenn Menge quantisiert in Atomen,
muss auch die Ladung quantisiert sein und die "Atome" der Elektrizität
(später sind es die Elektronen) sind mit Atomen der Materie verkoppelt

1900 Planck: Atomistik der Energie aus Hohlraumstrahlung
⇒ Energie harmonischer Oszillatoren gequantelt: $E=h\nu$

Kirchhoff, Bunsen, Balmer: optische Spektrallinien
charakteristisch für jedes Element

1911 Rutherford: Atommasse konzentriert im Kern
1913 Bohr: Atommodell mit quantisierten Energien

De Broglie, Born, Heisenberg, Schrödinger, Pauli: QM der Atome

April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

14



Begriffe aus der Chemie

Atomgewicht = relative Atommasse A_r = Gewicht eines Atoms
in atomaren Einheiten (u)

1 u = gewicht eines Protons = 1/12 der Masse von $^{12}_6\text{C}$

$^{12}_6\text{C}$ hat $A_r=12$, d.h. 12 Nukleonen,
davon 6 Protonen (Kernladungszahl $Z=6$)

daher $A_r-Z=6$ Neutronen

$^{13}_6\text{C}$ hat 6 Protonen + 7 Neutronen / "Isotop",
gleicher Kernladung und daher gleiche Anzahl der Elektronen
/ gleiche chemische Eigenschaften

1 u = $1,6605655 \pm 0,0000086 \cdot 10^{-27}$ kg

$m_e = m_p/1836$, d.h. Masse der Elektronen (m_e) vernachlässigbar

Stoffmenge:

1 Mol eines Stoffes ist so viel Gramm eines Stoffes, wie das relative
Atom-oder Molekülgewicht beträgt

z.B. 1 Mol ^{12}C sind 12g

1 Mol H_2O sind $2 \cdot 12 = 18$ g ($^{16}_8\text{O}$)

1 Mol einer Substanz enthält jeweils die gleiche Anzahl N_A (oder N_L)
von Atomen oder Molekülen (A = Avogadro, L = Loschmidt, $N_L=6,0 \cdot 10^{23}/\text{Mol}$)

1 Mol Gas = 22,4 Liter unter Normalbedingungen (1 bar, 273 K)



Abschätzung von N_A

- Kombination der Faraday-Konstante Q_F und der elektrischen Elementarladung e
- Q_F ist die elektrische Ladung zum Abscheiden von 1 Mol bei der Elektrolyse,
 $Q_F = 96\,485,309(29) \text{ C mol}^{-1} \Rightarrow N_A = Q_F/e$
- e ist die elektrische Elementarladung
 $= 1,602\,177\,33(49) \cdot 10^{-19} \text{ C}$
(heute präzise aus Quanten-Effekte)
- $N_A = Q_F/e = 6,022\,1367(36) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$



Bestimmung der Avogadrozahl

Z.B. aus der Elektrolyse: $\text{CuSO}_4 \Rightarrow \text{Cu}^{++} + \text{SO}_4^{--}$

Für die Abscheidung eines Mols einer einwertigen Substanz braucht man 1 Faraday = 96458 [As]

$Q_F = \int I dt = 2 F$, für ein Mol Cu = 63,5 g

abgeschiedene Masse auf die Elektrode. $N_A = Q_F / e$

Aus N_A kann man die Masse eines Atoms berechnen $m_{\text{Atom}} = A_r / N_A$

1 u = 1/12 der Masse eines C-Atoms $\approx$ Masse eines Protons =

$1,6605655 \pm 0,0000086 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 931,478 \text{ MeV}/c^2$ (aus $E=mc^2$)

Andere Methoden, um N_A zu bestimmen: aus der Gaskonstanten R in $PV = nRT$ und der Boltzmannkonstanten $k = R/N_A$

Die Boltzmannkonstante k kann man z.B. aus der Dichteverteilung kleiner Schwebeteilchen in einer Suspension bestimmen, die im thermischen Gleichgewicht unter gleichzeitiger Wirkung von Schwere und Brownscher Molekularbewegung durch die Gleichung: $n_h = n_0 e^{-mgh/kT}$ gegeben ist. Dies ist ein Spezialfall der berühmten Boltzmann-Verteilung, die angibt wie die Teilchen über die möglichen Energieniveaus (Höhen) verteilt sind.

April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



Frage: wo gibt es mehr Moleküle: in einer Flasche Sprudel oder in der Luft im Hörsaal?

April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

18

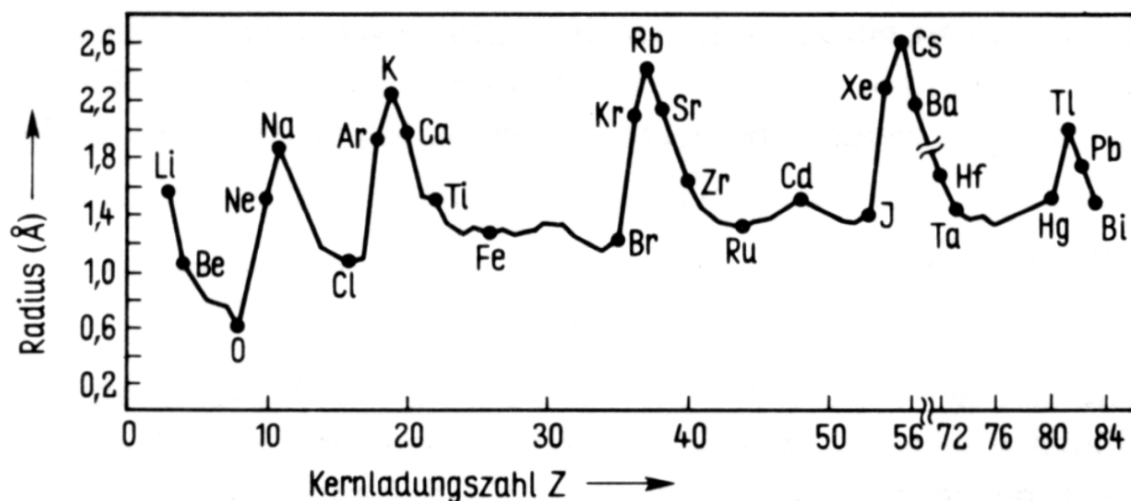


Wie groß sind Atome?

- Abschätzung des Atomvolumens aus der rel. Atommasse A_r , der Dichte ρ und der Avogadro-Konstante N_A
- **Dichte:** $\rho = (m/V)$,
- $V = m/\rho = N_A (4/3) \cdot \pi \cdot R^3 = A_r/\rho$ für 1 Mol
- **Natrium:** $\rho = 0,97 \text{ g cm}^{-3}$; $A_r = 22,98 \text{ g mol}^{-1}$
- **Radius:** $R \sim 2 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2 \text{ \AA}$ (Angstrom)



Systematik der Atomradien



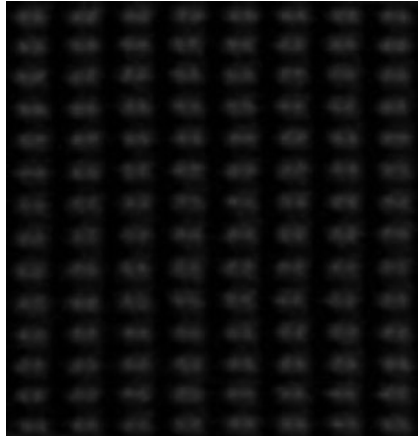
- Alle Atome haben „fast gleiche“ Radien
- Unterschiede korrelieren mit ihrer Stellung im Periodensystem



Kann man Atome sehen?

Ein Lichtmikroskop hat eine Auflösung $d = \lambda/n \sin\theta \approx O(\lambda)$,
Für Licht mit $\lambda \approx 5000 \text{ \AA} = 500\text{nm}$ und Atome $\gg 1\text{-}100 \text{ \AA}$ bedeutet das:
mit Licht kann man keine Atome auflösen

JEDOCH: Röntgenlicht hat $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$. Im Prinzip ok, jedoch
praktische Auflösung $\gg 100 \text{ \AA}$, weil keine Linsen für Röntgen-
Strahlung existieren ($n \approx 1$ für alle Materialien),
Elektronenmikroskop: $\lambda \approx 0,04 \text{ \AA}$, Reale Auflösung $\approx 1 \text{ \AA}$



"Looking down on a silicon crystal, we can see atoms that are only 0.78 angstroms apart, which is the first unequivocal proof that we're getting subangstrom resolution. The same image shows that we're getting resolution in the 0.6 angstrom range," said ORNL Condensed Matter Sciences Division researcher Stephen Pennycook. (Science, 2004)

April 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

21



Elementarladung nach Millikan (1913)

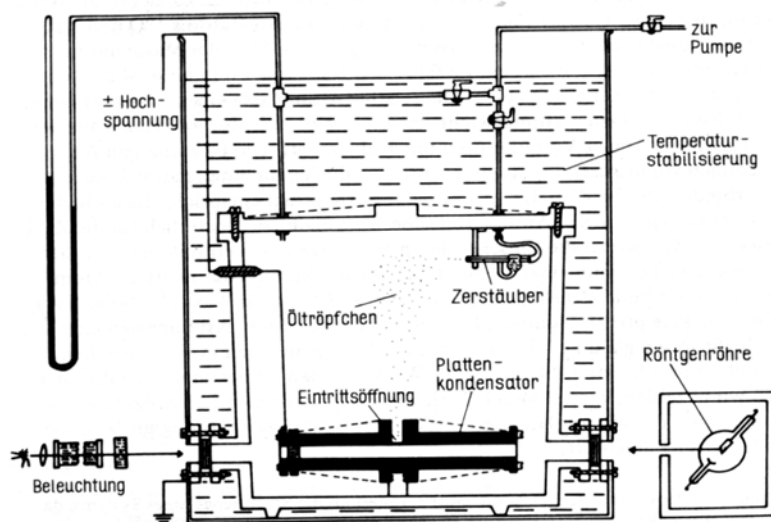
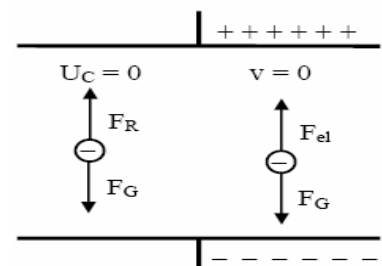
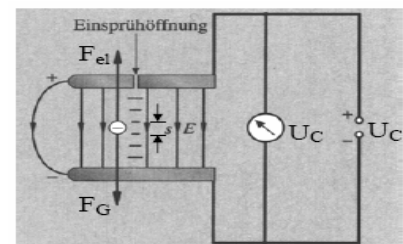


Fig. 3 Anordnung des Millikan-Versuchs (nach Phys. Rev. 2 (1913) 109)



Problem: wie groß ist Masse m in F_G ? m nicht
direkt messbar, durch Sinkgeschwindigkeit
in Luft ohne E-Feld zu bestimmen
(Stokesches Reibungsgesetz)

$$\begin{aligned}
 F_{el} &= F_G \\
 \Rightarrow q \cdot E &= F_G \\
 \Rightarrow q \cdot \frac{U_C}{d} &= F_G
 \end{aligned}$$

April 12, 2005

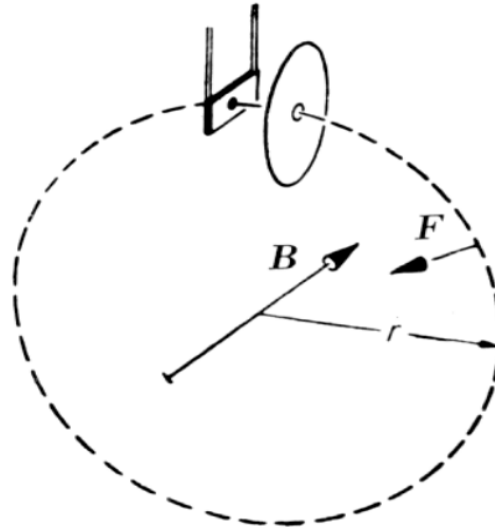
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

22



Spezifische Elektronenladung

- Zentrifugalkraft = Lorentzkraft
- $(m \cdot v^2)/r = e \cdot v \cdot B$ (1)
- Beschleunigungsarbeit = kinetische Energie
- $e \cdot U = (1/2) \cdot m \cdot v^2$ (2)
- Kombination (1) u. (2)
- $(e/m) = (2 \cdot U)/(r^2 \cdot B^2)$



$$e/m = 1,758\,819\,62(53) \cdot 10^{11} \text{ C kg}^{-1}$$



Atom- und Elektronenmasse

- **Atommasse:**
- Atommassenkonstante $m_u = m(^{12}\text{C})/N_A$
- $m_u = 0,001 \text{ kg} / N_A = 1,660\,5402(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
- **Elektronenmasse:**
- $m_e = e/(e/m_e) = 9,109\,3897(54) \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
- $m_u/m_e = 1\,838,683\,662(40)$
- **Atommasse/Elektronenmasse $\sim 2000/1$**



Zum Mitnehmen

- **Elementarladungen** kann man mit Hilfe von optisch sichtbaren Objekten (Tröpfchen) bestimmen.
- Aus der Faraday-Konstante und der Elementarladung erhält man eine Schätzung der Avogadro -Konstante.
- Relative Atommasse, Dichte und Avogadro Konstante liefern eine Abschätzung für die Atomgröße.
- Durch Ablenkung von Teilchen in magnetischen Feldern kann man e/m bestimmen.
- Kombination der Ergebnisse liefert m_e, m_U
- und das Verhältnis: $m_e/m_U \sim 1/2000$.



Vorlesung 2:

Roter Faden:

Größe der Atome
Massenspektroskopie
Atomstruktur aus
Rutherfordstreuung

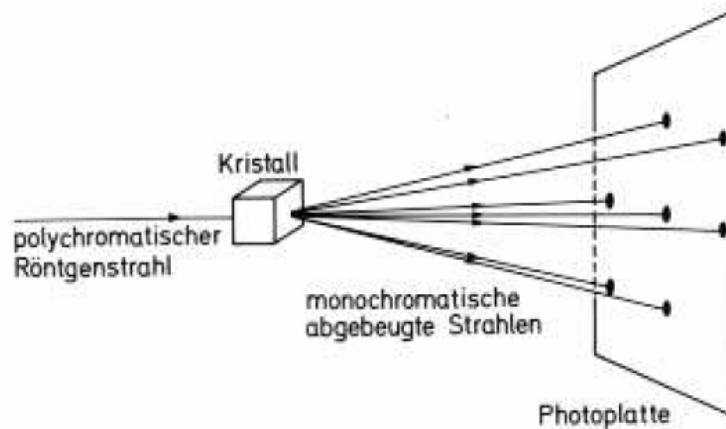
Skripte und Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>



Größe der Atome aus Röntgenbeugung

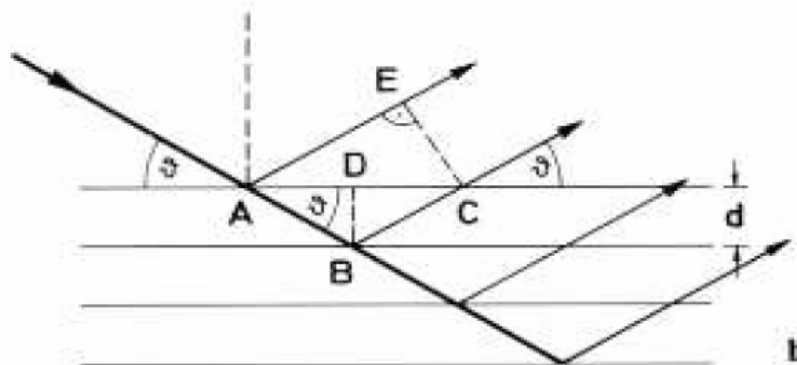
Berühmter Versuch von v. Laue, Friedrich, Knipping:



Helle Punkte / konstruktive Interferenz für $2d \sin\theta = n\lambda$
 θ = Ablenkwinkel
 λ = Wellenlänge des gebeugten Strahls
 d = Gitterabstand der Netzebenen



Herleitung der Interferenzbedingung



Gangunterschied:

$$AB + BC - AE = 2AB - AE = 2 \frac{d}{\sin \theta} - 2 AD \cos \theta = \frac{2d}{\sin \theta} (1 - \cos^2 \theta) = 2d \sin \theta \equiv n\lambda$$



Weitere Streumethoden

1)

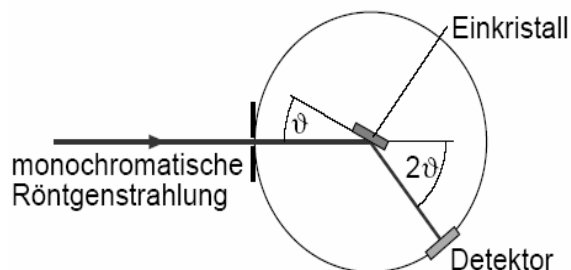
Braggsches Drehkristall-Verfahren mit monochromatischem Röntgenlicht; Interferenzwinkel bestimmt durch Drehen bis Maximum auftritt.

2.

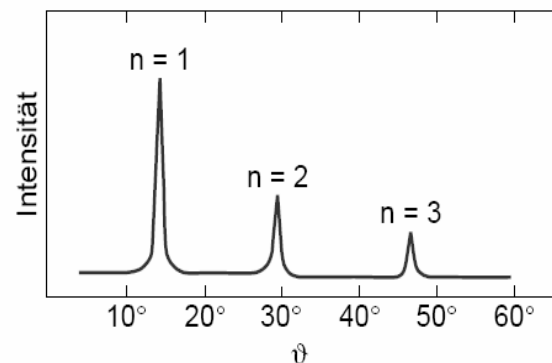
Debye-Scherrer-Verfahren: monochromatisches Röntgenlicht wird an einem Polykristall ("Pulver") gestreut; Punkte werden Kegel, da jede Netzebene in allen Orientierungen vorkommt. Die Ausdehnung der Atome ist groß im Vergleich zu *Wellenlänge*, d.h. keine Punkte, die streuen, sondern ausgedehnte Objekte



Braggsche Drehkristall-Verfahren



Schema einer Vorrichtung zur Aufnahme eines Röntgenspektrums nach dem Drehkristallverfahren

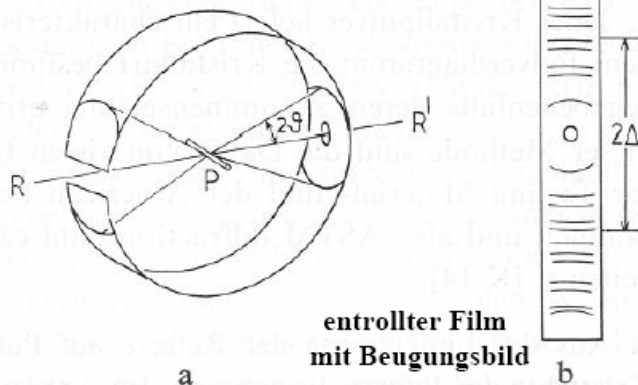


Röntgenspektrum nach dem Drehkristallverfahren



Das Pulververfahren wurde bereits von Debye und Scherrer 1916 eingeführt (**Debye-Scherrer Verfahren**). Bei diesem Verfahren besteht die Probe aus einem pulverförmigen kristallinen Material. Ist ein einzelnes Kristallit des Pulvers (zufällig) so orientiert, dass einer seiner Netzebenen einen geeigneten Winkel θ mit dem primären Röntgenstrahl einschließt (Erfüllung der Bragg'schen Bedingung), so kann ein entsprechender Reflex auftreten.

Schematische Anordnung zur Herstellung einer Pulveraufnahme

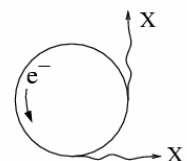


Alle weiteren Kristallite, die auch diese Bedingung erfüllen tragen zur Gesamtheit der Strahlenbündel bei. Die reflektierten Strahlen erzeugen dabei einen Strahlenkegel (Öffnungswinkel zur Strahlachse 2θ), der coaxial zum einfallenden Röntgenstrahl liegt. Das gemessene **Pulverdiagramm** zeigt die charakteristischen Debye-Scherrer Ringe bzw. Linien.



Strahlungstypen

1. Röntgenstrahlung, heute ganz überwiegend in Form von Synchrotronstrahlung aus Elektronen-Synchrotrons; Effektivität der Beugungsexperimente besser bei hohem Z



2. Neutronenstrahlen (z.B. Hochfluss-Reaktoren wie ILL Grenoble, München): Wechselwirkung mit Atomkernen; besonders interessant für leichte Atome wie Wasserstoff

Anwendungen:

Strukturanalyse von Kristallen, Flüssigkeiten, chemischen und biologischen Molekülen etc.



Massenspektroskopie

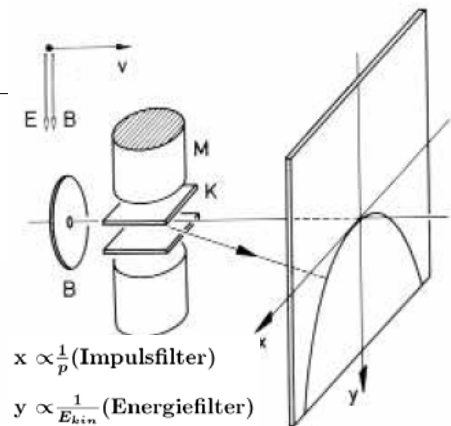
Methoden zur Trennung von Atomen mit unterschiedlichen Massen oder, genauer, unterschiedlichen e/m

1913 Parabelmethode von Thomson

- $\vec{F}_E = e\vec{E}$
- $\vec{F}_B = e\vec{v} \times \vec{B}$ (Lorentzkraft $\perp B$)

$$1. F_E = ma_y = m\ddot{y} = eE \rightarrow y = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} t^2 = \frac{eE}{2m} \frac{p^2}{v^2}$$

$$2. F_B = ma_x = m\ddot{x} = evB \rightarrow x = \frac{evB}{2m} t^2 = \frac{eB}{2m} \frac{t^2}{v}$$



Aus (1) und (2) v eliminieren $\rightarrow$

$$y = \frac{2E}{l^2 B^2} \frac{m}{l} x^2 \quad (= \text{Parabel unabhängig von } v!!)$$

Anwendung: Isotopentrennung, z.B. angereichertes oder depletiertes Uran



Struktur der Atome

Lenard:

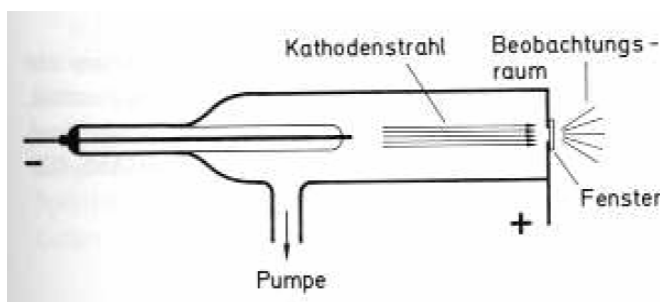
Elektronen haben Reichweite von einigen cm in Luft, aber sehr Energieabhängig.

Für schnelle Elektronen sind Atome 10^8 mal durchlässiger als für langsame Elektronen.

Heute wissen wir: schnelle Elektronen streuen nur am Kern, langsame an ganze Hülle (große Wellenlänge)

"Das Innere des Atoms ist so leer wie das Weltall."

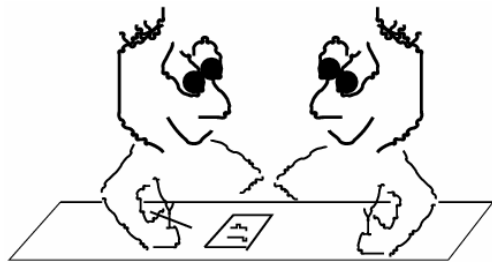
Denn wenn Atome für Elektronen undurchdringbar wären, würde Reichweite in Luft nur typische gaskinetische freie Weglänge von 10^{-5} cm betragen und würden Elektronen auch nicht Alu-Fenster von 10000 Atomschichten durchdringen können.



Lenard:

Elektronen erzeugt durch Gasentladungen.

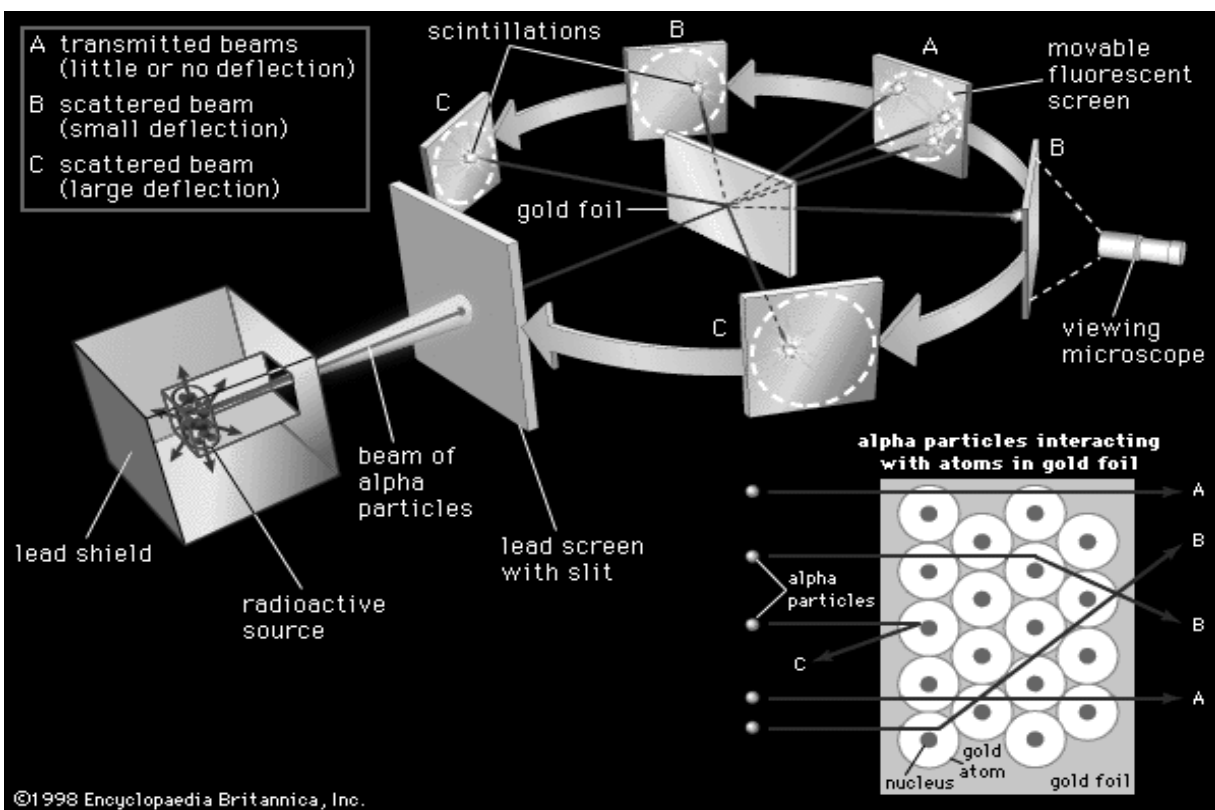
Glühelktrode noch nicht bekannt.



Frage: Wenn das Atom "leer" ist, was erwarten Sie für die Streuung von schweren Teilchen (wie z.B. α -Teilchen) an Atomen?



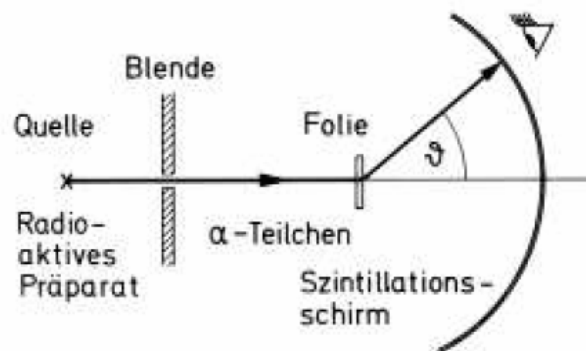
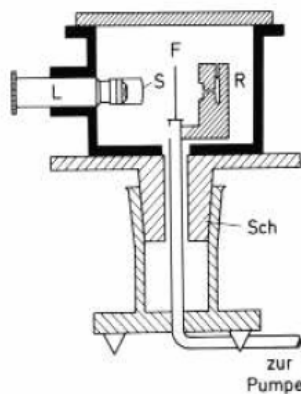
Kernstruktur aus "Rutherfordstreuung"





Kernstruktur aus "Rutherfordstreuung"

α -Teilchen (He-Kerne aus radioaktivem Präparat): Reichweite 3,5 cm in Luft bei $E = 5 \text{ MeV}$. (Geiger + Marsden, Studenten von Rutherford)

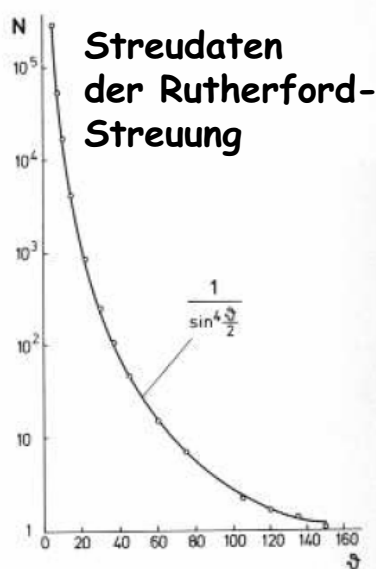


Mit S wird die Intensität der durchgelassenen Strahlung durch dünne Goldfolie als Funktion vom Ablenkungswinkel θ gemessen !
Meiste Teilchen fliegen durch, wie erwartet, wenn Atom "leer" ist.
Jedoch manchmal Rückstöße unter großen Winkeln:
"Gewehrkugel prallt an einem Plumpudding ab."



Winkelabhängigkeit der Rutherford-Streuung

Interpretation: Masse von Goldatom *schwerer* als Masse von ^4He Atom und diese Masse ist konzentriert in einem Kern mit einem Radius R von ca. 10^{-12} cm mit Ladung Ze.



Rutherford konnte zeigen, dass die $1/\sin^4(\theta/2)$ Abhängigkeit der Winkelverteilung gerade die Coulomb Streuung an einer punktförmigen Ladung entspricht.

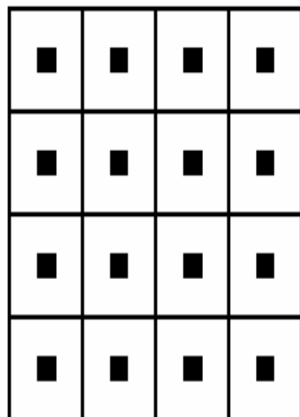
$$\text{Coulombkraft: } F_C = \frac{(Ze)(2e)}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Ze = Ladung des Kerns
 2e = Ladung des He-Atoms



Begriff Wirkungsquerschnitt

Es kommen N Teilchen pro cm^2 und Sekunde bei den modellhaft gezeichneten Atomen an. Wie groß ist die Rate, die hängenbleibt, wenn die N Teilchen nur mechanische Stöße machen?



Es sei:

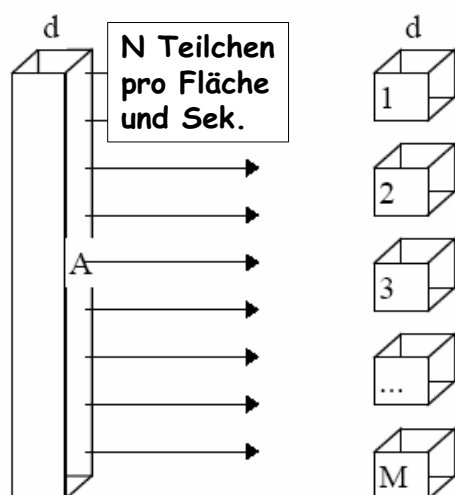
Kantenlänge der Atome: 10^{-10}m , Kantenlänge der Kerne: 10^{-14}m

$$\frac{\text{Widerstandsfläche}}{\text{Gesamtfläche}} = \frac{10^{-28}\text{m}^2}{10^{-20}\text{m}^2} = 10^{-8}$$

$$dN = 10^{-8} \cdot N \quad d\sigma = 10^{-8}\text{cm}^2. \quad \text{Was bedeutet dies anschaulich?}$$



Begriff Wirkungsquerschnitt



Wieviele Teilchen bleiben hängen?

Gesamtfläche: A

Effektive Widerstandsfläche: $M \cdot d^2$

Wid.fläche pro Gesamtfläche: $(M \cdot d^2 / A)$

Rate, die hängenbleibt: $dN = (M \cdot d^2 / A) \cdot N$

Gibt es n Würfel pro Volumen in der dünnen Schicht

$$\rightarrow dN = \frac{A \cdot \tau \cdot n \cdot d^2}{A} \cdot N = \tau \cdot n \cdot d^2 \cdot N \quad (1)$$

τ = Schichtdicke
 d^2 = Streufläche
 $M = A \tau n$ = Anzahl der Streuzentren



Streuung im kugelförmigen Coulombpotential

Bei Kugeln als Streuzentren nicht einfach Absorption oder Durchlass, sondern Streuwinkel Fkt. von Impaktparameter

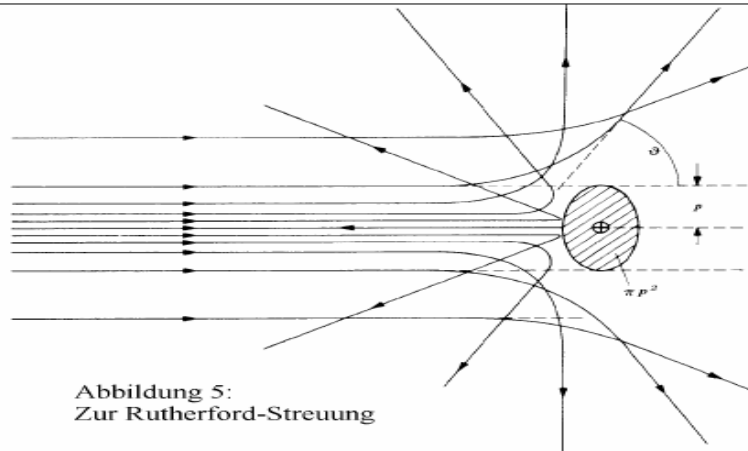


Abbildung 5:
Zur Rutherford-Streuung

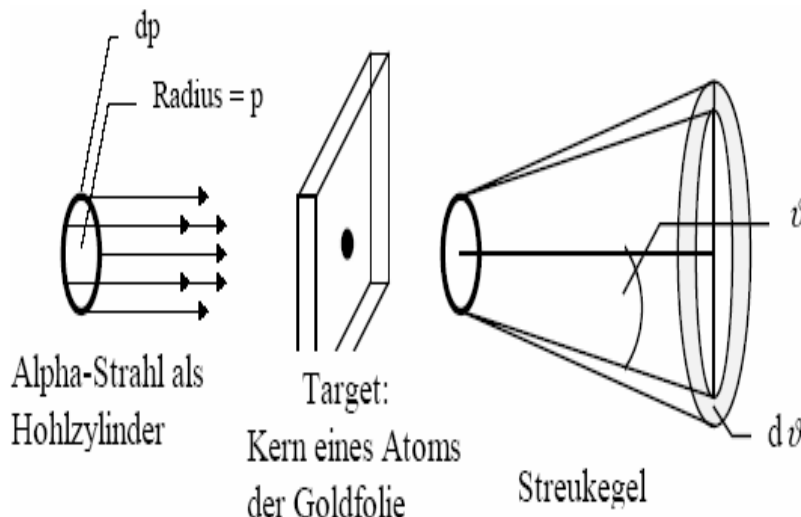
Beziehung zwischen Impaktparameter p und Streuwinkel ϑ :

Aus Kepler-Kegelschnitten und Flächensatz folgt (Herleitung nachher)

$$p = \frac{1}{2} r_{0\min} \cdot \cot \frac{\vartheta}{2} \quad (2)$$



Rutherford-Streuung: Alpha-Strahl wird an dünne Goldfolie gestreut



Teilchen aus dem Hohlzylinder mit $p < r < (p + dp)$ laufen in den Kegelmantel mit der Öffnung zwischen ϑ und $(\vartheta + d\vartheta)$. $p = p(\vartheta)$ regelt die Zahl der Teilchen in den Kegelmantel.

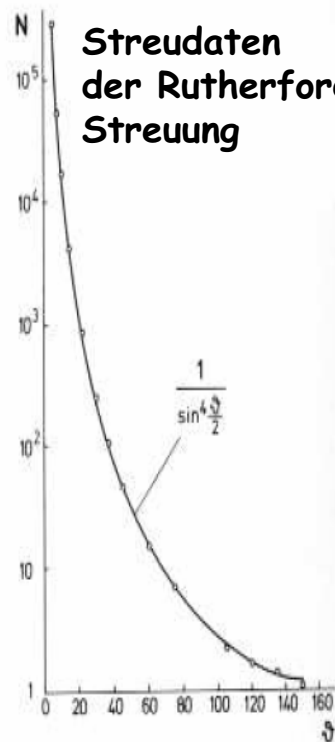
N ankommende Teilchen pro cm^2 und Sekunde mit Kernabstand zwischen p und $(p + dp)$, dN sind die Teilchen, die in den Kegelmantel laufen mit $d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta$

$$(3) \quad dN = 2\pi p \cdot dp \cdot \tau \cdot n \cdot N \quad n = \text{DICHTe der Streuzentren}$$



Winkelverteilung der Rutherfordstreuung

Streudaten der Rutherford-Streuung



Wir verwenden jetzt:

$$j = \frac{N}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{sowie} \quad \frac{dN}{j} = d\sigma = 2\pi p \cdot dp \cdot \tau \cdot n \quad \text{und} \quad \frac{dp}{d\vartheta} = \frac{1}{4} r_{0\min} \cdot \frac{-1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \quad (5) \quad (6) \text{ aus } (2)$$

und erhalten:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{p \cdot \tau \cdot n \cdot dp}{\sin^2 \vartheta d\vartheta} = \frac{n\tau}{16} r_{0\min}^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \quad (7)$$

Interpretation des Ergebnisses:

a) $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim Z^2$

Möglichkeit der Kernladungsbestimmung (vgl. S.6)

b) $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{E_\infty^2}$

Je energiereicher die Teilchen, desto kleiner der Wirkungsquerschnitt

c) $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}$

Vorwärtsstreuung eigentlich unendlich groß; Abnahme für wachsende ϑ ;

aber auch Rückwärtsstreuung möglich.

Abweichungen für hohe Energien der α -Teilchen (Anomale Rutherford-Streuung (ARS)) durch "Berührung" der Kernpotentiale, also nicht nur Coulombpotential $\Rightarrow$ Kernradius!

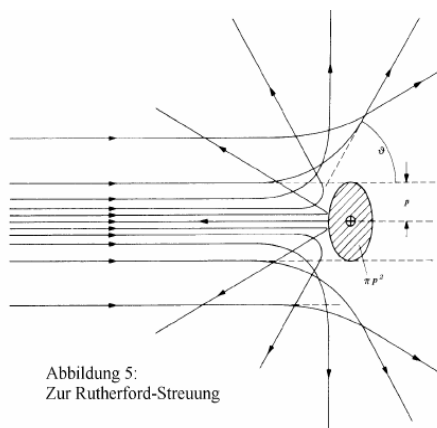
April 14, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

18



Minimaler Abstand vom Kern



Abstoßung: $E(\alpha) > 0 \Leftrightarrow$ Hyperbel

$$E(\alpha) = \frac{1}{2} m_\alpha v_\infty^2 =$$

$$\frac{1}{2} m_\alpha v_0^2 + \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$$

(Peripheldurchgang: r_0 ist minimaler Abstand vom Kern)

Minimaler Abstand wenn $E_{\text{kin}}=0$

$$r_{0\min} = \frac{4Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v_\infty^2}$$

Nukleonen werden im Kern durch das anziehende Potential V_k der Kernkräfte gebunden. Da V_k scharf begrenzt ist, kann man aus der kinetischen Schwellenenergie W_S , bei der der Übergang der normalen zur ARS erfolgt, den Kernradius bestimmen.

Aus $\frac{2e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 R_K} = W_S \rightarrow R_K$.

Aus Messungen an vielen Kernen $R_K = (0,75 + 1,26 M^{\frac{1}{3}}) 10^{-15} \text{ cm}$,
 M = Massenzahl des Korns, daher $M \propto R^3 \propto V$;
 $\rightarrow$ Volumens des Korns $\propto$ Anzahl der Nukleonen

April 14, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

19



Beispiel

$$r_{0\min} = \frac{4Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha v_\infty^2} \quad Z\text{-abhängig}$$

$$r_{0\min} \cdot v_\infty^2 = \text{konst.}$$

$r_{0\min}$ ist eine obere Grenze für den Kernradius

Beispiel: Streuung von α -Strahlen aus RaC an Goldfolie:

$$m_\alpha = 6,69 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \quad \epsilon_0 = 8,9 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C} \cdot \text{b}}{\text{V} \cdot \text{m}}, \quad v_\infty = 1,9 \cdot 10^7 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad Z(\text{Gold}) = 79$$

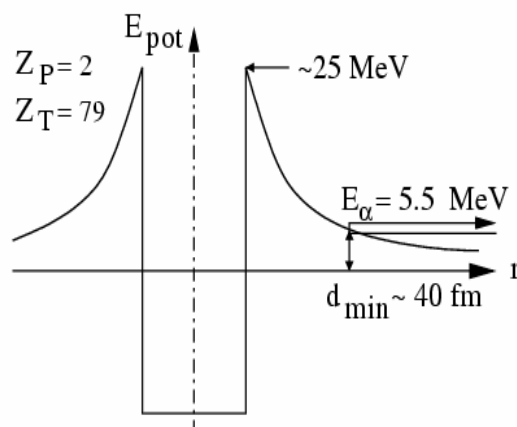
$$r_{0\min} \approx 3 \cdot 10^{-14} \text{ m} = 30 \text{ fm}$$



Gründe für Erfolg dieser klassischen Experimente

- $M_\alpha \gg M_{el}$ (10^4): Ablenkung durch Streuung an Elektronen vernachlässigbar; nur Streuung durch den positiv geladenen Atomkern
- reine „Coulomb-Streuung“ am Atomkern $\Rightarrow$ zentrales Potential. Die Ausdehnung des Kernes ist nicht relevant, weil der minimale Abstand $d_{\min} > R_{\text{Kern}}$ ist (s.u.): Das Potential einer sphärisch symmetrischen Ladungsverteilung ist außerhalb gleich dem einer Punktladung.

Ladung/Masse für Projektil $Z_P e/M_P$, für Targetkern $Z_T e/M_T$



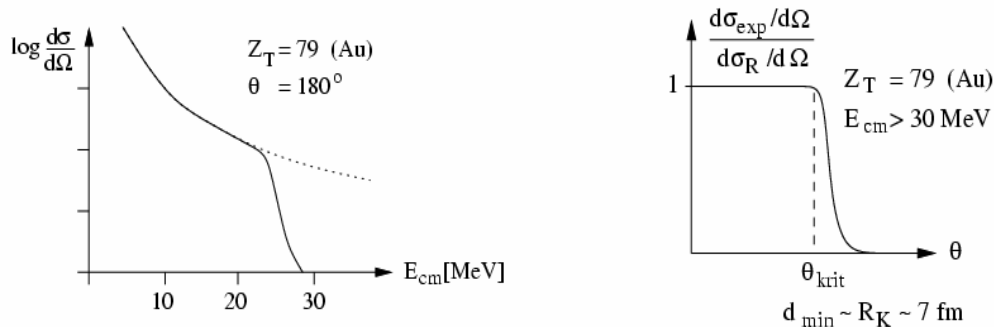
Streupotential:

$$E_{\text{pot}}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_P Z_T e^2}{r}$$



Zusatz-Bemerkungen

- Divergenz von $d\sigma_R/d\Omega$ für kleine θ nur mathematisch. Ist b vergleichbar mit Atomdurchmesser: Kernladung zunehmend abgeschirmt durch Elektronen. Im Grenzfall $b > \text{Atomradius}$ geht die streuende Ladung $Z_{T\text{eff}} \rightarrow 0$. Damit bleibt $d\sigma_R/d\Omega$ auch bei kleinen θ endlich.
- Bei α -Energien > 20 MeV (für $Z > 82$) wird $d_{\min} < R_{\text{Kern}}$. Zusätzlich zu den elektrostatischen Kräften treten dann kurzreichweitige Kernkräfte auf, die zu einer Veränderung der Ablenkfunktion $\theta(b)$ führen. Insbesondere kann das α -Teilchen vom Kern absorbiert werden. Dies führt zu einer drastischen Reduktion von $d\sigma_R/d\Omega$ gegenüber der Rutherfordstreuung.



Aus der Abweichung der gemessenen Streuverteilung kann der Radius R_K des Atomkerns abgeschätzt werden. Man erhält daraus, dass die Nukleonen den Kern mit einer konstanten Dichte ausfüllen. Es gilt:

$$R_K \approx r_0 A^{1/3}$$



Und Wellencharakter der Teilchen spielt bei diesen Energien und Abständen noch keine Rolle!

- de-Broglie-Wellenlänge des α -Teilchens

$$\lambda = \frac{h}{mv} \approx 6 \text{ fm (5.5 MeV } \alpha\text{-Energie)} \leq \text{Kerndurchmesser} \ll \text{Atomdurchmesser}$$

⇒ Das α -Teilchen ist ein gut lokalisiertes Wellenpaket, die „klassische Bahn“ ist eine sinnvolle Vorstellung. Ein reines $1/r$ -Potential liefert in jedem Fall für klassische und quantenmechanische Behandlung das gleiche Resultat (sonst wäre Behandlung mit Schrödingergleichung notwendig).



GRÖSSENVERHÄLTNISSE

PROTONEN SIND 100000x KLEINER
ALS ATOME (1911)

Atomkern : Atomhülle

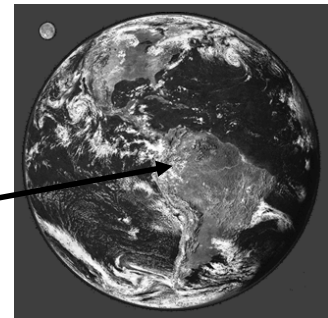
= Knopf : Innenstadt



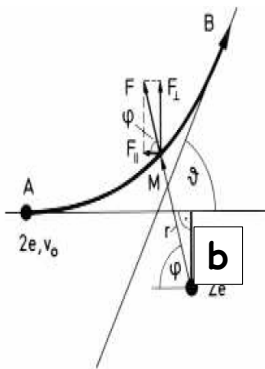
QUARKS, LEPTONEN SIND MIND. 10000x KLEINER
ALS PROTONEN (1998)

Quark : Atomhülle

< Knopf : Erde



Herleitung Beziehung zwischen Streuwinkel und Impaktparameter



1. Streuwinkel θ hängt vom Impaktparameter b ab

$$2. F_{\perp} = F \sin \varphi \quad (1); \quad F_{\parallel} = F \cos \varphi \quad (2); \quad F = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3);$$

r variiert während der W (Integrieren über die Zeit, um θ zu bekommen)

3. Drehimpulserhaltung (Radialkraft, d.h. $\vec{F} \times \vec{r} = F \cdot r \cdot \sin \varphi = 0$);

$$\Rightarrow \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \text{ in } \left\{ \begin{array}{l} A: \quad mv_0 b = \\ B: \quad mv_B r = (v = \dot{\varphi} r) = m \dot{\varphi} r^2 \Rightarrow \frac{1}{r^2} = \frac{\dot{\varphi}}{v_0 b} \end{array} \right\} (4)$$



Herleitung Beziehung zwischen Streuwinkel und Impaktparameter

4. Senkrechtbewegung: $F_{\perp} = m \frac{dv_{\perp}}{dt} = [(1) + (3)] = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sin \varphi$ (5)

(4) in (5) : mit $k = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$ und integrieren über die Zeit:

$$\int_{t_A}^{t_C} \frac{dv_{\perp}}{dt} dt = \frac{k}{mv_0 b} \int_A^C \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} dt \quad (6)$$

A bei $-\infty$: $v_{\perp} = 0$, $\varphi = 0$

C bei $+\infty$: $v = v_0$ (Energieerhaltung)

Aus (6): $\int_0^{v_0 \sin \theta} dv_{\perp} = \frac{k}{mv_0 b} \int_0^{\pi-\theta} \sin \varphi d\varphi$ (7)

oder $v_0 \sin \theta = \frac{k}{mv_0 b} (1 + \cos \theta)$ (8)

$$\frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \equiv \cot \frac{\theta}{2} \quad (9)$$

Aus (8) + (9):

$$b = \frac{k}{mv_0^2} \cot \frac{\theta}{2}$$

(= Beziehung zwischen Impaktparameter und θ durch $\int F dt$.)



Zum Mitnehmen

Atomgröße aus Röntgenbeugung: ca. $1 \text{ \AA}$ (Ängström = 10^{-10} m)
 Dies bedeutet, dass Quanteneffekte eine Rolle spielen, da
 mit $\Delta p \approx p = mv$ und $\Delta x \approx x$ gilt: ($v/c \approx 0.01$ für Elektronen in Atomen)
 $\Delta p \cdot \Delta x = 10^{-30} \text{ kg} \cdot 3 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot 10^{-10} \text{ m} = 10^{-34} \text{ Js}$ ist vergleichbar
 mit der Planck Konstante $h = 10^{-34} \text{ Js}$.

Rutherford-Streuung: Kern-Kernstreuung zeigt dass
 Kerne SEHR klein sind im Vergleich zu Atomen!
 Kernradius / Atomradius = Erbse / Kölner Dom



Vorlesung 2:

Roter Faden:

Größe der Atome
Massenspektroskopie
Atomstruktur aus
Rutherfordstreuung

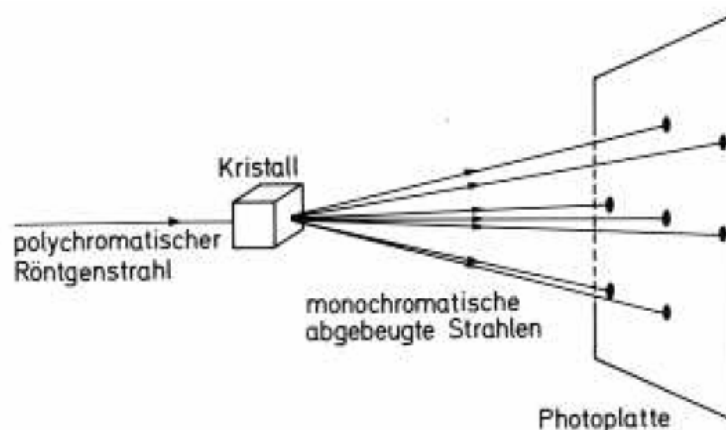
Skripte und Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>



Größe der Atome aus Röntgenbeugung

Berühmter Versuch von v. Laue, Friedrich, Knipping:



Helle Punkte / konstruktive Interferenz für $2d \sin\theta = n\lambda$

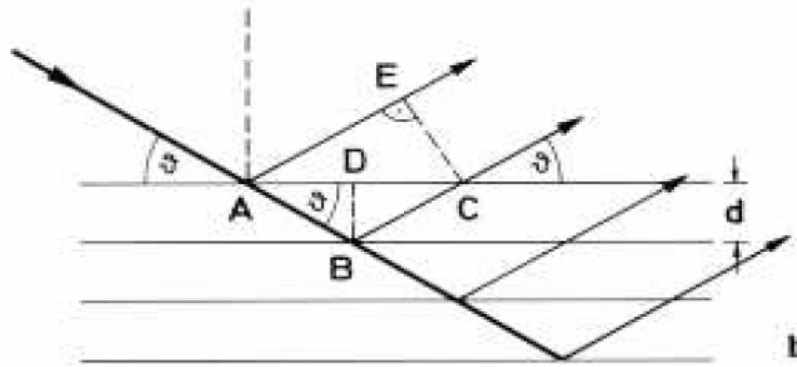
θ = Ablenkwinkel

λ = Wellenlänge des gebeugten Strahls

d = Gitterabstand der Netzebenen



Herleitung der Interferenzbedingung



Gangunterschied:

$$AB + BC - AE = 2AB - AE = 2 \frac{d}{\sin \theta} - 2 AD \cos \theta = \frac{2d}{\sin \theta} (1 - \cos^2 \theta) = 2d \sin \theta \equiv n\lambda$$



Weitere Streumethoden

1)

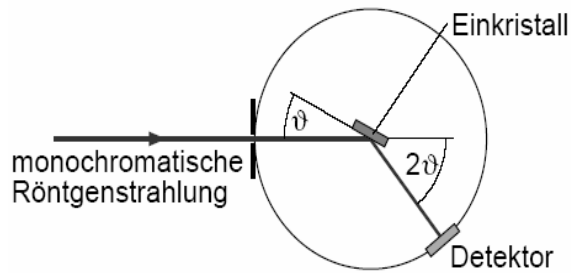
Braggsches Drehkristall-Verfahren mit monochromatischem Röntgenlicht; Interferenzwinkel bestimmt durch Drehen bis Maximum auftritt.

2.

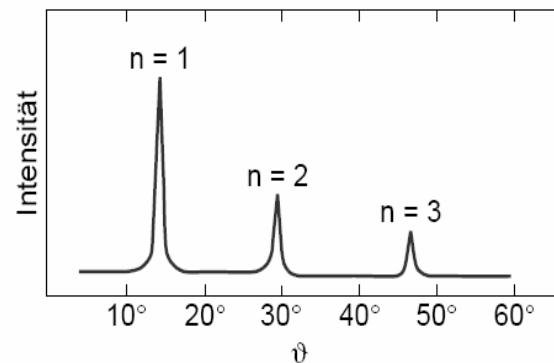
Debye-Scherrer-Verfahren: monochromatisches Röntgenlicht wird an einem Polykristall ("Pulver") gestreut; Punkte werden Kegel, da jede Netzebene in allen Orientierungen vorkommt. Die Ausdehnung der Atome ist groß im Vergleich zu *Wellenlänge*, d.h. keine Punkte, die streuen, sondern ausgedehnte Objekte



Bragg'sche Drehkristall-Verfahren



Schema einer Vorrichtung zur Aufnahme eines Röntgenspektrums nach dem Drehkristallverfahren

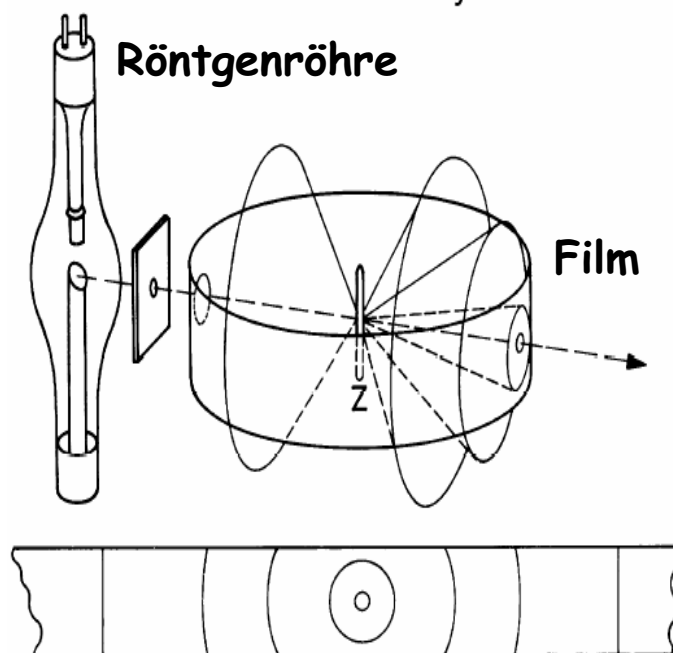


Röntgenspektrum nach dem Drehkristallverfahren



Debye-Scherrer Verfahren

Debye-Scherrer-Verfahren

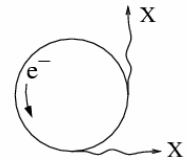


Debye-Scherrer-Verfahren:
Röntgenbeugung von monochromatischem Röntgenlicht an einem Polykristall Z. Auf dem Film erscheinen die Schnittlinien der Beugungskegel an den verschiedenen Netzebenenscharen. Zur Erzeugung von monochromatischem Röntgenlicht verwendet man entweder die charakteristische Röntgenstrahlung nach Abb. 18.3, oder man muß einen Einkristall als Monochromator nach (2.31) verwenden



Strahlungstypen

1. Röntgenstrahlung, heute ganz überwiegend in Form von Synchrotronstrahlung aus Elektronen-Synchrotrons; Effektivität der Beugungsexperimente besser bei hohem Z



2. Neutronenstrahlen (z.B. Hochfluss-Reaktoren wie ILL Grenoble, München): Wechselwirkung mit Atomkernen; besonders interessant für leichte Atome wie Wasserstoff

Anwendungen:

Strukturanalyse von Kristallen, Flüssigkeiten, chemischen und biologischen Molekülen etc.



Massenspektroskopie

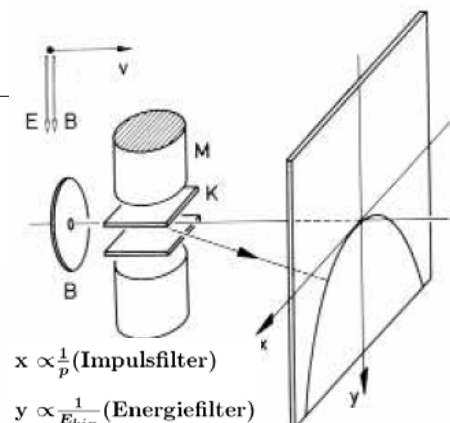
Methoden zur Trennung von Atomen mit unterschiedlichen Massen oder, genauer, unterschiedlichen e/m

1913 Parabelmethode von Thomson

- $\vec{F}_E = e\vec{E}$
- $\vec{F}_B = e\vec{v} \times \vec{B}$ (Lorentzkraft $\perp B$)

$$1. F_E = ma_y = m\ddot{y} = eE \rightarrow y = \frac{1}{2} \frac{eE}{m} t^2 = \frac{eE}{2m} \frac{p^2}{v^2}$$

$$2. F_B = ma_x = m\ddot{x} = evB \rightarrow x = \frac{evB}{2m} t^2 = \frac{eB}{2m} \frac{l^2}{v}$$



Aus (1) und (2) v eliminieren $\rightarrow$

$$y = \frac{2E}{l^2 B^2} \frac{m}{l} x^2 \quad (= \text{Parabel unabhängig von } v!!)$$

Anwendung: Isotopentrennung, z.B. angereichertes oder depletiertes Uran



Struktur der Atome

Lenard:

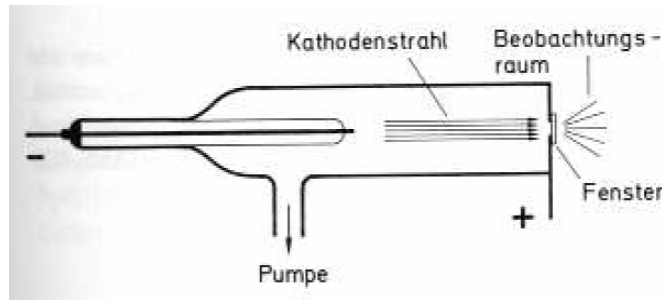
Elektronen haben Reichweite von einigen cm in Luft, aber sehr Energieabhängig.

Für schnelle Elektronen sind Atome 10^8 mal durchlässiger als für langsame Elektronen.

Heute wissen wir: schnelle Elektronen streuen nur am Kern, langsame an ganze Hülle (große Wellenlänge!)

“Das Innere des Atoms ist so leer wie das Weltall.”

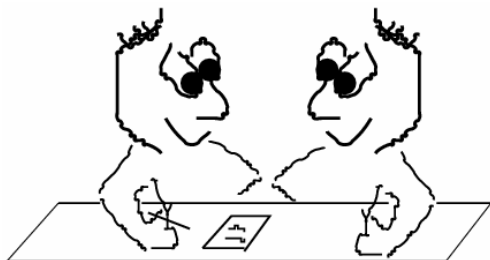
Denn wenn Atome für Elektronen undurchdringbar wären, würde Reichweite in Luft nur typische gaskinetische freie Weglänge von 10^{-5} cm betragen und würden Elektronen auch nicht Alu-Fenster von 10000 Atomschichten durchdringen können.



Lenard:

Elektronen erzeugt durch Gasentladungen.

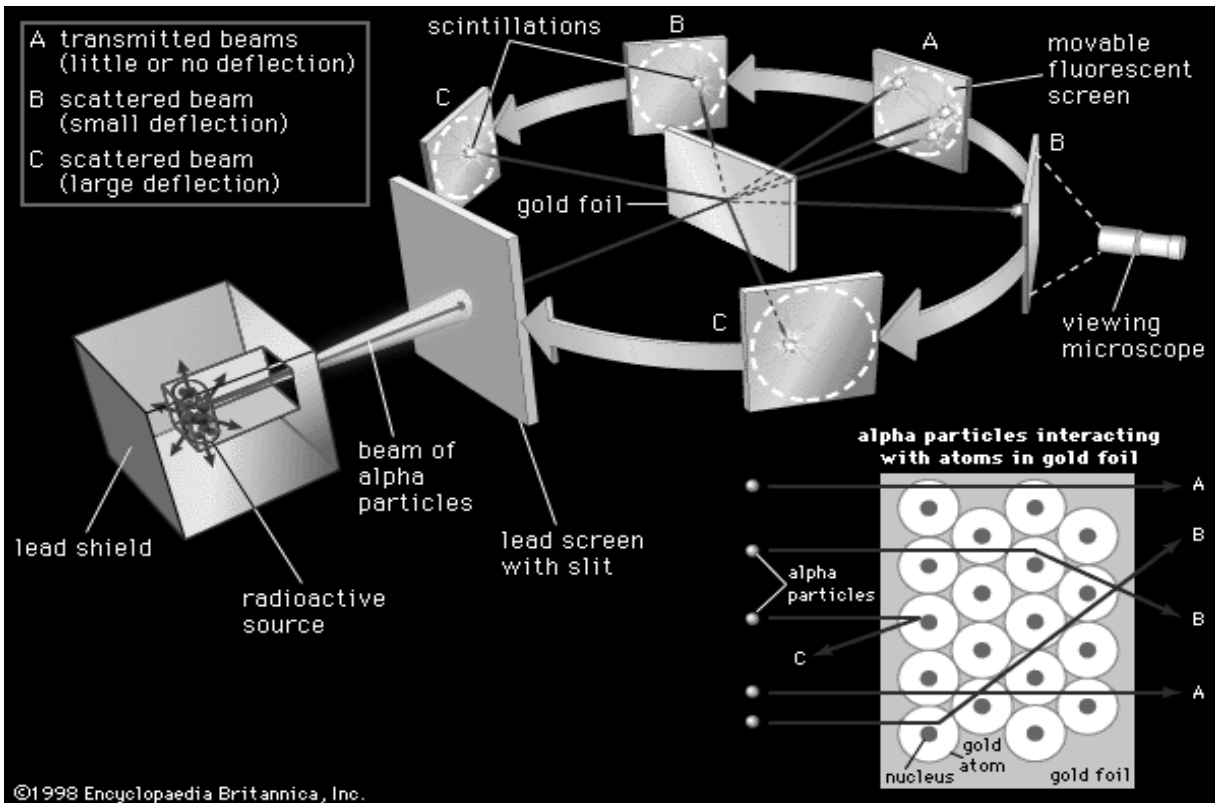
Glühelktrode noch nicht bekannt.



Frage: Wenn das Atom “leer” ist, was erwarten Sie für die Streuung von schweren Teilchen (wie z.B. α -Teilchen) an Atomen?



Kernstruktur aus "Rutherfordstreuung"



April 14, 2005

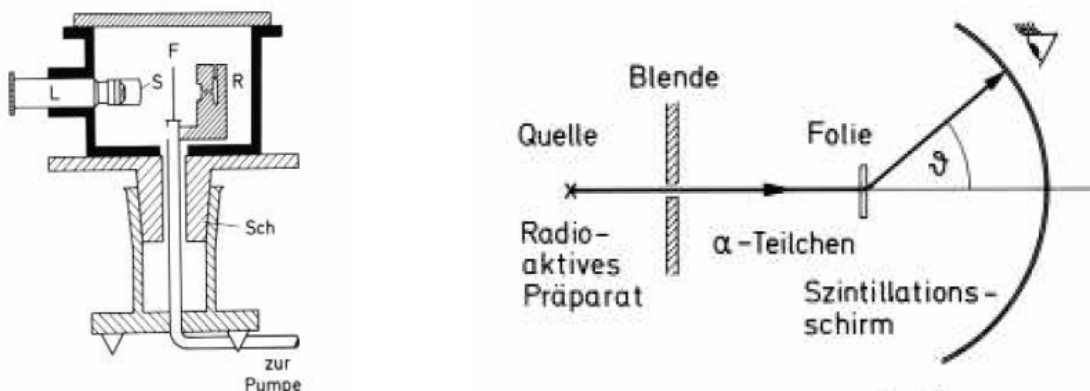
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



Kernstruktur aus "Rutherfordstreuung"

α -Teilchen (He-Kerne aus radioaktivem Präparat): Reichweite 3,5 cm in Luft bei $E = 5$ MeV. (Geiger + Marsden, Studenten von Rutherford)



Mit S wird die Intensität der durchgelassenen Strahlung durch dünne Goldfolie als Funktion vom Ablenkungswinkel θ gemessen !
 Meiste Teilchen fliegen durch, wie erwartet, wenn Atom "leer" ist.
 Jedoch manchmal Rückstöße unter großen Winkeln:
 "Gewehr-kugel prallt an einem Plumpudding ab."

April 14, 2005

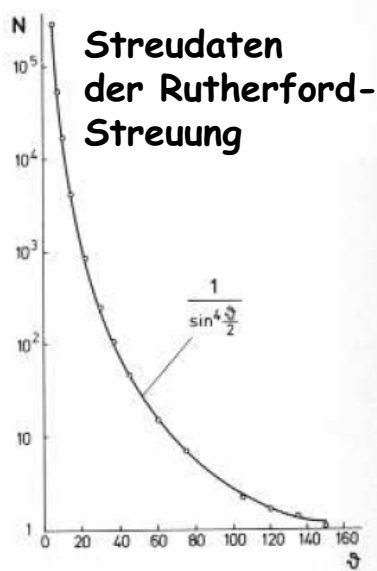
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Winkelabhängigkeit der Rutherford-Streuung

Interpretation: Masse von Goldatom *schwerer* als Masse von ^4He Atom und diese Masse ist konzentriert in einem Kern mit einem Radius R von ca. 10^{-12} cm mit Ladung Ze .



Rutherford konnte zeigen, dass die $1/\sin^4(\theta/2)$ Abhängigkeit der Winkelverteilung gerade die Coulomb Streuung an einer punktförmigen Ladung entspricht.

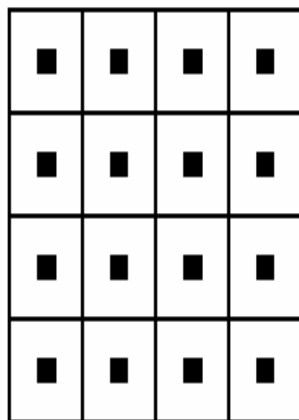
$$\text{Coulombkraft: } F_C = \frac{(Ze)(2e)}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Ze = Ladung des Kerns
 $2e$ = Ladung des He-Atoms



Begriff Wirkungsquerschnitt

Es kommen N Teilchen pro cm^2 und Sekunde bei den modellhaft gezeichneten Atomen an. Wie groß ist die Rate, die hängenbleibt, wenn die N Teilchen nur mechanische Stöße machen?



Es sei:

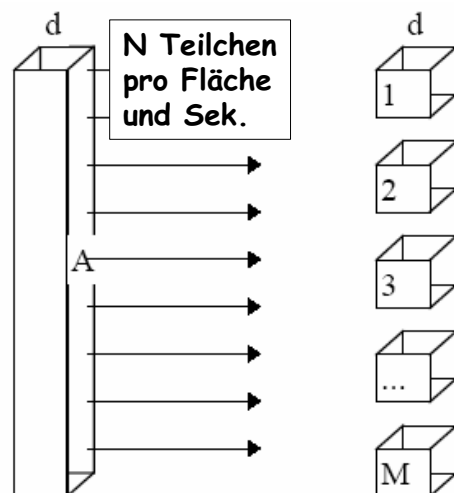
Kantenlänge der Atome: 10^{-10} m, Kantenlänge der Kerne: 10^{-14} m

$$\frac{\text{Widerstandsfläche}}{\text{Gesamtfläche}} = \frac{10^{-28} \text{ m}^2}{10^{-20} \text{ m}^2} = 10^{-8}$$

$$dN = 10^{-8} \cdot N \quad d\sigma = 10^{-8} \text{ cm}^2. \quad \text{Was bedeutet dies anschaulich?}$$



Begriff Wirkungsquerschnitt



Wieviele Teilchen bleiben hängen?

Gesamtfläche: A

Effektive Widerstandsfläche: $M \cdot d^2$

Wid.fläche pro Gesamtfläche: $(M \cdot d^2 / A)$

Rate, die hängenbleibt: $dN = (M \cdot d^2 / A) \cdot N$

Gibt es n Würfel pro Volumen in der dünnen Schicht

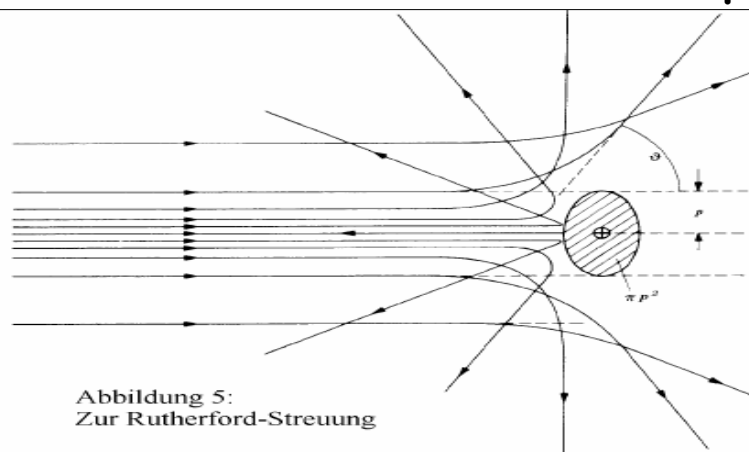
$$\rightarrow dN = \frac{A \cdot \tau \cdot n \cdot d^2}{A} \cdot N = \tau \cdot n \cdot d^2 \cdot N \quad (1)$$

τ = Schichtdicke
 d^2 = Streufläche
 $M = A \tau n$ = Anzahl der Streuzentren



Streuung im kugelförmigen Coulombpotential

Bei Kugeln als Streuzentren nicht einfach Absorption oder Durchlass, sondern Streuwinkel Fkt. von Impaktparameter



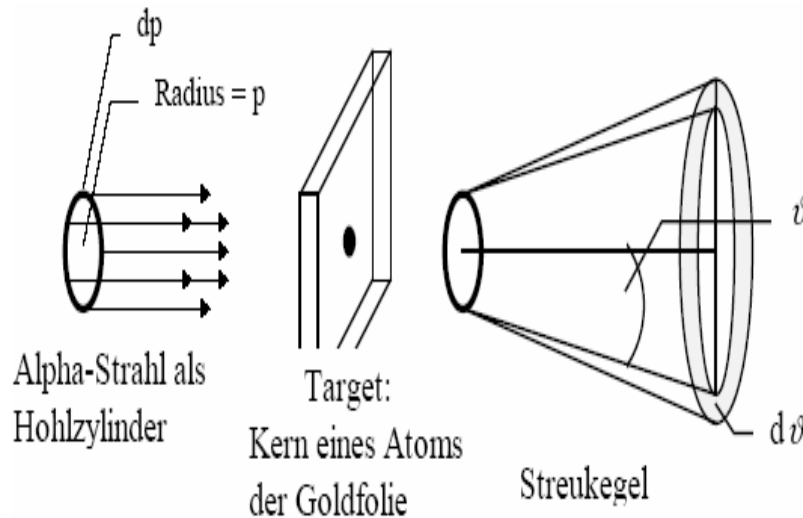
Beziehung zwischen Impaktparameter p und Streuwinkel θ :

Aus Kepler-Kegelschnitten und Flächensatz folgt (Herleitung nachher)

$$p = \frac{1}{2} r_{0\min} \cdot \cot \frac{\vartheta}{2} \quad (2)$$



Rutherford-Streuung: Alpha-Strahl wird an dünne Goldfolie gestreut



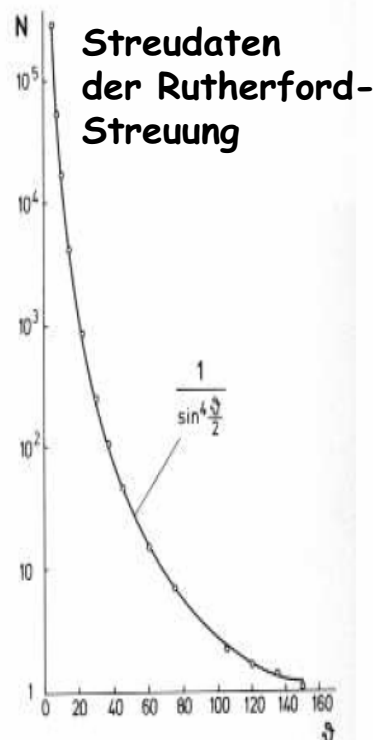
Teilchen aus dem Hohlzylinder mit $p < r < (p + dp)$ laufen in den Kegelmantel mit der Öffnung zwischen ϑ und $(\vartheta + d\vartheta)$. $p = p(\vartheta)$ regelt die Zahl der Teilchen in den Kegelmantel.

N ankommende Teilchen pro cm^2 und Sekunde mit Kernabstand zwischen p und $(p + dp)$, dN sind die Teilchen, die in den Kegelmantel laufen mit $d\Omega = 2\pi \sin\vartheta d\vartheta$

$$(3) \quad dN = 2\pi p \cdot dp \cdot \tau \cdot n \cdot N \quad n = \text{DICHTE der Streuzentren}$$



Winkelverteilung der Rutherfordstreuung



Wir verwenden jetzt:

$$j = \frac{N}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} \quad \text{sowie} \quad \frac{dN}{j} = d\sigma = 2\pi p \cdot dp \cdot \tau \cdot n \quad \text{und} \quad \frac{dp}{d\vartheta} = \frac{1}{4} r_{0\min} \cdot \frac{-1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \quad (5) \quad (6) \text{ aus (2)}$$

und erhalten:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{p \cdot \tau \cdot n \cdot dp}{\sin^2 \vartheta d\vartheta} = \frac{n\tau}{16} r_{0\min}^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \quad (7)$$

Interpretation des Ergebnisses:

a) $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim Z^2$

Möglichkeit der Kernladungsbestimmung (vgl. S.6)

b) $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{E_\infty^2}$

Je energiereicher die Teilchen, desto kleiner der Wirkungsquerschnitt

c) $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}$

Vorwärtsstreuung eigentlich unendlich groß; Abnahme für wachsende ϑ ;

aber auch Rückwärtsstreuung möglich.

Abweichungen für hohe Energien der α -Teilchen (Anomale Rutherford-Streuung (ASR)) durch "Berührung" der Kernpotentiale, also nicht nur Coulombpotential $\Rightarrow$ Kernradius!



Minimaler Abstand vom Kern

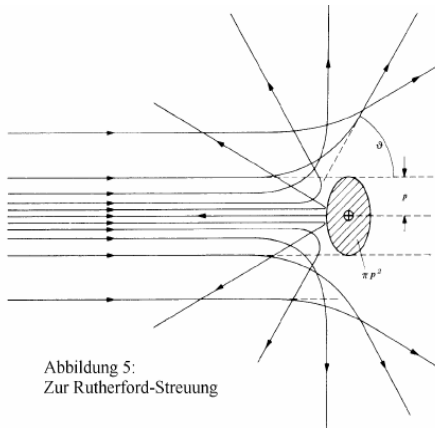


Abbildung 5:
Zur Rutherford-Streuung

Abstoßung: $E(\alpha) > 0 \Leftrightarrow$ Hyperbel

$$E(\alpha) = \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\infty}^2 =$$

$$\frac{1}{2} m_{\alpha} v_0^2 + \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$$

Peripheldurchgang

(Peripheldurchgang: r_0 ist minimaler Abstand vom Kern)

**Minimaler Abstand
wenn $E_{kin}=0$**

$$r_{0min} = \frac{4Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_{\alpha} v_{\infty}^2}$$

Nukleonen werden im Kern durch das anziehende Potential V_k der Kernkräfte gebunden. Da V_k scharf begrenzt ist, kann man aus der kinetischen Schwellenenergie W_S , bei der der Übergang der normalen zur ARS erfolgt, den Kernradius bestimmen.

Aus $\frac{2e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 R_K} = W_S \rightarrow R_K$.

Aus Messungen an vielen Kernen $R_K = (0,75 + 1,26 M^{\frac{1}{3}}) 10^{-15} \text{ cm}$,
 M = Massenzahl des Korns, daher $M \propto R^3 \propto V$;
 $\rightarrow$ Volumens des Korns $\propto$ Anzahl der Nukleonen



Beispiel

$$r_{0min} = \frac{4Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_{\alpha} v_{\infty}^2} \quad Z\text{-abhängig}$$

$$r_{0min} \cdot v_{\infty}^2 = \text{konst.}$$

r_{0min} ist eine obere Grenze für den Kernradius

Beispiel: Streuung von α -Strahlen aus RaC an Goldfolie:

$$m_{\alpha} = 6,69 \cdot 10^{-27} \text{ kg}, \quad \epsilon_0 = 8,9 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Cb}}{\text{V} \cdot \text{m}}, \quad v_{\infty} = 1,9 \cdot 10^7 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad Z(\text{Gold}) = 79$$

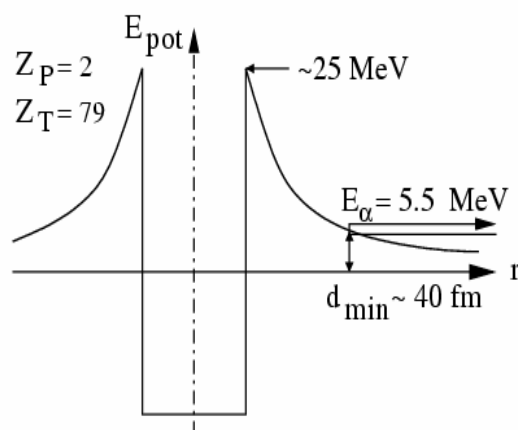
$$r_{0min} \approx 3 \cdot 10^{-14} \text{ m} = 30 \text{ fm}$$



Gründe für Erfolg dieser klassischen Experimente

- $M_\alpha \gg M_{el}$ (10^4): Ablenkung durch Streuung an Elektronen vernachlässigbar; nur Streuung durch den positiv geladenen Atomkern
- reine „Coulomb-Streuung“ am Atomkern $\Rightarrow$ zentrales Potential. Die Ausdehnung des Kernes ist nicht relevant, weil der minimale Abstand $d_{min} > R_{Kern}$ ist (s.u.): Das Potential einer sphärisch symmetrischen Ladungsverteilung ist außerhalb gleich dem einer Punktladung.

Ladung/Masse für Projektil $Z_P e/M_P$, für Targetkern $Z_T e/M_T$



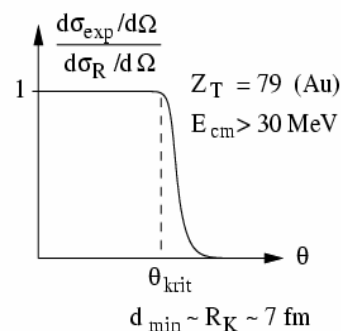
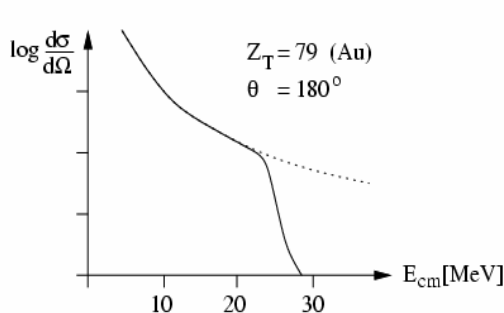
Streupotential:

$$E_{pot}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_P Z_T e^2}{r}$$



Zusatz-Bemerkungen

- Divergenz von $d\sigma_R/d\Omega$ für kleine θ nur mathematisch. Ist b vergleichbar mit Atomdurchmesser: Kernladung zunehmend abgeschirmt durch Elektronen. Im Grenzfall $b > \text{Atomradius}$ geht die streuende Ladung $Z_{Teff} \rightarrow 0$. Damit bleibt $d\sigma_R/d\Omega$ auch bei kleinen θ endlich.
- Bei α -Energien > 20 MeV (für $Z > 82$) wird $d_{min} < R_{Kern}$. Zusätzlich zu den elektrostatischen Kräften treten dann kurzreichweitige Kernkräfte auf, die zu einer Veränderung der Ablenkfunktion $\theta(b)$ führen. Insbesondere kann das α -Teilchen vom Kern absorbiert werden. Dies führt zu einer drastischen Reduktion von $d\sigma_R/d\Omega$ gegenüber der Rutherfordstreuung.



Aus der Abweichung der gemessenen Streuverteilung kann der Radius R_K des Atomkerns abgeschätzt werden. Man erhält daraus, dass die Nukleonen den Kern mit einer konstanten Dichte ausfüllen. Es gilt:

$$R_K \approx r_0 A^{1/3}$$



Und Wellencharakter der Teilchen spielt bei diesen Energien und Abständen noch keine Rolle!

- de-Broglie-Wellenlänge des α -Teilchens

$$\lambda = \frac{h}{mv} \approx 6 \text{ fm (5.5 MeV } \alpha\text{-Energie)} \leq \text{Kerndurchmesser} \ll \text{Atomdurchmesser}$$

$\Rightarrow$ Das α -Teilchen ist ein gut lokalisiertes Wellenpaket, die „klassische Bahn“ ist eine sinnvolle Vorstellung. Ein reines $1/r$ -Potential liefert in jedem Fall für klassische und quantenmechanische Behandlung das gleiche Resultat (sonst wäre Behandlung mit Schrödingergleichung notwendig).



GRÖSSENVERHÄLTNISSE

PROTONEN SIND 100000x KLEINER ALS ATOME (1911)

Atomkern : Atomhülle

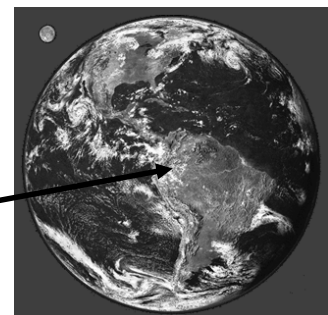
= Knopf : Innenstadt



QUARKS, LEPTONEN SIND MIND. 10000x KLEINER ALS PROTONEN (1998)

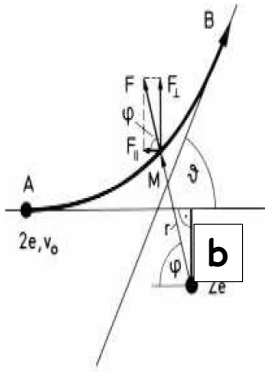
Quark : Atomhülle

< Knopf : Erde





Herleitung Beziehung zwischen Streuwinkel und Impaktparameter



1. Streuwinkel θ hängt vom Impaktparameter b ab

$$2. F_{\perp} = F \sin \varphi \quad (1); \quad F_{\parallel} = F \cos \varphi \quad (2); \quad F = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3);$$

r variiert während der W (Integrieren über die Zeit, um θ zu bekommen)

3. Drehimpulserhaltung (Radialkraft, d.h. $\vec{F} \times \vec{r} = F \cdot r \cdot \sin \varphi = 0$);

$$\Rightarrow \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \text{ in } \left\langle \begin{array}{l} A: \quad mv_0 b = \\ B: \quad mv_B r = (v = \dot{\varphi} r) = m \dot{\varphi} r^2 \end{array} \Rightarrow \frac{1}{r^2} = \frac{\dot{\varphi}}{v_0 b} \right\rangle (4)$$

April 14, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

25



Herleitung Beziehung zwischen Streuwinkel und Impaktparameter

$$4. \text{ Senkrechtbewegung: } F_{\perp} = m \frac{dv_{\perp}}{dt} = [(1) + (3)] = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sin \varphi \quad (5)$$

(4) in (5) : mit $k = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$ und integrieren über die Zeit:

$$\int_{t_A}^{t_C} \frac{dv_{\perp}}{dt} dt = \frac{k}{mv_0 b} \int_A^C \sin \varphi \frac{d\varphi}{dt} dt \quad (6)$$

A bei $-\infty$: $v_{\perp} = 0$, $\varphi = 0$

C bei $+\infty$: $v = v_0$ (Energieerhaltung)

$$\text{Aus (6): } \int_0^{v_0 \sin \theta} dv_{\perp} = \frac{k}{mv_0 b} \int_0^{\pi - \theta} \sin \varphi d\varphi \quad (7)$$

$$\text{oder } v_0 \sin \theta = \frac{k}{mv_0 b} (1 + \cos \theta) \quad (8)$$

$$\frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \equiv \cot \frac{\theta}{2} \quad (9)$$

Aus (8) + (9):

$$b = \frac{k}{mv_0^2} \cot \frac{\theta}{2}$$

(= Beziehung zwischen Impaktparameter und θ durch $\int F dt$.)

April 14, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

26



Zum Mitnehmen

Atomgröße aus Röntgenbeugung: ca. $1 \text{ \AA}$ ($\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$)
Dies bedeutet, dass Quanteneffekte eine Rolle spielen, da
mit $\Delta p \approx p = mv$ und $\Delta x \approx x$ gilt: ($v/c \approx 0.01$ für Elektronen in Atomen)
 $\Delta p \cdot \Delta x = 10^{-30} \text{ kg} \cdot 3 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot 10^{-10} \text{ m} = 10^{-34} \text{ Js}$ ist vergleichbar
mit der Planck Konstante $h = 10^{-34} \text{ Js}$.

Rutherford-Streuung: Kern-Kernstreuung zeigt dass
Kerne SEHR klein sind im Vergleich zu Atomen!
Kernradius / Atomradius = Erbse / Kölner Dom



Vorlesung 3: Das Photon

Roter Faden:

Eigenschaften des Photons

Photoeffekt	}	->VL3
Comptonstreuung		
Gravitation	}	->VL4
Plancksche Temperaturstrahlung		

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Teilweise benutzte Skripte:

<http://www.physi.uni-heidelberg.de/~specht/>

<http://www.wmi.badw-muenchen.de/E23/lehre/skript/>



Eigenschaften des Photons

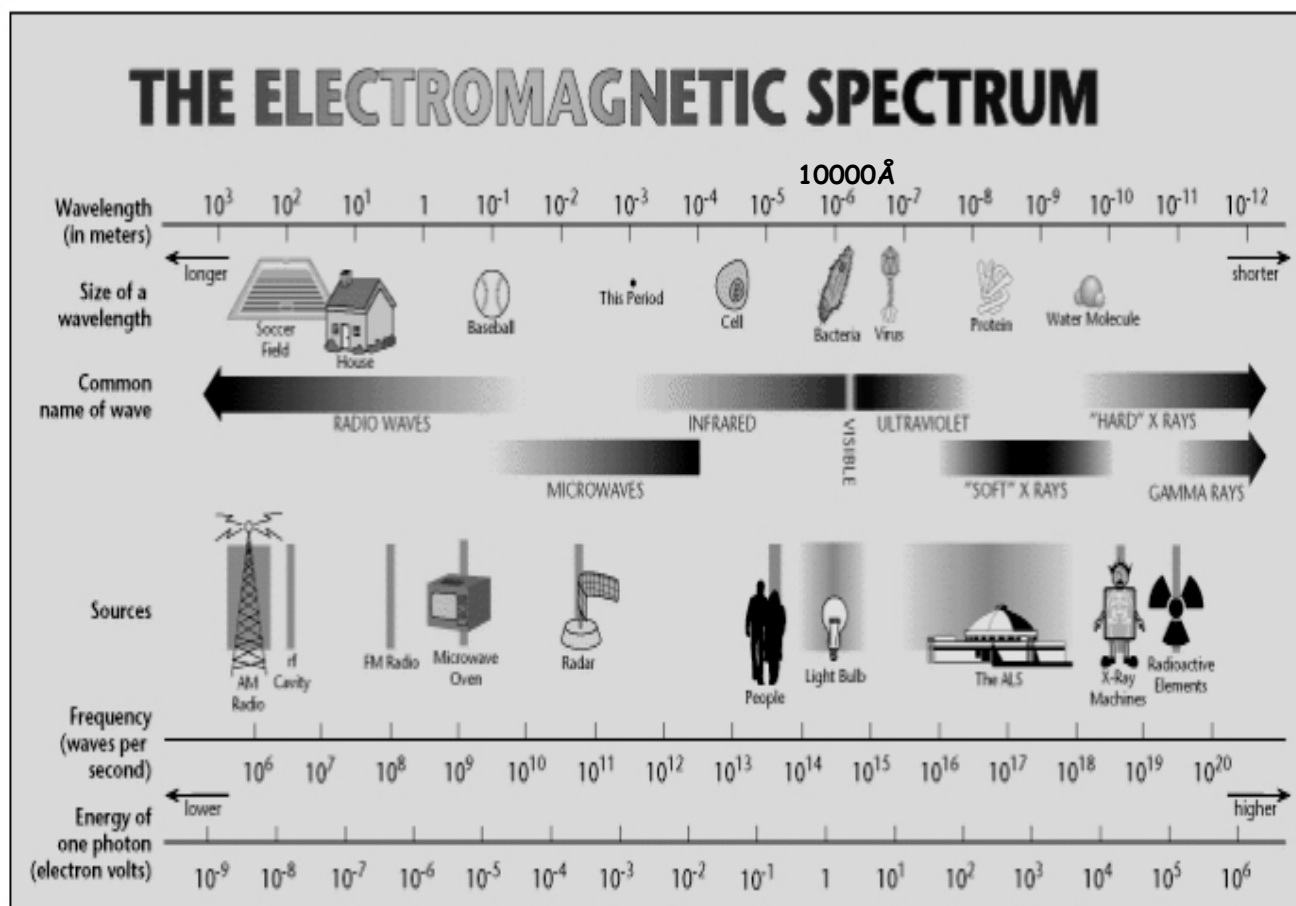
Energie	$h\nu$ (h = Plancksche Konstante = $6,6 \times 10^{-34}$ Js)
Impuls	$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$
Geschwindigkeit	c
Ruhemasse	0
Relativistische Masse	$m = \frac{E}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{p}{c}$
Eigendrehimpuls (Spin)	$1 \hbar = \frac{1h}{2\pi}$

Das Photon ist das Energiequant der elektromagnetischen Wellen, d.h. Licht hat wie von Einstein postuliert nicht nur Wellencharakter, sondern auch Teilchencharakter mit den oben angegebenen Eigenschaften (Einstein bekam den Nobelpreis für den photoelektrischen Effekt und nicht wie gemeinhin angenommen für die Relativitätstheorie).

April 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



April 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

3



Teilchen-Welle "Dualismus"

Photonen beschreiben elektromagnetische Wechselwirkung als Austauschteilchen der QED (QED=Quantum Electrodynamics = relat. Quantenfeldtheorie des Elektromagnetismus).

Wie kann man Wellencharakter und Teilchencharakter vereinbaren?
Beispiele

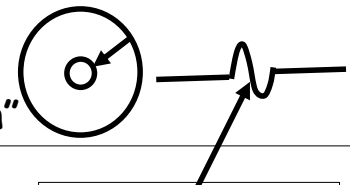


1. Dipolantenne: unendlich viele Photonen lassen Quantencharakter verschwinden: "Glättung" der Wellen;

Analogie: kontinuierliche Erzeugung von Wellen in einem Seil $\Rightarrow$ stehende Wellen

2. Übergang im Atom: Photon mit Frequenz $h\nu$;

Analogie: EINE Schwingung im Seil $\Rightarrow$ "Teilchen"



Klassisch nicht zu verstehen, warum $E=h\nu$ UNABHÄNGIG von der Amplitude

Energiepaket



Eigenschaften des Photons

Wellencharakter des Lichts bewiesen durch Interferenzen (Huygens, Young)

Teilchencharakter bewiesen durch

1. Photoeffekt
2. Thompson-, Raleigh- und Comptonstreuung
3. Gravitationseffekte des Photons
4. Plancksche Hohlraumstrahlung

Heute: 1) bis 2)



Der Photoeffekt

Bestrahlt man ein Alkalimetall - das sind Metalle mit nur einem Elektron in der Außenhülle - im Vakuum mit ultraviolettem Licht, werden Elektronen (e^-) aus der Metalloberfläche 'herausgeschlagen'. Elektronenfluß bedeutet aber gemeinhin Stromfluß, den man messen kann. Durch Anlegen einer Gegenspannung $-U_0$ kann man den Stromfluss steuern. Man hat festgestellt, dass die gemessene elektrische Stromstärke - also die Anzahl der freigesetzten Elektronen - proportional zur Intensität des eingestrahnten Lichts ist, die *kinetische Energie* der Elektronen hingegen aber nur von der Frequenz des Lichts ab, nicht von der Intensität.

Man nennt die Gegenspannung (kann positiv oder negativ sein) auch *Bremsspannung*. Das die maximale Bremsspannung $-U_0$ nicht von der Lichtintensität des einfallenden Lichts abhängig war, war überraschend. Nach der klassischen Physik sollte die Erhöhung der auf die Metallfläche (Kathode) treffende Lichtintensität zu einem Anstieg der von einem Elektron absorbierten Energie führen, und damit auch zu einer größeren kinetischen Energie der herausgelösten Elektronen. Dass dies nicht der Fall war, konnte Einstein so erklären:

April 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

6



Erklärung nach Einstein

Licht ist nicht *kontinuierlich* im Raume verteilt, sondern in winzigen Paketen - den *Photonen* - quantisiert. Dabei ist die Energie jedes Photons gemäß der Planck-Formel $E = h\nu$, also Plancksches Wirkungsquantum mal Frequenz. Ein Elektron, das durch das ultraviolette Licht aus der Metalloberfläche herausgeschlagen wurde, besitzt genau die Energie eines einzigen Photons. Wenn man die Lichtintensität erhöht, so fallen zwar mehr Photonen pro Zeit auf die Metalloberfläche, die von einem Elektron dieser Oberfläche aufgenommene (absorbierte) Energie erhöht sich jedoch nicht.

Wenn man jetzt die Arbeit, die notwendig ist, um ein Elektron aus der Metalloberfläche herauszulösen, als 'Austrittsarbeit' W_A bezeichnet, erhält man folgenden Zusammenhang:

$$\left(\frac{1}{2} m v^2 \right)_{\text{max}} = e \cdot U_0 = h\nu - W_A$$

Einstein Vorhersage wurde durch Experimente von Millikan bestätigt.

April 19, 2005

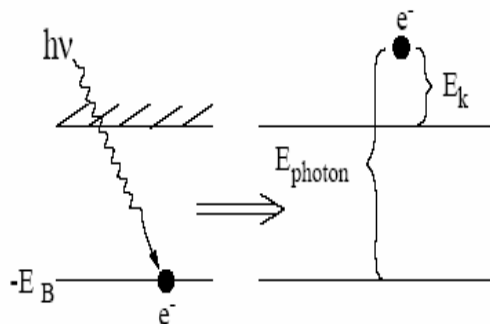
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

7



Der Photoeffekt nach Einstein

Grundprozess in der Deutung von Einstein (Veröff. 1905, „Über einen die Erzeugung und Verwandlung von Licht betreffenden heuristischen Gesichtspunkt“):



Übertragung der Gesamtenergie eines Photons $E = h\nu$ auf ein gebundenes Elektron mit Bindungsenergie $-E_B$ führt zu einem freien Elektron mit kinetischer Energie E_K .

Mehr Intensität -> mehr Photonen, aber E_k unabh. von I , nur eine Fkt. von Freq.

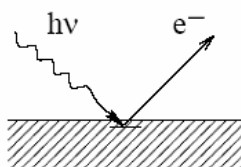
$$E_k = h\nu - E_B$$



Versuche zum Photoeffekt

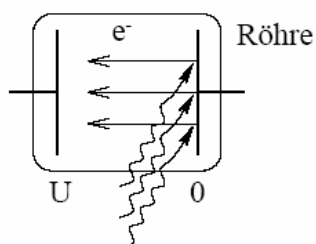
1888 Hallwachs:
Negativ geladenes Elektrometer entlädt sich durch Licht,
ein positiv geladenes Elektrometer NICHT!!

1) Photoelektronen aus Festkörpern (hist.)



Einstrahlung von Licht löst Photoelektronen aus der Oberfläche heraus (Hertz 1887, Lenard 1902, Millikan 1916).

Der Millikanversuch (1916)

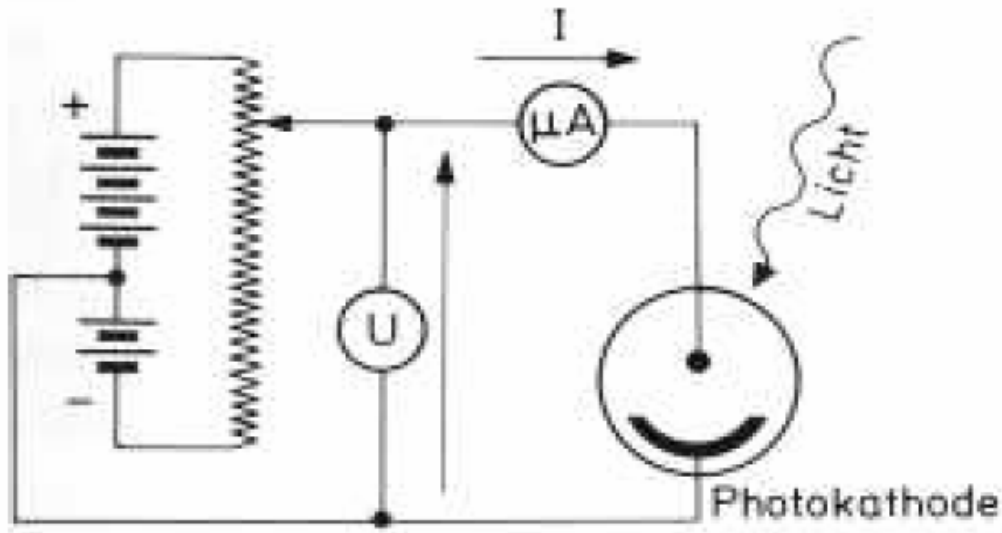


“Primitive” Energiemessung:

Ist die Spannung U negativ (verzögernd) und so gewählt ($U = -U_0$), dass die Elektronen gerade gestoppt werden, d.h. gerade kein Strom mehr fließt, gilt $E_k = |eU_0|$.



Genauere Photoeffekt-Messungen

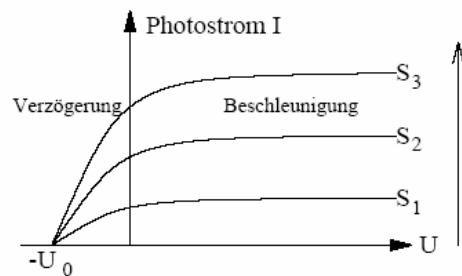


Spannung kann sowohl >0 als <0 gewählt werden:
alle Elektronen werden angesaugt bei $U>0$ bis $I=I_{\max}$
oder abgebremst bei $U<0$ bis $I=0$. Dann gilt: $E_{\text{kin}}=eU_0$



Beobachtung

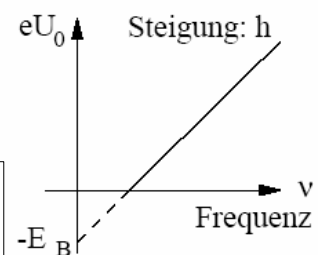
Beobachtung:



Kin. Energie des Elektrons:

$$eU_0 = E_{\text{kin}} = h\nu - E_B$$

Kin. Energie >0 für
 $h\nu - E_B > 0$, oder
 $\nu_{\text{Grenze}} = E_B/h$



1. Die notwendige Stoppspannung U_0 steigt linear mit der Frequenz ν , ist aber unabhängig von der Lichtintensität S .
2. Der Photostrom I , d.h. die Zahl der Elektronen, ist proportional zur Lichtintensität S .

Typische Zahlenwerte sind z.B. $\lambda = 0.63 \mu\text{m}$ (orange), $E_\nu = 2.0 \text{ eV}$, $E_B = 0 \dots 1 \text{ eV}$, je nach Material. Die Planck'sche Konstante h lässt sich aus der Steigung h bestimmen, es ergibt sich der Zahlenwert:

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J/s}$$



Interpretation

1) Im Wellenbild

Im klassischen Wellenbild ist dieses Ergebnis völlig unverständlich!

- a) Erwartung: $\vec{E}$ verursacht erzwungene Schwingungen der Elektronen; eine Erhöhung von $\vec{E}$ müsste größere Amplituden und damit (bei Abtrennung) größere kinetische Energien erzeugen; stattdessen ist nur der Sättigungsstrom von der Feldstärke abhängig und gerade nicht E_k bzw. U_0 .
- b) Energiebetrachtung: Lichtstrom sei $10^{-10} \text{ W/cm}^2 \Rightarrow 10^9 \text{ eV/cm}^2\text{s}$. Die Absorption des Lichtes sei in den ersten 10 Atomlagen $\Rightarrow 10^{16} \text{ Atome/cm}^2$; der Lichtstrom verteilt sich also auf 10^{16} Atome. Erst in 10^7 s (1 Jahr) würde sich dann im Mittel eine Energie von 1 eV auf 1 Atom ansammeln – eine offensichtlich unsinnige Vorstellung.



Folgerung aus Einstein's Hypothese

Folgerung: Die Energie muss diskontinuierlich auftreten, sie muss sich temporär auf ein einzelnes Elektron konzentrieren

$\Rightarrow$ radikaler Bruch mit der klassischen Wellenvorstellung

2) Im Teilchenbild

Ein Quant benimmt sich wie ein klassisches Teilchen in einem Stoß mit Energie- und Impulserhaltung. Der Impuls wird auf das Elektron und an das Gitter übertragen, die Energieerhaltung ist über $E_K = E_\nu - E_B$ gesichert. Die Intensität, also die Anzahl der Photoelektronen ist proportional zur Zahl der Quanten N_ν :

$$eU_0 = h\nu - E_B$$

Strom I = Zahl der Photoelektronen $\propto$ Zahl der Quanten N_ν

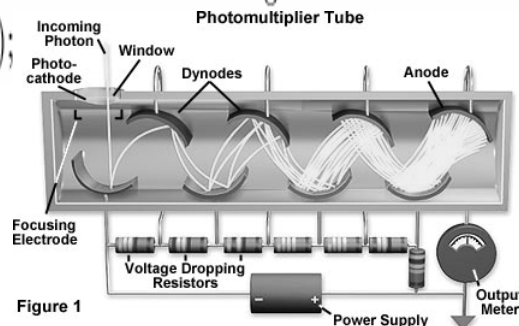
Im Teilchenbild lässt sich also alles ganz zwanglos erklären. Es dauerte von 1905 an ein Jahrzehnt, bis diese Vorstellung akzeptiert war (1913 ging anlässlich der Empfehlung Einsteins für einen Sitz in der Preussischen Akademie der Wissenschaften ein Brief Planck's an das Preussische Erziehungsministerium, worin er schrieb: „... ist gelegentlich spekulativ wie bei der Lichtquantenhypothese ...“).



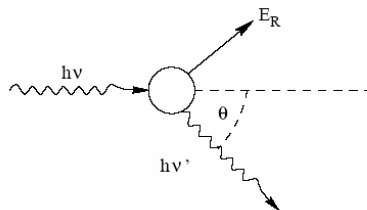
Anwendung des Photoeffekts

Allgemein lässt sich der Photoeffekt zum qualitativen und quantitativen Nachweis von Licht verwenden. Er wird in vielen technischen Geräten ausgenutzt:

1. Photodioden (Halbleiter); ortsempfindlich: CCD's (z.B. in Fernseh- oder, zunehmend, Stillbild-Kameras) **CMOS-cameras: Photodioden auf Si-wafer mit Verstärker und Adressierung für jeden Pixel.**
2. Photomultiplier; Empfindlichkeit bis zur Messung einzelner Photonen; exzellente Zeitauflösung (im Bereich $< 10^{-9}$ s);



Streuprozesse der Photonen



Allgemeine Darstellung eines Streuprozesses: wenn das Photon Teilchencharakter hat, soll es eine Impulsänderung erfahren, d.h. seine Frequenz ("Farbe") ändert.

Man unterscheidet bei Photonen folgende Haupttypen von Streuprozessen:

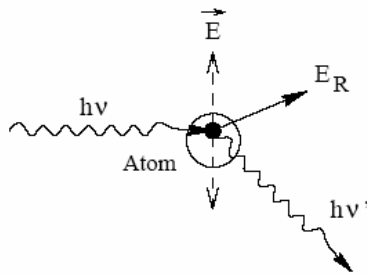
1. *Thompson-Streuung:* Streuung von $h\nu$ an einzelnen, als frei zu betrachtenden Elektronen mit $h\nu \ll m_0 c^2$. Dabei bleibt als (idealisierte Grenzfall) die Photonenenergie gleich, d.h. $h\nu' = h\nu$. Die Streustrahlung ist kohärent, d.h. es besteht eine feste Phasenbeziehung zwischen Streu- und Primärstrahlung.
2. *Rayleigh-Streuung:* Streuung von $h\nu$ an der Gesamtheit der gebundenen Elektronen, wobei $h\nu \ll$ oder $\approx$ oder $\gg |E_{\text{Bindung}}|$. Auch hier ist $h\nu' = h\nu$ und es herrscht Kohärenz.
3. *Compton-Streuung:* Streuung an einzelnen, als frei zu betrachtenden Elektronen, aber $h\nu$ nicht $\ll m_e c^2$. Hier wird $h\nu' < h\nu$, und die Streuung ist inkohärent.

Beachte: Thompson- und Rayleigh-Streuung sind „klassisch“ behandelbar, d.h. mit elektromagnetischen Wellen (h kommt nicht vor); Compton-Streuung ist allein mit der Teilchennatur beschreibbar (h kommt explizit vor).



Thompson-Streuung ($h\nu$ sehr klein)

1) Thompson-Streuung



Voraussetzungen:

1. $h\nu \ll m_e c^2$, kein Energie- und Impulsübertrag
2. $h\nu \gg E_B$, Elektronen sind „frei“, am ehesten trifft dies auf die Elektronen der äußeren Hülle zu.
3. $E_R \rightarrow 0$

**(=weiche Raleighstreuung
weit oberhalb der Resonanz)**

Im Wellenbild: Das quasifreie Elektron wird durch das elektrische Feld beschleunigt gemäß

$$m_e \ddot{x} = e E_{x_0} \sin \omega t$$

und strahlt dabei wie ein klassischer Hertz'scher Dipol:

$$\text{Ausgestrahlter Energiefluss: } \overline{S_{\text{aus}}} = \overline{S_z} \propto \overline{(\ddot{p}_{\text{Dipol}})^2} = \overline{(e\ddot{x})^2} \propto \frac{e^4}{m_e^2} E_{x_0}^2$$

$$\text{Eingestrahler Energiefluss: } \overline{S_{\text{ein}}} = \overline{S_z} \propto E_{x_0}^2$$

Im Teilchenbild: Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess:

$$\sigma_{\text{Thompson}} \propto \frac{\text{Zahl der gestreuten Quanten}}{\text{Zahl der einfallenden Quanten}} = \frac{\overline{S_{\text{aus}}}}{\overline{S_{\text{ein}}}} \propto \frac{e^4}{m_e^2}$$



Diskussion der Thompson-Streuung

Quantitativ:

$$\sigma_{\text{Thompson}} = \frac{8\pi}{3} r_e^2$$

mit

$$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 2.8 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

Die Abkürzung r_e wird als „klassischer“ Elektronenradius bezeichnet. Vorstellung: Ruheenergie des Elektrons $m_e c^2 =$ Coulomb-Selbstenergie. Diese Vorstellung hat mit der Realität allerdings nichts zu tun; das Elektron ist nach heutigem Kenntnisstand „punktförmig“; die obere experimentelle Grenze für seine Ausdehnung ist etliche Zehnerpotenzen kleiner als r_e .

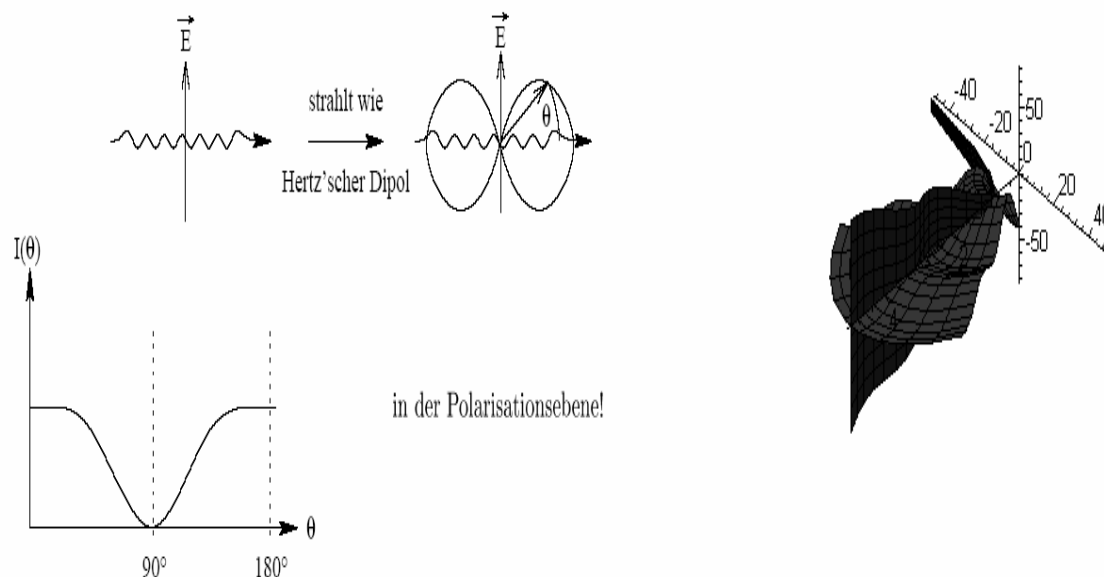
Diskussion

1. $\sigma_{\text{Thompson}} = 0.66 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2 = 2/3 \text{ barn}$ **(pp-Streuung: 80 mb)**
2. σ_{Thompson} ist unabhängig von der Frequenz bzw. Energie der Strahlung.
3. Für das Atom als Ganzes summieren sich die Beiträge der einzelnen Elektronen:



Winkelverteilung der Thompson-Streuung

Winkelverteilung der gestreuten Quanten für linear polarisierte Strahlung:



Rayleighstreuung

Falls $h\nu$ vergleichbar wird mit $|E_B|$, kann die Bindung nicht länger vernachlässigt werden. Elektronen mit der Resonanzfrequenz ω_0 erfahren dann erzwungene Schwingungen mit der Amplitude

$$x = A \sin \omega t \quad \text{mit} \quad A \propto \frac{E_{x,0}}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \delta^2 \omega^2}}$$

Entsprechend der obigen Betrachtung der Streustrahlung $\propto \overline{\ddot{p}^2} = e^2 \overline{\ddot{x}^2}$ ergibt sich dann

$$\sigma_{\text{Rayl}} \propto \left(\frac{\omega^4}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \delta^2 \omega^2} \right) \cdot \sigma_{\text{Thompson}}$$

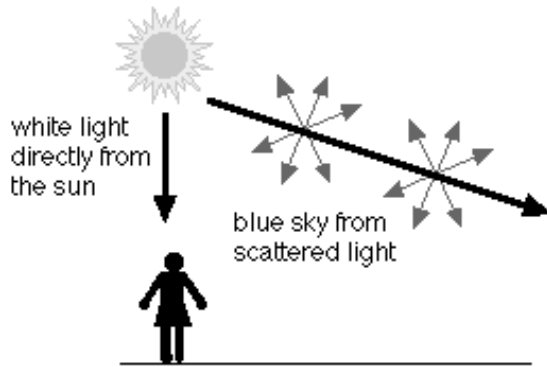
Grenzfälle:

a) $h\nu \gg E_B$, d.h. $\omega \gg \omega_0$ (bisher) $\Rightarrow \sigma \propto \frac{\omega^4}{\omega^4} = \text{const} \Rightarrow$ Thompsonstreuung

b) $h\nu \ll E_B$, d.h. $\omega \ll \omega_0$ (neu) $\Rightarrow \sigma \propto \frac{\omega^4}{\omega_0^4} \Rightarrow$ Rayleighstreuung

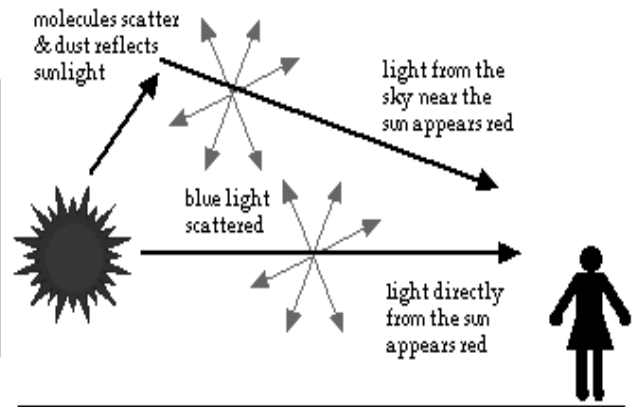


Warum ist der Himmel blau und Sonnenuntergang rot?



Rayleigh-Streuung regt Atome am stärksten an für blaues Licht, das auch wieder emittiert wird.

Abends wird blaues Licht am durch Rayleigh-Streuung am stärksten absorbiert. Verunreinigungen nahe der Erde können durch Anregungen wunderschöne Farben beimischen



April 19, 2005

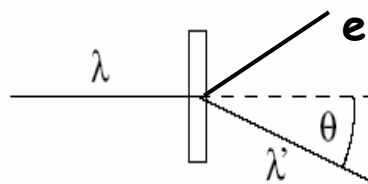
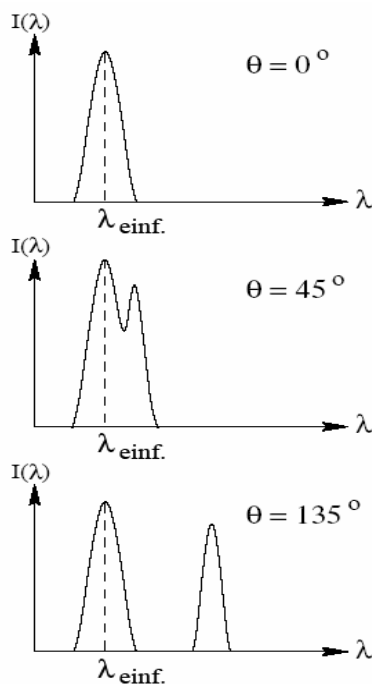
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

20



Compton-Streuung (reiner Quanteneffekt) (Thompson und Raleigh-Streuung klassisch)

Compton (1922): Streuexperimente mit Photonen im Röntgenbereich (20 keV) ($E > \text{Bindungsenergie der Elektronen}$)



Gemessen wird: Streuwinkel und Energie ($=hc/\lambda$) des gestreuten Photons

Erste Beobachtung:

Aufteilung des Peaks der Streustrahlung bei großen Streuwinkeln in zwei getrennte Peaks.

Der konstante, nicht winkelabhängige Peak entspricht der schon behandelten Thompson-Streuung; der zweite, dessen Lage sich mit zunehmendem Winkel zu immer größeren Wellenlängen verschiebt, resultiert aus der Compton-Streuung.

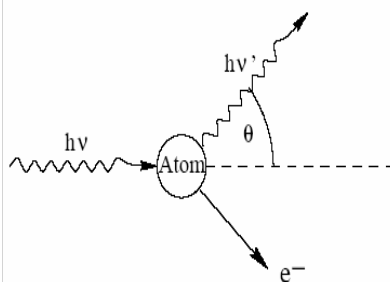
April 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

21



Deutung der "verschobenen" Strahlung



Wechselwirkung eines Quants mit einem „freien“ Elektron, d.h. ein elastischer Stoß unter Berücksichtigung von Energie- und Impulserhaltung. Im Gegensatz zum Photoeffekt verschwindet das Photon nicht, sondern es verliert nur Energie.

Impulserhaltung:
$$\vec{p}_\nu = \vec{p}_{\nu'} + \vec{p}_e \quad (1)$$

Energieerhaltung:
$$m_e c^2 + h\nu = E_e + h\nu' \quad (2)$$

rel. Energiegleichung für e^- :
$$0 = c^2 p_e^2 + m_0^2 c^4 - E_e^2 \quad (3)$$

Relativistisch, da kinetische Energie und Masse des Elektrons vergleichbar sind!



Lösung der E,p-Erhaltungssätze

rel. Energiegleichung für e^- :
$$0 = c^2 p_e^2 + m_e^2 c^4 - E_e^2 \quad (\text{aus (2)})$$

$$\Rightarrow 0 = c^2 (\vec{p}_\nu - \vec{p}_{\nu'})^2 + m_e^2 c^4 - (m_e c^2 + h(\nu - \nu'))^2$$

mit
$$(\vec{p}_\nu - \vec{p}_{\nu'})^2 = p_e^2 = p_\nu^2 + p_{\nu'}^2 - 2p_\nu p_{\nu'} \cos \theta \quad (\text{Cosinussatz})$$

$$h^2 (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \theta - (\nu - \nu')^2) = 2m_e c^2 h (\nu - \nu')$$

$$h\nu\nu' (1 - \cos \theta) = m_e c^2 (\nu - \nu')$$

mit $\nu = \frac{c}{\lambda}$
$$\frac{1}{\lambda\lambda'} (1 - \cos \theta) = \frac{m_e c}{h} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{m_e c}{h} \cdot \frac{\lambda - \lambda'}{\lambda\lambda'}$$

mit $\lambda' - \lambda = \Delta\lambda$

$$\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta)$$

Schlussfolgerung: Peakverschiebung $\Delta\lambda$ als Fkt. von θ wird durch Energie-Impulserhaltung beschrieben $\Rightarrow$ elektromagn. Strahlung hat Teilchencharakter bei Energien ab keV Bereich.



Diskussion der Compton-Streuung

1. $\Delta\lambda \propto \lambda_c$, unabhängig von λ , jedoch θ -abhängig.

$\Delta\lambda$ immer >0 , $\lambda' > \lambda$ bzw. $\nu' < \nu$. Die Energiedifferenz geht in das Elektron über.

$\Delta\lambda$ enthält h ; der Comptoneffekt ist ein reiner Quanteneffekt.

Das ganze Photon wird an einem Elektron gestreut. Historisch brachte diese Erkenntnis den endgültigen Durchbruch der Quantenhypothese $E = h\nu$.

2. $\lambda_c = 2.43 \cdot 10^{-12}$ m entspricht (als Merkregel)

a) der Wellenlänge eines Photons mit $h\nu = m_e c^2$, **Da $h/\lambda = h\nu/c = mc$**

b) der „de-Broglie-Wellenlänge eines Elektrons mit der Geschwindigkeit c “.

3. Sichtbares Licht: $\lambda \approx 400 \dots 700 \text{ nm} \Rightarrow \Delta\lambda = 10^{-6} \lambda$. Dies ist schwer zu beobachten. Bei Röntgenstrahlung sind die Effekte jedoch (relativ gesehen) viel größer und daher leicht beobachtbar.

Z.B. $E=1 \text{ keV} \rightarrow \lambda=12\text{\AA} \rightarrow \Delta\lambda/\lambda=0.8\%$

Z.B. $E=1 \text{ MeV} \rightarrow \lambda=0.012\text{\AA} \rightarrow \Delta\lambda/\lambda=80\%$

April 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

24



Comptonstreuung dargestellt als Energien

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)}$$

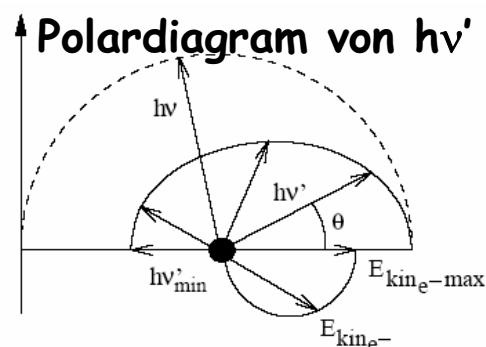
$$E_{kin_e} = h\nu \frac{\frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)}$$

$$= h\nu - h\nu'$$

Sonderfälle:

$$\theta = 0^\circ \Rightarrow h\nu' = h\nu, E_e \approx 0 \text{ (unter } 90^\circ)$$

**Energie des gestreuten Photons:
Ellipse mit Exzentrizität
die mit Frequenz $h\nu$ ansteigt**



$$h\nu_{\min} = \frac{h\nu}{1 + 2 \frac{h\nu}{m_e c^2}}$$

**Zentraler
Stoß:
 $\theta=180$;**

$$\rightarrow \frac{m_e c^2}{2} = \text{const. für } E_\nu \gg m_e c^2$$

$$\rightarrow h\nu \text{ für } E_\nu \ll m_e c^2 \text{ (Thompson-Grenzfall)}$$

April 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

25



Relativistische Streuung

Eine genauere Behandlung unter Verwendung der relativistischen Wellenmechanik führt auf die „Klein-Nishina-Gleichung“ (s. Lehrbücher). Für unpolarisierte Strahlung gilt:

$$\frac{d\sigma_e}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 \left(\frac{\nu'}{\nu} \right)^2 \left(\frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} - \sin^2 \theta \right)$$



Zum Mitnehmen

Die elektromagnetische Strahlung hat bei kurzen Wellenlängen Teilchencharakter, d.h. die Strahlung besteht aus Wellenpakete die bestimmte Energie und Impuls haben.

Experimentell wurde diese Quantisierung der e.m. Wellen beobachtet durch:

Photoeffekt
Comptonstreuung

die alle nur verstanden werden können, wenn die Lichtquanten oder Photonen eine

Energie $h\nu$
Impuls $h\nu/c = h/\lambda$
Masse $m = E/c^2 = h\nu/c^2 = p/c$
besitzen.



Vorlesung 4: Das Photon

Roter Faden:

Eigenschaften des Photons

Photoeffekt
Comptonstreuung
Gravitation
Plancksche Temperaturstrahlung

} -> VL3

} -> VL4

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Teilweise benutzte Skripte:

<http://www.physi.uni-heidelberg.de/~specht/>

<http://www.wmi.badw-muenchen.de/E23/lehre/skript/>

April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

1



Gravitationseffekt beim Photon

Das Photon hat eine relativistische Masse $m = E/c^2 = hv/c^2$ und empfindet dementsprechend eine Gravitationskraft, die sich als Rotverschiebung (oder Blauverschiebung bei "fallendem" Photon) im Gravitationsfeld bemerkbar macht.

Diese Rotverschiebung wurde im berühmten Experiment von Pound und Repka (1960) nachgewiesen: durch Gravitation verliert ein Photon bei der Höhe H nach Newtonscher Mechanik die Energie

$$mgH = h\Delta\nu \text{ und mit Photonmasse } m=hv/c^2 \text{ folgt } \Delta\nu/\nu=gH/c^2$$

Effekte jedoch sehr klein ($\Delta\nu/\nu \approx 10^{-15}$ für $H=45\text{m}$).

Trick: benutze Mössbauer-Effekt um Frequenzverschiebungen sehr genau zu messen.

(PS. Korrekte Beschreibung nach der Allgemeinen Relativitätstheorie ergibt für kleine $\Delta\nu$ die gleiche Antwort)

April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2

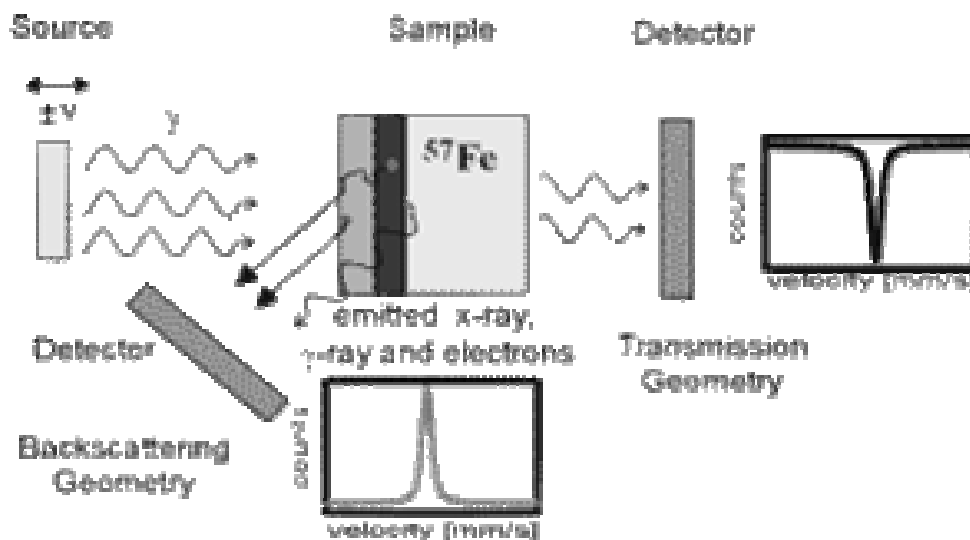


Mössbauer Effekt

The Mössbauer effect was discovered in 1958 by R.L. Mössbauer. He showed that nuclear radiation can be emitted and absorbed recoilless if the atoms are placed in a solid state. For this experiment, also called nuclear resonant absorption, one needs a radioactive source which decays via an excited state into the so-called Mössbauer isotope. Depending on the lifetime of the excited state, the energy of the radiation can be extremely sharp. In the case of the ^{57}Fe isotope the energy uncertainty, called natural linewidth, is 5×10^{-9} eV compared to the energy of 14.4×10^3 eV of the radiation. By moving the source the energy of the radiation increases via the Doppler effect, if the source moves towards the sample and vice versa. A velocity of 1 mm/s corresponds to an energy of 50×10^{-9} eV. Absorption can only occur, if the spectrum of the source overlaps with energy levels of the sample. Hence the Mössbauer spectrum is a picture of the hyperfine interaction of the sample. Several parameters can be extracted from the spectrum. These parameters can determine the chemical and magnetical phases of the sample like a fingerprint.



Pound-Repka Versuch zur gravitativen Rotverschiebung der e.m. Strahlung

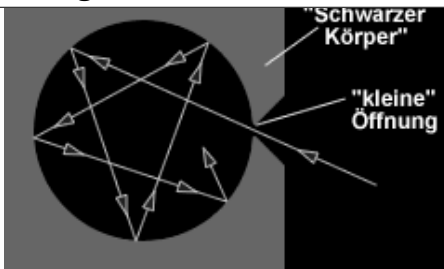


Pound und Repka benutzten die Schärfe der Mössbauer Linien um die sehr kleine Rotverschiebung der Photonen im Gravitationsfeld ($\Delta\nu/\nu \approx 10^{-15}$) in 1959 nachzuweisen durch den Abstand zwischen Quelle und Eisenabsorber bis zu 45 m zu variieren.

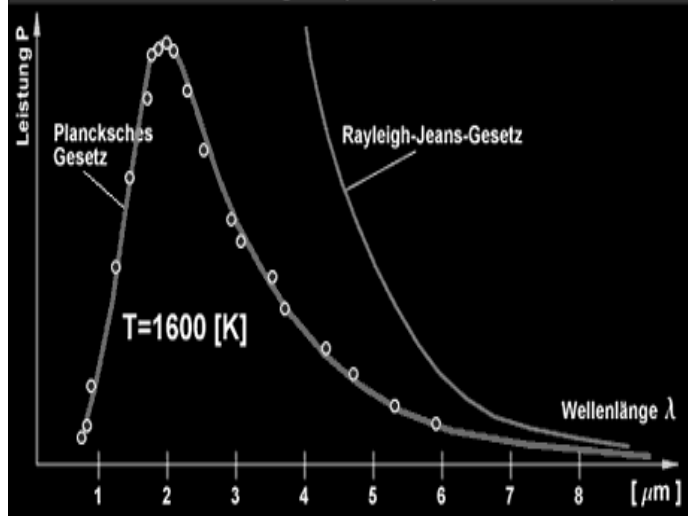


Temperaturstrahlung oder Hohlraumstrahlung oder Schwarzkörperstrahlung

Strahlung eines sogenannten 'Schwarzen Körpers' ist nichts anderes als ein System, das sämtliche einfallende Strahlung absorbieren soll. Am nächsten kommt man diesem Idealfall mit einem Hohlraumstrahler, der ungefähr so aussieht:



Strahlungsleistung P eines Hohlraumstrahlers als Funktion von Wellenlänge λ (bei Temperatur $T=1600$ K)



Die austretende Strahlung ist unabh. vom Material und hat ein Maximum bei einer Wellenlänge, das - wie Wilhelm Wien zeigen konnte - bei $2.898[\text{mmK}]/T$ liegt. D.h. je größer die Temperatur des schwarzen Körpers, desto weiter verschiebt sich das Maximum zu *kleineren* Wellenlängen hin. Das ist das Wiensche Verschiebungsgesetz. Klassisch nicht erklärbar!



Rayleigh-Jeans Gesetz

Die Spektralverteilungsfunktion lässt sich nach der klassischen Thermodynamik relativ einfach berechnen. Als Ergebnis erhält man die Gleichung von Rayleigh-Jeans:

$$P(\lambda, T) = \frac{8\pi k_B T}{\lambda^4}$$

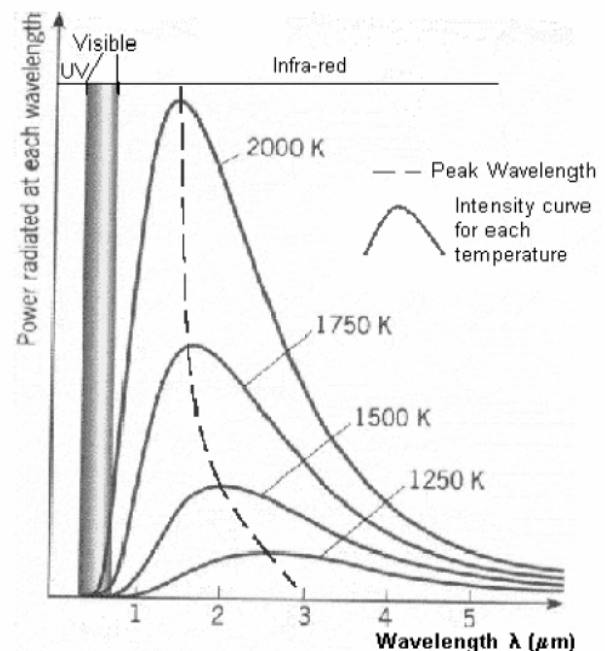
k_B ist dabei die Boltzmannkonstante. Im vorigen Diagramm ist das als blaue Kurve dargestellt. Man sieht, dass diese Beziehung nur bei großen Wellenlängen halbwegs vernünftig mit der Spektralfunktion übereinstimmt. Je kleiner die Wellenlängen werden, desto deutlicher weicht die Rayleigh-Jeans-Kurve von der 'richtigen' Verteilung ab. Da λ im Nenner steht strebt dieser Wert gegen Unendlich, wenn λ gegen 0 geht, was man auch als 'Ultraviolett Katastrophe' bezeichnet hat.



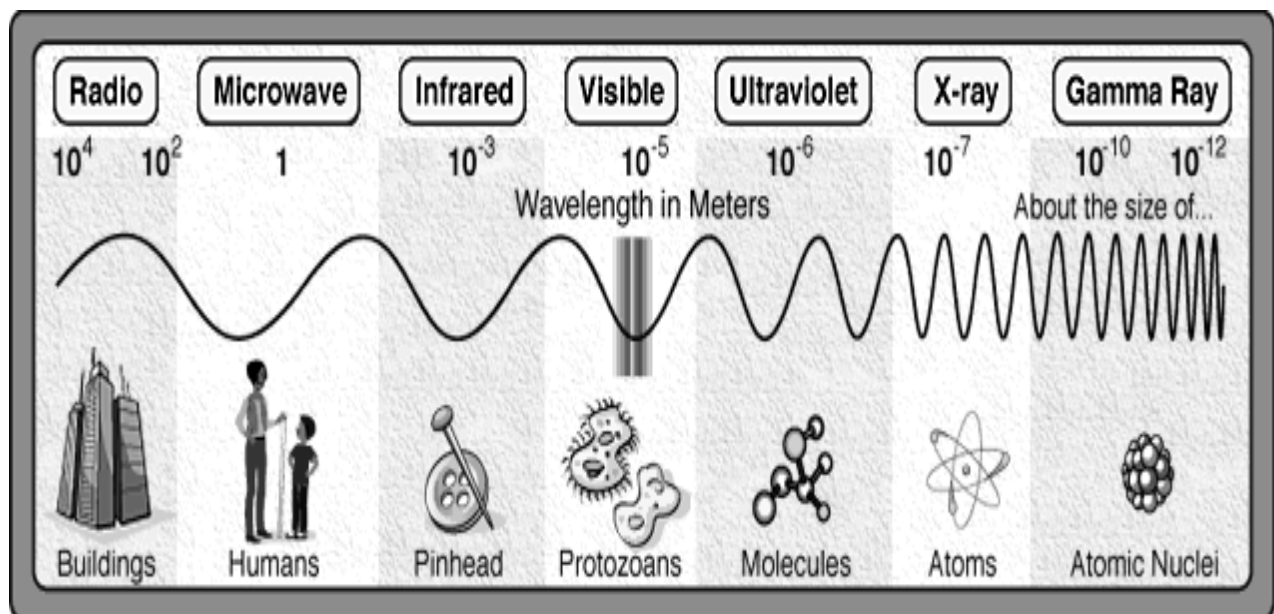
Eigenschaften der Schwarzkörperstrahlung

- Die Charakteristik der Schwarzkörperstrahlung ist nur von der Temperatur an der Oberfläche des Strahlers abhängig.
- Stefan-Boltzmann: **Energiedichte $\sim T^4$**
- Wien: $\lambda_{\max} T = \text{const} = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$.
- Plancksche Intensitätsverteilung:

$$I(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$



Das elektromagnetische Spektrum





Aus Planck's Nobelpreis Rede

Eventually after some weeks of the hardest work of my life, light entered the darkness, and a new inconceivable perspective opened up before me. ...

Because [a constant in the radiation law] represents the product of energy and time ... I described it as the elementary quantum of action. ... As long as it was looked on as infinitely small ... everything was fine; but in the general case, however, a gap opened wide somewhere or other, which became more striking the weaker and faster the vibrations considered. Either the quantum of action was a fictional quantity, then the whole deduction of the radiation law was essentially an illusion or the derivation of the radiation law was based on a sound physical conception. In this case the quantum of action must play a fundamental role in physics, and here was something completely new, never heard of before, .. My futile attempts to put the elementary quantum of action into the classical theory continued for a number of years and they cost me a great deal of effort.

April 21, 2005

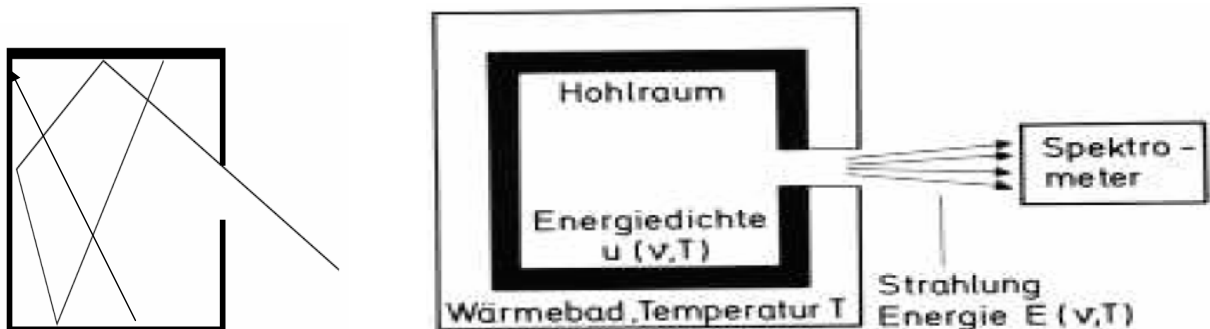
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Temperaturstrahlung eines schwarzen Körpers ("Hohlraumstrahlung")

Schwarzer Strahler = Hohlraum, bei dem sich die emittierte Strahlung im thermischen Gleichgewicht mit seinen Wänden befindet.



Spektrometer mißt Wellenlänge und Strahlungsintensität unter Winkel θ .

$$\text{Energiedichte } u(\nu, T) = \frac{\text{Strahlungsenergie im Frequenzbereich } [\nu, \nu + d\nu]}{\text{Volumen}}$$

$$2P(\nu, T)d\nu = \text{Strahlungsflussdichte} = \frac{\text{Strahlungsleistung } (\frac{E}{\Delta t})}{\text{Fläche u. Raumwinkel}}$$

April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

10

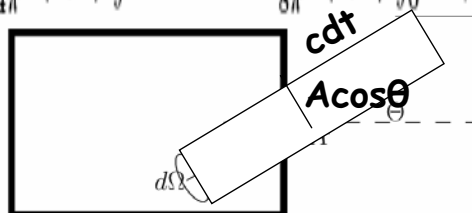


Berechnung der Strahlungsflussdichte (=Leistung/(Fläche u. Raumwinkel))

mit $E = u(\nu, T) d\nu \rightarrow$ Energie Pro Volumeneinheit und $c \Delta t A \cos \theta \rightarrow$ Volumen der ausgesandten Strahlung unter einem Winkel in einer Zeit Δt , d.h. die pro Frequenzintervall $d\nu$ abgestrahlte Energie $E/d\nu = \text{density} \times \text{Volumen} = u(\nu, T) c \Delta t A \cos \theta$
(Faktor 2, weil P pro Polarisationsgrad angegeben wird. Photon mit 2 transversalen Polarisationsrichtungen)

Strahlungsflussdichte/ $d\nu$ =

$P(\nu, T) \equiv \int \frac{E}{2\Delta t d\nu} \frac{d\Omega}{4\pi A} = \frac{1}{2} \frac{c}{4\pi} u(\nu, T) \int \cos \theta d\Omega = \frac{c}{8\pi} u(\nu, T) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta = \frac{c}{8} u(\nu, T)$, wobei das Integral π ergibt.



Plancksche Strahlungsformel

- P unabhängig vom Material, nur (starke) Fkt. der Temperatur
- Planck konnte diese Daten beschreiben, wenn er für die Energiedichte folgende Formel annahm:

$$E = u(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1}, \text{ woraus folgt:}$$

$$P(\nu, T) d\nu \equiv \frac{c}{8} u(\nu, T) d\nu \equiv \frac{h \nu^3}{c^2 (\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1)} d\nu$$

- h = Planck-Konstante oder Plancksches Wirkungsquantum, da er annahm, dass Energieniveaus der Elektronen durch harmonische Oszillatoren mit Energieniveaus $W_n = nh\nu$, $n=0,1,2,\dots$, beschrieben werden
- **KM:** $u(\nu, T) \propto \nu^2$ (Raleigh-Jeans'sches Gesetz, $u \rightarrow \infty$ für $\nu \rightarrow \infty$ (UV-Katastrophe). Dies wird nicht durch Daten bestätigt, exp-Fkt. in Planckscher Formel verhindert UV-Katastrophe.

Da $\exp x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots$, gilt bei kleinen Frequenzen $P \propto \frac{h\nu^3}{kT} \propto \nu^2$ unabhängig von h .

Schlussfolgerung: Bei kleinen Frequenzen und /oder einer hohen Temperatur geht das Plancksche Strahlungsgesetz in das Raleigh-Jeans'sche-Gesetz über, daher die Quanteneffekte verschwinden.



Die Plancksche Strahlungsformel als Funktion von Frequenz oder Wellenlänge

$$P(\nu, T) = \frac{h\nu^3}{c^2} \cdot \left(\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \right)$$

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

$h = 6.6260755 \cdot 10^{-34} [J s]$
 $k_B = 1.380658 \cdot 10^{-23} \left[\frac{J}{K} \right]$
 $[E] = \left[\frac{J}{m^2 \cdot s \cdot sterad \cdot Hz} \right]$

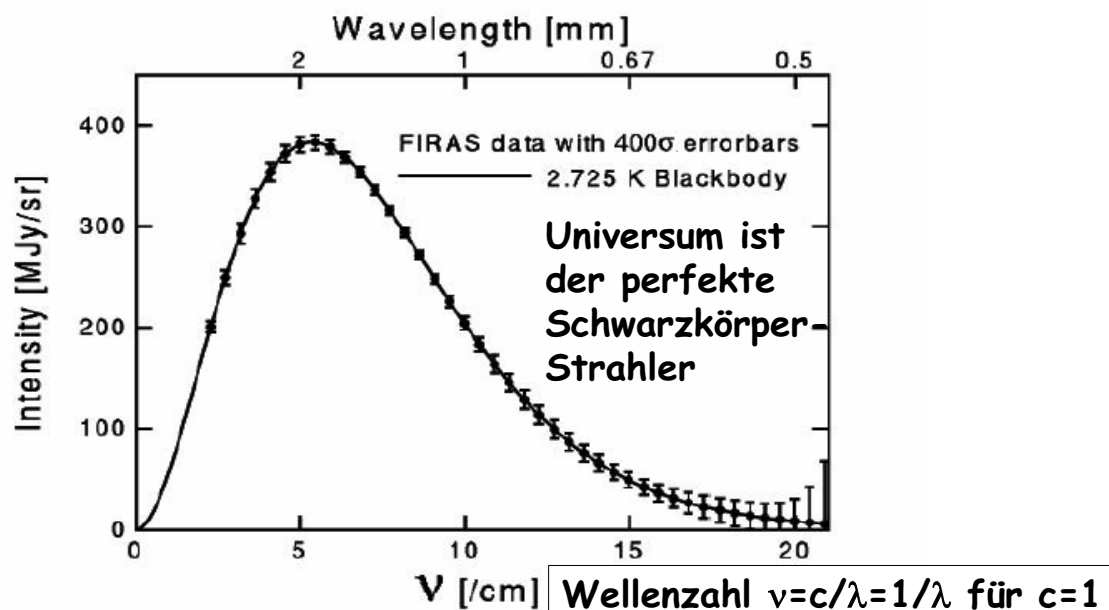
April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

13



Temperatur unseres Universum aus der kosmischen Hintergrundstrahlung



$T = 2.728 \pm 0.004 \text{ K} \Rightarrow$ Dichte der Photonen 412 pro cm^3
 Wellenlänge der Photonen ca. 1,5 mm, so dichteste Packung
 ca. $(10 \text{ mm} / 1.5 \text{ mm})^3 = \text{ca. } 300/\text{cm}^3$, so 400 sind viele Photonen/ cm^3

April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

14



Frage:

Wie könnte man sonst die Temperatur des Universums ausserhalb den Himmelskörpern bestimmen?



Plancksche Formel eines schwarzen Strahlers

Im Einheitsvolumen und dem Frequenzintervall $(\nu, \nu + d\nu)$ sind

$$n_\gamma(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (5.3)$$

Photonen der Energie $h\nu$ enthalten. Zur Herleitung dieser Formel sei auf die Thermodynamik und Quantenmechanik verwiesen. Gegen Ende des 19. Jahrhunderts brauchte man dazu übrigens 40 Jahre. Erstaunlicherweise hängt Plancks Formel von lediglich einer Variablen, der Temperatur T ab. Der Peak des Energiespektrums von Photonen im thermischen Gleichgewicht liegt bei

$$\nu_{max} \approx 6 \times 10^{10} T, \quad (5.4)$$

wenn ν in Hertz und T in Kelvin gegeben sind.

Die Gesamtzahl der Photonen im Einheitsvolumen, die *Anzahldichte* N_γ ist gegeben durch

$$N_\gamma = \int_0^\infty n_\gamma(\nu) d\nu \approx 1.202 \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{kT}{c\hbar} \right)^3. \quad (5.5)$$

Da jedes Photon der Frequenz ν die Energie $h\nu$ trägt, ist die Gesamtenergiedichte der Strahlung durch das *Stefan-Boltzmann-Gesetz*

$$\epsilon_\gamma = \int_0^\infty h\nu n_\gamma(\nu) d\nu = \frac{\pi^2}{15} \frac{k^4 T^4}{\hbar^3 c^3} \equiv aT^4 \quad (5.6)$$



Temperaturentwicklung des Universums

Zu Beginn des Universums herrschte enorme Hitze und Druck in einem sehr kleinen Raumvolumen. Die Energiedichte im Universum wurde hauptsächlich durch Strahlung bereitgestellt, weshalb man von *strahlungsdominierter Ära* spricht. Weil die Temperatur zu hoch war, konnten sich noch keine Atome oder Atomkerne formen. Lediglich deren Bausteine – freie Elektronen, Protonen, Neutronen und einige instabile Teilchen mit ihren Antiteilchen – konnten überleben. Sie kollidierten mit nahezu Lichtgeschwindigkeit ständig untereinander und tauschten sowohl mit ihresgleichen, als auch mit den Photonen Energie und Drehmoment aus. Es kann also angenommen werden, daß die Energie gleichmäßig unter ihnen verteilt war. Ein *thermisches Gleichgewicht* hatte sich eingestellt, die Photonen stellten einen *schwarzen Körper*, wie er 1900 von *Max Planck* hergeleitet wurde, dar.



Entstehung der Kosmischen Hintergrundstrahlung Cosmic Microwave Background (CMB)

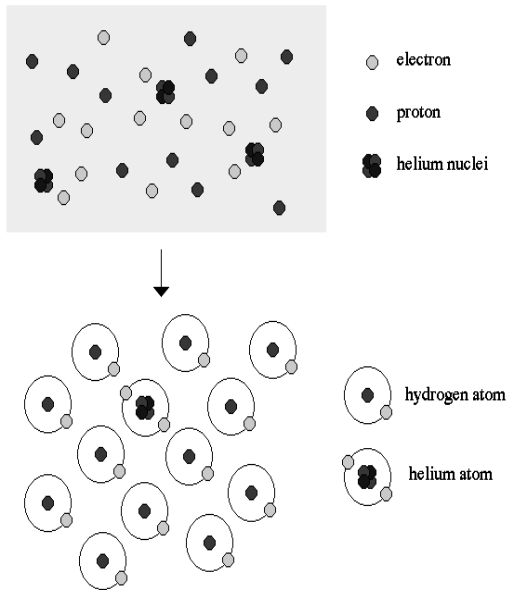
- Bis 300000 Jahre nach dem Urknall:
 - (Thomson-)Streuung der Photonen v.a. an freien Elektronen (undurchsichtiges Universum)
 - Universum kühlt sich weiter ab: Rekombination zu Wasserstoff
=> weniger freie Elektronen
=> mittlere freie Weglänge der Photonen wächst
- Ca. 300000 Jahre nach dem Urknall wird das Universum transparent für Licht (Entkopplung der Photonen von der Materie)



Nach Rekombination 'FREE STREAMING' der Photonen

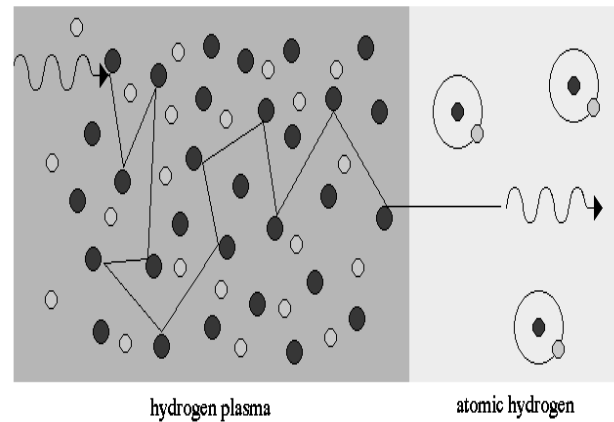
Recombination

As the Universe expands and cools, protons and electrons combine to form hydrogen (the most abundant element). And helium nuclei combine with electrons to form helium atoms. This process is called recombination.



Last Scattering Epoch

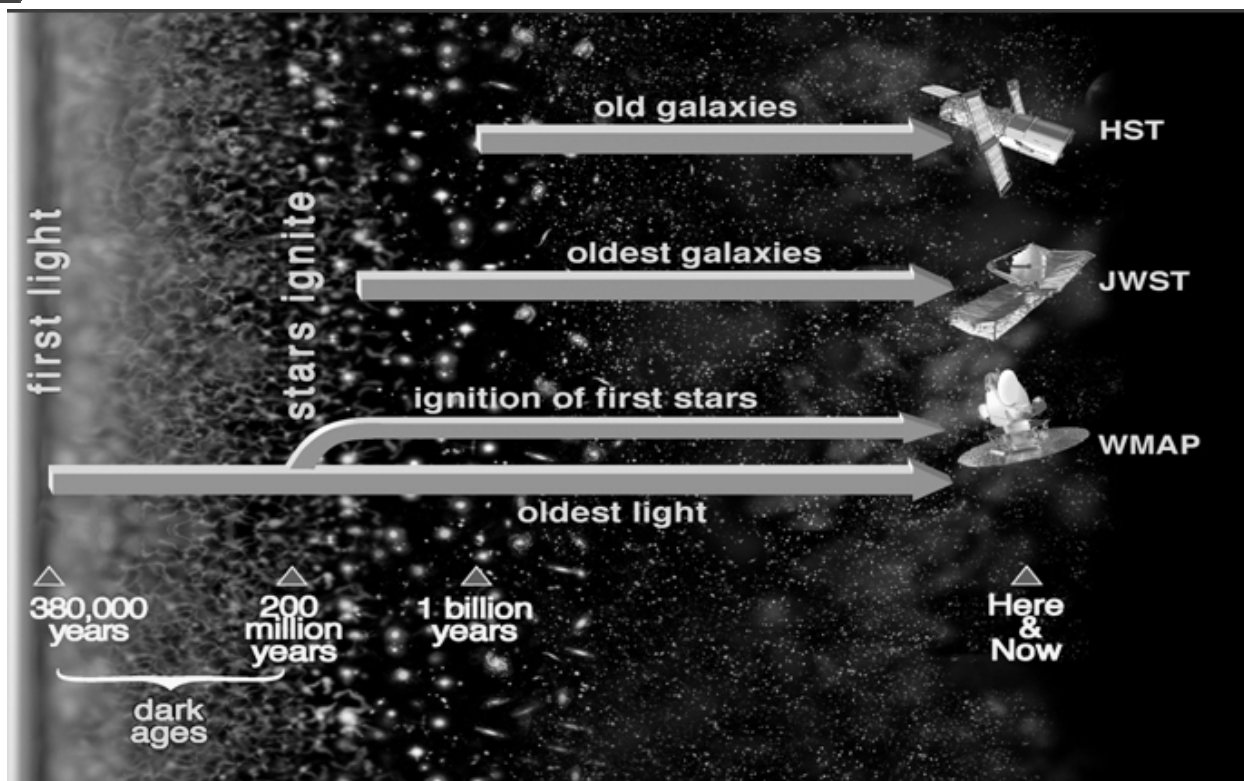
As the Universe cooled, the free electrons and protons could finally bond together to form hydrogen atoms. At the same time, the Universe went from a rich plasma to a gas of neutral hydrogen.



In a plasma, the mean free path of a photon is very short. In a gas of atomic hydrogen, the mean free path is very long, as long as the size of the Universe. Thus, the transition from the early plasma to atomic hydrogen is the epoch of last scattering, the point in time when the photons became free to travel without hindrance.

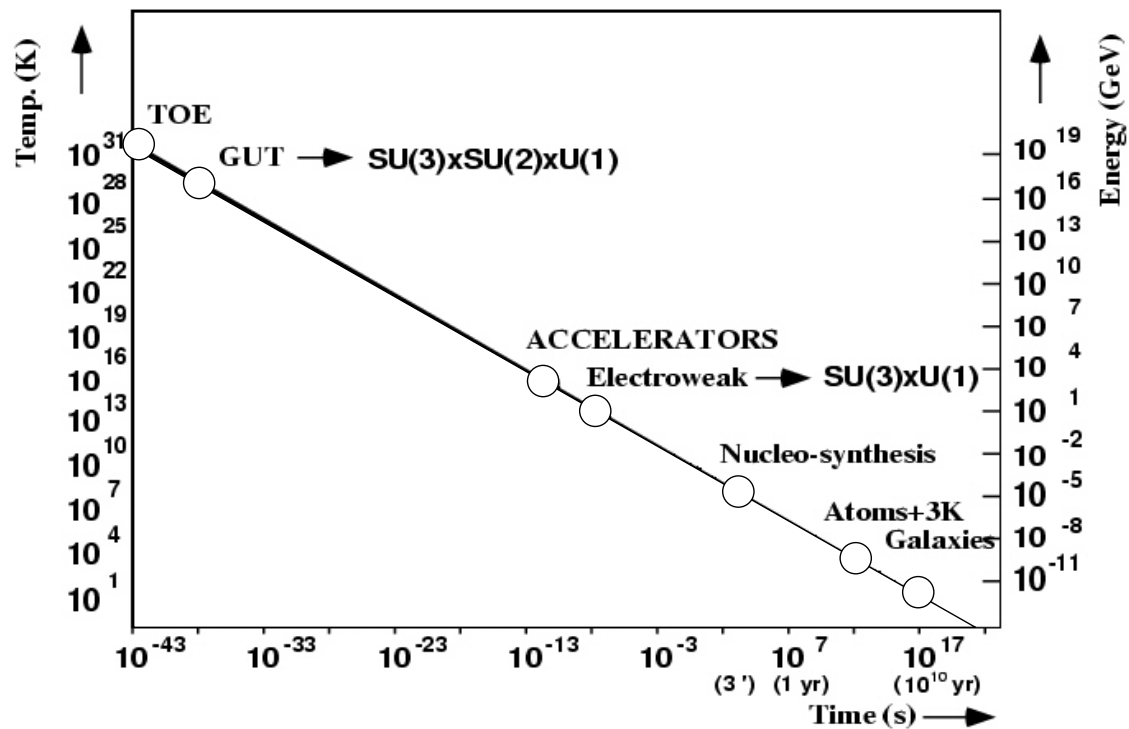


Strahlung im Universum





Temperamenteentwicklung des Universums



April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

21



Wiensches Verschiebungsgesetz

Durch Differenzieren der Plank'schen Verteilung:

$$\frac{T}{\nu_{\max}} = \text{const.}$$

$\Rightarrow$

$$\lambda_{\max} \cdot T = \text{const} = 2.9 \cdot 10^{-3} [\text{m} \cdot \text{K}]$$

Wien'sches
Verschiebungsgesetz

Beispiel: Oberflächentemperatur der Sonne etwa 5500 K, zugehörige Wellenlänge $\lambda_{\max}$ 530 nm (im Grünen)

April 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

22



Stefan-Boltzmann Gesetz

Integral über die gesamte Strahlungsdichte: $S = 2 \int_0^\infty P(\nu, T) d\nu = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} T^4 = GT^4$,

$$S = kT^4$$

Stefan-Boltzmann

Thermodynamisch ist $S \propto T^4$ streng ohne Quantenhypothese begründbar (vor Planck!),
aber: k enthält $h \Rightarrow$ erst durch Planck gelöst



Farbe und Helligkeit L der Sterne starke Fkt. der Temperatur: $\nu \propto T$ und $L \propto T^4$

Helligkeit im Bild prop. Zur Fläche



Blaufilter

Kein Filter

Rotfilter

Durch Verschiebungsgesetz sind die Helligkeiten der Sterne eine starke Funktion der Farbe! Brauche mehrere Filter um Abstand zu bestimmen.



Herleitung der Planckschen Strahlungsformel nach Einstein

Planck erklärte seine Formel durch die Annahme das Atome sich verhalten wie harmonische Oszillatoren, die nur diskrete Energiewerte $E = nh\nu$ annehmen können und bei diesen Energien Strahlung absorbieren und emittieren.

Einstein konnte in 1917, nach der Entdeckung der Photonen und die Quantisierung der Energieniveaus der Atome die Plancksche Strahlungsformel relativ einfach herleiten. Es gibt folgende Möglichkeiten für die :

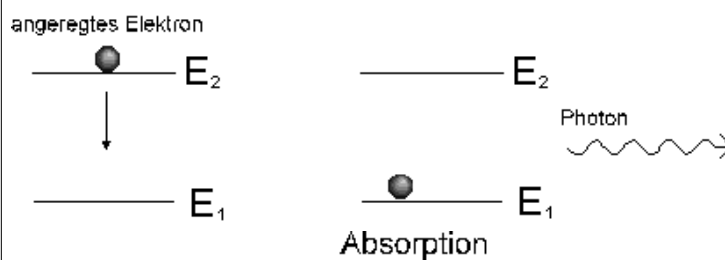
- a) Spontane Emission nach einem niedrigen Niveau unter Aussendung eines Photons (unabh. von Strahlungsdichte)
- b) Absorption eines Photons ($\propto$ Photonendichte) und Übergang nach einem höheren Niveau
- c) Induzierte Emission ($\propto$ Photonendichte) und Übergang nach einem höheren Niveau

Nur nach dieser Verknüpfung von Photoeffekt, Comptonstreuung, Bohrsche Atommodell und Plancksche Strahlungsformel wurde Plancks Quantenhypothese akzeptiert. Er gilt als Gründer der Quantenmechanik.



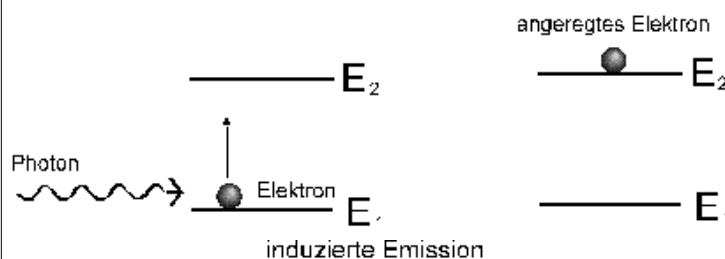
Bildliche Darstellung der möglichen Übergängen bei Schwarzkörperstrahlung

spontane Emission



$$dN_{21} = A_{21} N_2 dt$$

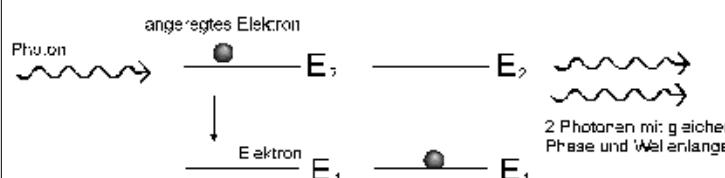
N_1, N_2 sind die Besetzungszahlen



$$dN_{12} = B_{12} u(\nu) N_2 dt,$$

$u(\nu)$ = Dichte der Photonen;

A_{21}, B_{21}, B_{12} sind die Einsteinkoeffizienten



$$dN_{21} = B_{21} u(\nu) N_2 dt$$

2 Photonen mit gleicher Phase und Wellenlänge



Herleitung der Planckschen Streuformel nach Einstein

Induzierte Emission: $dN_{21} = B_{21} u(\nu) N_2 dt$

Spontane Emission: $dN_{21} = A_{21} N_2 dt$ (unabhängig von der Dichte der Photonen)

Im thermischen Gleichgewicht: $dN_{12} = dN_{21}$ oder $\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12} u(\nu)}{A_{21} + B_{21} u(\nu)}$ (1)

Im thermischen Gleichgewicht sind die Besetzungszahlen

auch durch die Boltzmann-Statistik gegeben: $\frac{N_2}{N_1} = \frac{\exp(-\frac{E_1}{kT})}{\exp(-\frac{E_2}{kT})}$ (2)

Aus (1) + (2) = (3):

$$u(\nu) = \frac{A_{21}}{B_{12} \exp(\frac{h\nu}{kT}) - B_{21}}$$

Randbedingungen:

- $T \rightarrow \infty$ ergibt $u(\nu) \rightarrow \infty$. Nach (3) kann $u(\nu)$ nur ∞ werden

$$B_{12} = B_{21}$$

- Bei kleinen Frequenzen : $u(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} kT$ (RJ-Gesetz), dann gilt:

$$u(\nu) = \frac{A_{21}}{B_{12}} \frac{kT}{h\nu} \rightarrow \left| \frac{A_{21}}{B_{12}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \right| (4)$$

Aus (3) und (4) :

$$u(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1}$$



Zum Mitnehmen

Planck postulierte in 1900 die Quantisierung der elektrom. Strahlung um die Spektralverteilung der Strahlung eines Schwarzen Körpers zu erklären. Damit war die Quantenmechanik geboren.

18 J. später lieferte Einstein die Herleitung der Planckschen Strahlungsformel in der Form von Absorption und Emission von Photone

Da Photonen Energie besitzen, haben sie nach $E=mc^2=h\nu$ eine Masse, die im Pound-Repka Versuch als Rotverschiebung im Gravitationsfeld beobachtet wurde.



	Bose	Boltzmann	Fermi
Teilchen	ununterscheidbar	unterscheidbar	ununterscheidbar
Spin	ganzzahlig (0, 1, 2, ...)	-	halbzahlig ($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$)
Eigenfunktionen	symmetrisch	-	antisymmetrisch
qualitatives Verhalten	besetzen bevorzugt gleiche Zustände	-	Pauli-Prinzip: besetzen nie gleiche Zustände
P(E)	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)} - 1}$	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)}}$	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)} + 1}$
übliche Schreibweise	$\frac{1}{e^{(\alpha + E/kT)} - 1}$	$Ae^{-\frac{E}{kT}}$	$\frac{1}{e^{(E - E_F)/kT} + 1}$
Beispiele	Photonengas (Plancksches Gesetz) Phononengas flüssiges Helium Bose-Einstein-Kondensat	klassische Gase bei jeder Temperatur	Entartetes Elektronengas in Festkörper-, Atom-, Kern- und Astrophysik



Vorlesung 5:

Roter Faden:

Elektron als Welle Heisenbergsche Unsicherheitsrelation

(Elektron: griechisch für Bernstein, das durch Reibung elektrostatisch aufgeladen wurde)

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>



Erzeugung von Elektronen

a) Thermische Emission aus Festkörperoberflächen

Metall - auf hohe T aufheizen - frei bewegliche Elektronen erhalten hohe kinetische Energie - überwinden Austrittsarbeit W_a - Glühemission.

Elektrisches Feld - Elektronen gehen zu positiver Anode.

Richardson Gesetz: $j_s = A \cdot T^2 \cdot e^{-e \cdot U_A / kT}$

Konstante A materialabhängig.

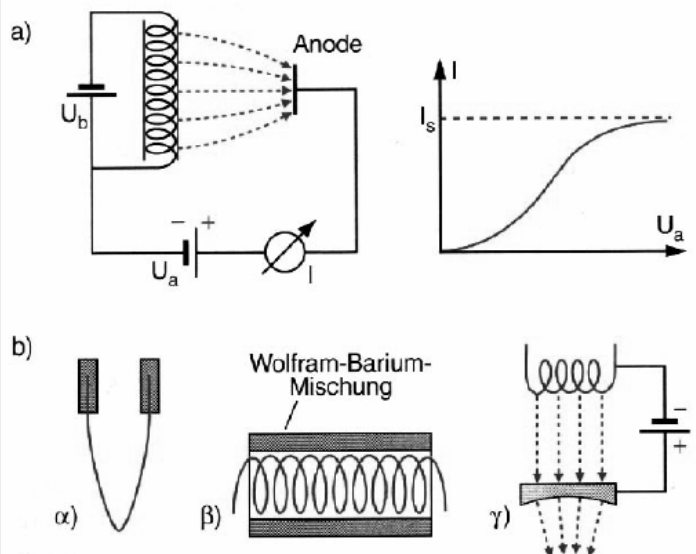
Für hohe Stromdichten Materialien mit niedriger W_a aber sollen hohe Temperaturen aushalten; z.B.: W, Ba, Cs-Verbindungen.

Anwendung: Elektronenröhren, Fernsehröhren, Senderöhren



Erzeugung von Elektronen

Glühemissionskathoden
(a) Schematische Anordnung zur Messung des Emissionsstroms und Definition der Sättigungsstromdichte;
(b) technische Ausführungsformen von Glühkathoden: α) Haarnadelkathode β) durch eine Heizwendel geheiztes Kathodenröhrchen γ) durch Elektronenbombardement geheizte Kathode mit fokussierender Oberfläche





Erzeugung von Elektronen

Austrittsarbeiten $W_a = e \cdot U_a$ und Stromdichte-Emissions-Koeffizienten A einiger gebräuchlicher Glühkathodenmaterialien

Material	W_a/eV	$A/(\text{Am}^{-2}\text{K}^{-2})$
Barium	2,1	$6 \cdot 10^4$
Wolfram-Barium	1,66	$\sim 10^4$
Wolfram-Cäsium	1,4	$\sim 3 \cdot 10^4$
Thorium	3,35	$6 \cdot 10^5$
Tantal	4,19	$5,5 \cdot 10^5$
Wolfram	4,54	$(1,5-15) \cdot 10^5$
Nickel	4,91	$(3-130) \cdot 10^5$
Thoriumoxid	2,6	$(3-8) \cdot 10^4$



Erzeugung von Elektronen

b) Feldemission

Kathode - feine Spitze. Hohe Spannung zwischen Anode und Kathode ($E \sim 10^{11} \text{ V/m}$) - Elektronen treten aus ("Tunneleffekt").

c) Photoeffekt an Metalloberflächen

Oberfläche eines Metalls wird mit UV-Licht bestrahlt → Elektronen treten aus ("äußerer Photoeffekt").

$$W_{kin} = h \cdot \nu - W_a \quad (\text{Einstein})$$

d) Sekundäremission aus Festkörperoberflächen

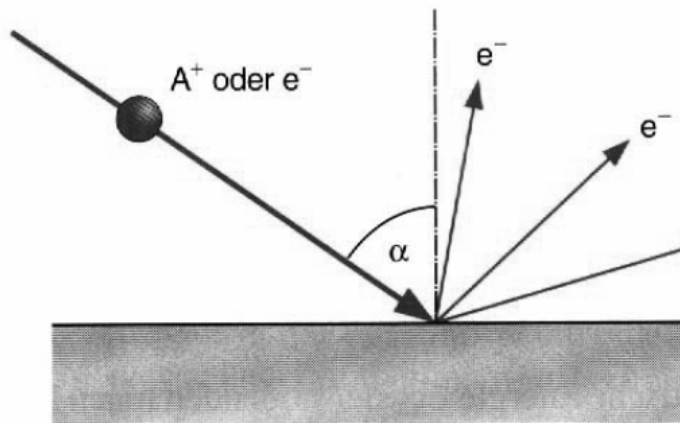
Beschuß von Festkörper mit schnellen Elektronen oder Ionen - Sekundärelektronen

Sekundärelektronenkoeffizient η

Hängt ab vom Material, Einfallswinkel α Art, Energie der einfallenden Teilchen - siehe Tabelle



Sekundäremission



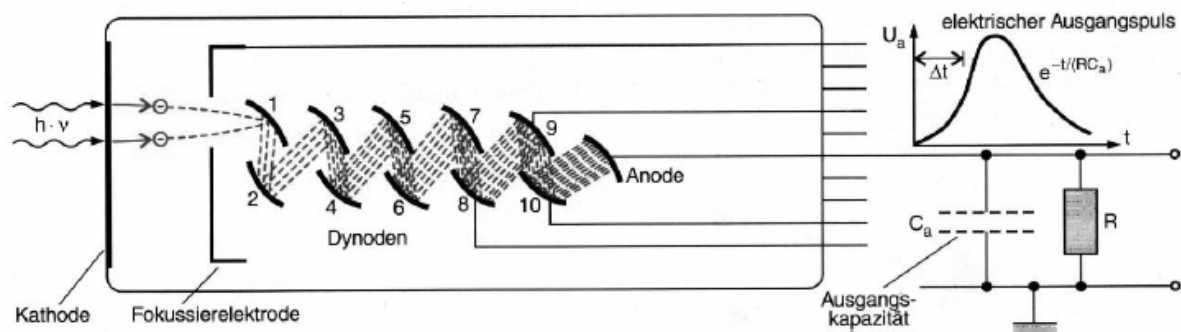
Erzeugung von Sekundärelektronen durch Beschuss Festkörperoberfläche mit Elektronen oder Ionen

Sekundäremissionskoeffizienten η bei der Energie $W_{\max}$ der auftreffenden Primärelektronen, bei der η den maximalen Wert $\eta_{\max}$ annimmt

Material	$\eta_{\max}$	$W_{\max}/\text{eV}$
Ag	1,5	800
Al	1,0	300
C (Diamant)	2,8	750
Na	0,8	300
W	1,4	650
KBr	14	1800
LiF	8,5	700
NaI	19	1300
MgO-Kristall	20–25	1500
MsO-Schicht	5–15	500–1500
GaP + Cs	120	2500



Photomultiplier: Photoeffekt plus Sekundäremission



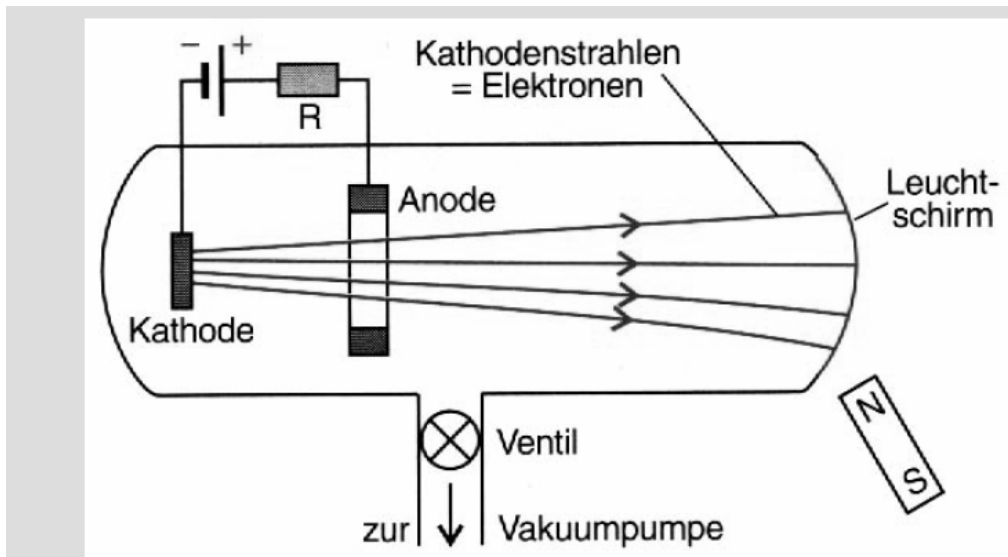
Prinzip des Sekundärelektronenvervielfachers (Photomultiplier). Die Anstiegszeit Δt des Ausgangspulses pro Photon gibt die Laufzeitverschmierung der Elektronen im Multiplier an. Die Abfallflanke hängt nur von C_a und R ab.

m...Dynoden $\Rightarrow \eta^m$ Elektronen

$$U_a = \eta^m \cdot e / C_a$$



Erste Experimente mit Elektronen



Schematische Darstellung der Anordnung zur Beobachtung der Kathodenstrahlung auf einem Leuchtschirm. Die Anordnung ermöglicht die Ablenkung der Strahlen durch Magnete.

Gasentladungen ionisieren Gas -> neg. und pos. Teilchen

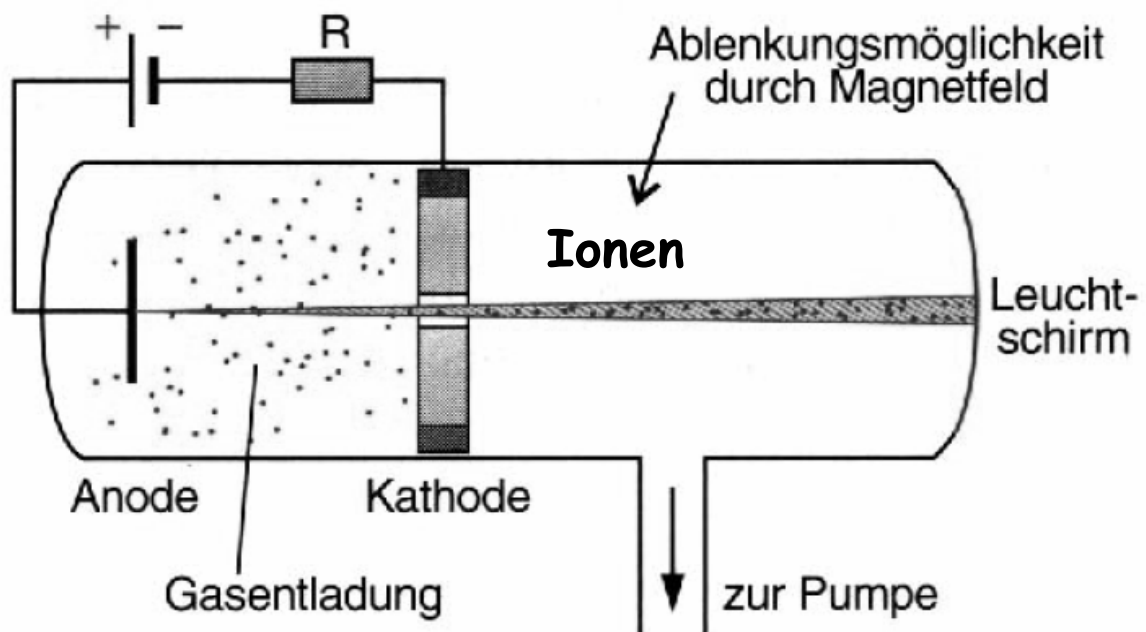
April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

8



Erste Experimente mit Elektronen



Schematische Darstellung der experimentellen Realisierung von Kanalstrahlung in einer Gasentladung bei durchbohrter Kathode.

April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Schlussfolgerung

Kanalstrahlen - positive geladene Partikel - Ionen
Kathodenstrahlen - negativ geladene Teilchen - Elektronen

Atome bestehen aus **negativ geladenen Elektronen** + positiv geladenen Kern.

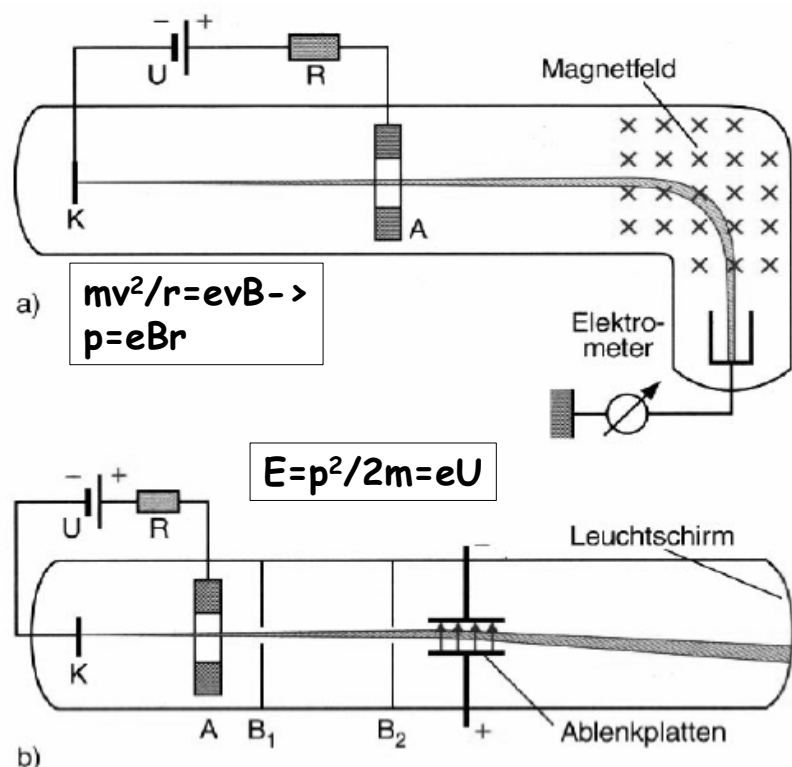
Positiv geladenen **Ionen**: Atome denen ein oder mehrere Elektronen fehlen.



Erste Experimente mit Elektronen

Anordnung von J.J. Thompson zur Bestimmung des Verhältnisses e/m der Kathodenstrahlung durch Ablenkung (a) im Magnetfeld, (b) im elektrischen Feld.

$$e/m = 2U/B^2r^2$$





Bestimmung der Elektronenladung

Öltröpfchenmethode von Millikan (1910)

Öltröpfchen in Luft im elektrischen Feld eines Plattenkondensators:

$$\frac{4\pi a^3}{3}(\rho - \sigma)g = 6\pi\eta a v_0$$

Stokesche Reibungsgesetz

$$\frac{4\pi a^3}{3}(\rho - \sigma)g + E \cdot e = 6\pi\eta a v_1$$

Teilchenradius a , ρ Dichte des Teilchens, σ Dichte der Luft,

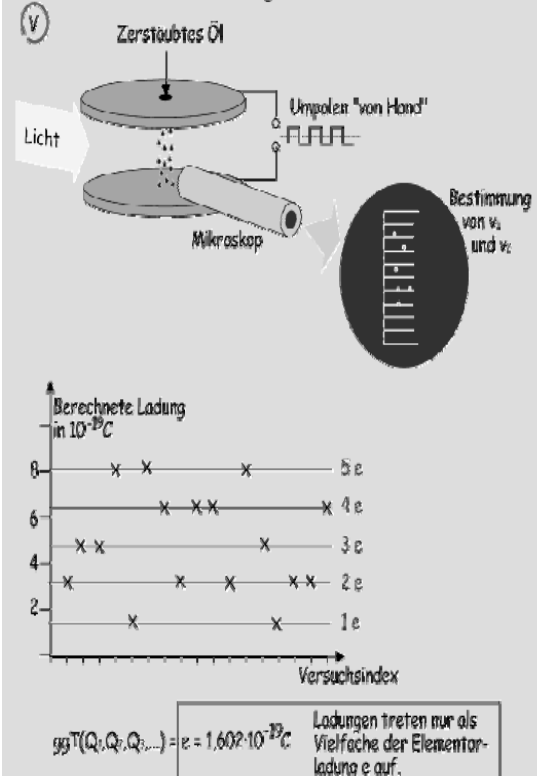
v_0 Sinkgeschwindigkeit (ohne E-Feld) gemessen mit Mikroskop

v_1 Sinkgeschwindigkeit (mit E-Feld) gemessen mit Mikroskop

Daraus folgt: Ladungen können nur in Vielfachen von e auftreten:

$$e = 1.60217733(30) \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Millikanversuch-Durchführung



April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Aus e/m Bestimmung und e -Bestimmung konnte relat. Massenanstieg bestimmt werden

5.2 1901 Kaufmann

entdeckte die relativistische Massenzunahme, die Messung von $\frac{e}{m}$ als Funktion der Energie ergab :

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \equiv \gamma m. \quad (E = 1 \text{ MeV} \rightarrow \gamma = \frac{E}{m_0 c^2} = \frac{1 \text{ MeV}}{0.5 \text{ MeV}} = 2 \rightarrow \beta = \frac{v}{c} \approx 0.9).$$

$$\text{Beachte: } \begin{cases} E = mc^2 \\ \beta = \frac{v}{c} \\ \gamma = \frac{E}{m_0 c^2} \end{cases}$$

E und m beide in Einheiten von eV , wenn $c = 1$ (übliche Einheiten).

$$\text{LEP - Beschleuniger: } E = 100 \text{ GeV} \rightarrow \gamma = \frac{E}{m_0} = 2 \times 10^5 \rightarrow \beta = 0.999$$

**Entdeckung der relat. Massenzunahme von Kaufmann
VOR der Relativitätstheorie in 1905 von Einstein!**

April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

13



Davisson und Germer: Elektron Streuung an Nickel Kristallen

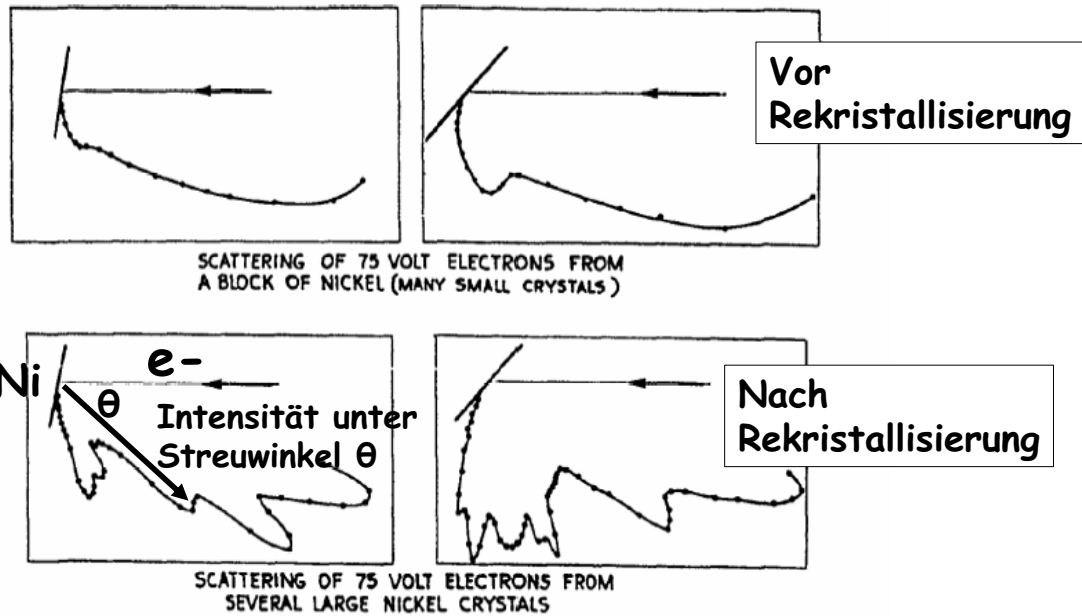


Fig. 1. Scattering curves from nickel before and after crystal growth had occurred.

Zufällige Entdeckung der Bragg-peaks bei Streuung von Elektronen an Ni-Kristalle

April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

14



Davisson und Germer: Elektron Streuung an Nickel Kristallen

Versuch von
C. Davisson und L.H. Germer
Phys. Rev. 30, p705 (1927)

THE investigation reported in this paper was begun as the result of an accident which occurred in this laboratory in April 1925. At that time we were continuing an investigation, first reported in 1921,¹ of the distribution-in-angle of electrons scattered by a target of ordinary (polycrystalline) nickel. During the course of this work a liquid-air bottle exploded at a time when the target was at a high temperature; the experimental tube was broken, and the target heavily oxidized by the intruding air. The oxide was eventually reduced and a layer of the target removed by vaporization, but only after prolonged heating at various high temperatures in hydrogen and in vacuum.

When the experiments were continued it was found that the distribution-in-angle of the scattered electrons had been completely changed. Specimen curves exhibiting this alteration are shown in Fig. 1. These curves are all for a bombarding potential of 75 volts. The electron beam is incident on the target from the right, and the intensities of scattering in different directions are proportional to the vectors from the point of bombardment to the curves. The upper curves (for different angles of incidence) are characteristic of the target prior to the accident. They are of the type described in the note in "Science" in 1921, and are similar to curves that have been obtained for nickel in four or five other experiments. The lower curves—obtained after the accident—were the first of their sort to be observed. This marked alteration in the scattering pattern was traced to a re-crystallization of the target that occurred during the prolonged heating. Before the accident and in previous experiments we had been bombarding many small crystals, but in the tests subsequent to the accident we were bombarding only a few large ones. The actual number was of the order of ten.

It seemed probable from these results that the intensity of scattering from a single crystal would exhibit a marked dependence on crystal direction, and we set about at once preparing experiments for an investigation of this dependence.

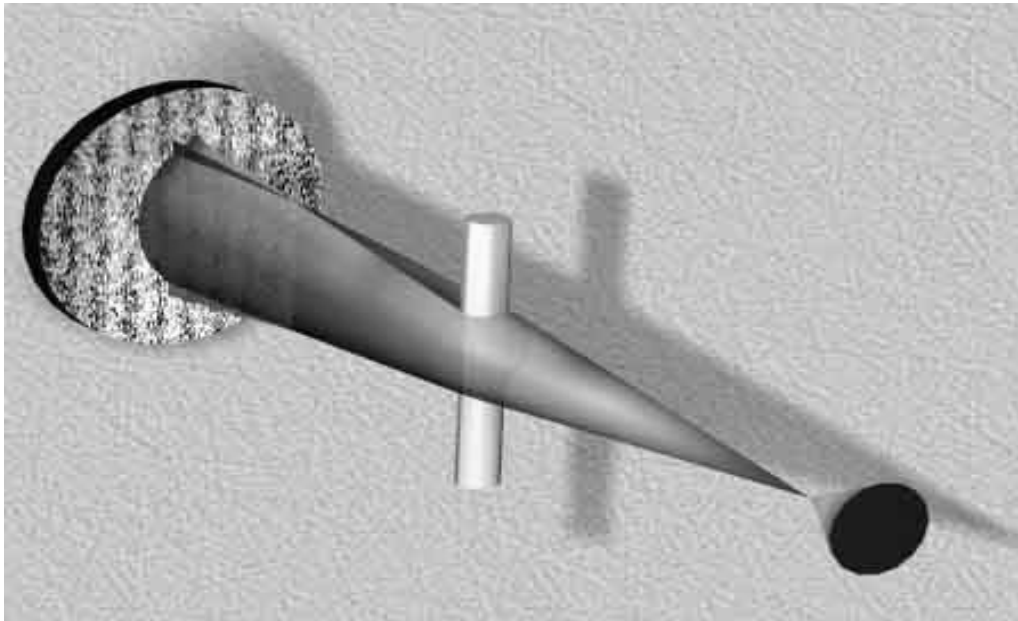
April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

15



Einzel und Doppelspalt Beugung von Elektronen



Max. und Min. in der Intensitätsverteilung nach Streuung an einem Draht zeigen Interferenz, d.h. Wellencharakter der Elektronen

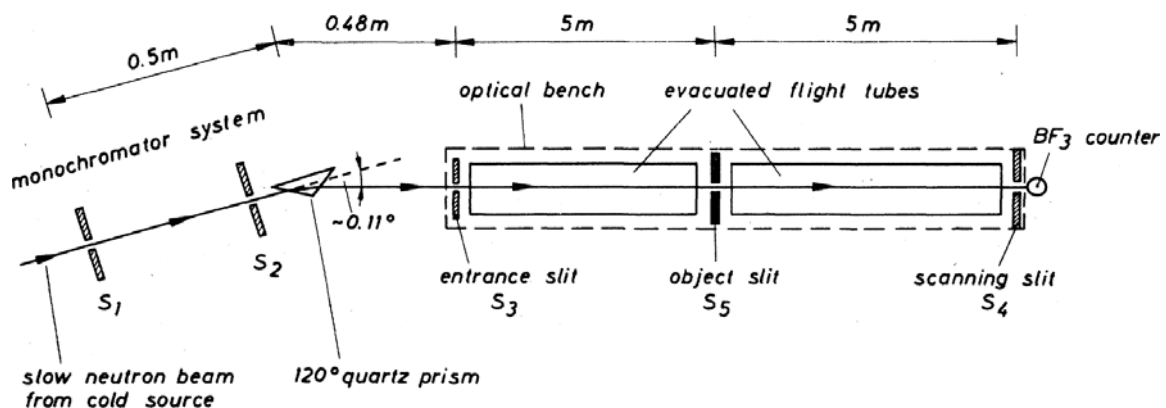
April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

16



Einzel und Doppelspalt Beugung von Neutronen

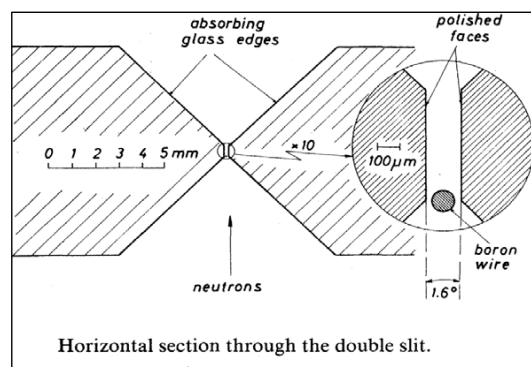


Experiment mit langsamen Neutronen
($v=200\text{m/s}$, $\lambda_{dB} \sim 2\text{ nm}$)

Doppelspalt: $23\text{ }\mu\text{m}$ bzw. $22\text{ }\mu\text{m}$ breit
 $104\text{ }\mu\text{m}$ Abstand

Beugungswinkel $\sim 50\text{ }\mu\text{rad}$ ($\sim 10''$)

A. Zeilinger et al. Rev. Mod. Phys. 60, p.1067 (1988)



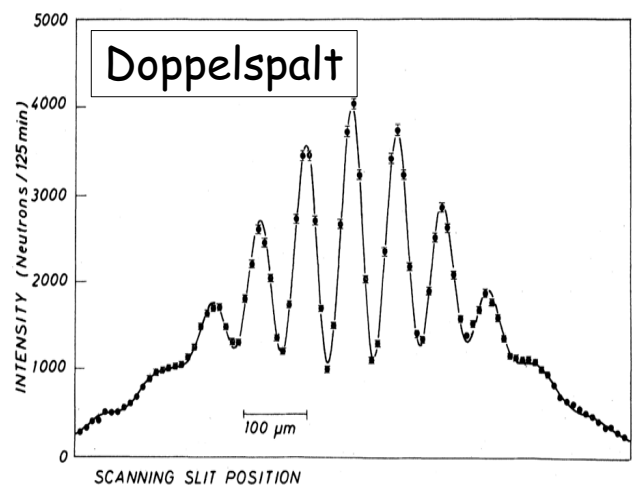
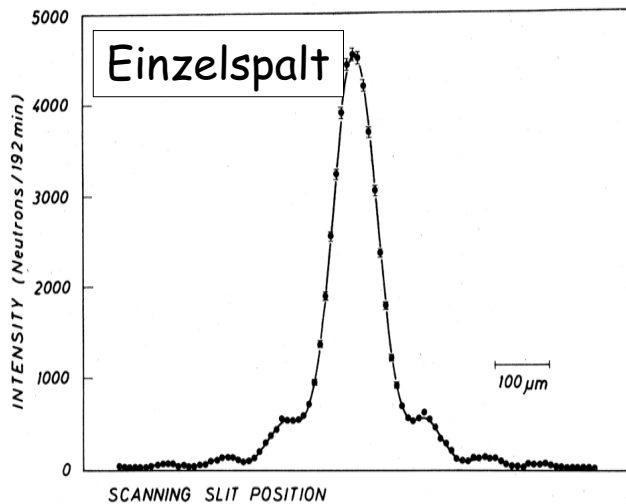
April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



Einzel und Doppelspalt Beugung von Neutronen



Durchgezogene Linie: Vorhersage der (linearen) Quantenmechanik (unter Berücksichtigung aller Parameter wie Geometrie, Geschwindigkeitsverteilung etc ...) A. Zeilinger et al. Rev. Mod. Phys. 60, p.1067 (1988)



De-Broglie Beziehung

Photon: $E = h\nu = hc/\lambda$ und $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$
Daher: für $m=0$ gilt: $E = pc = hc/\lambda$ oder

$$p = h/\lambda \text{ (de Broglie)}$$

Um Interferenzen der Elektronen zu erklären postulierte de Broglie dass diese Beziehung auch für Teilchen gilt!



Elektronenmikroskop

Benutzt zur Abbildung Elektronen: $e \cdot U = h \cdot \nu = h \left(\frac{c}{\lambda} \right)$

$\lambda = \frac{hc}{eU} \rightarrow$ je höher U umso kleiner λ .

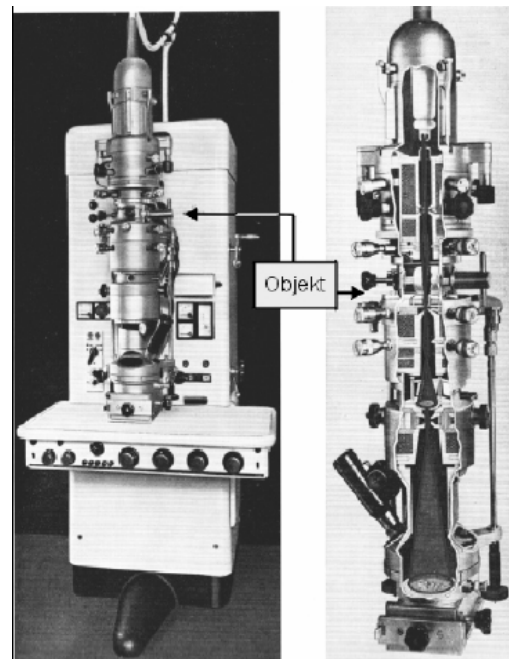
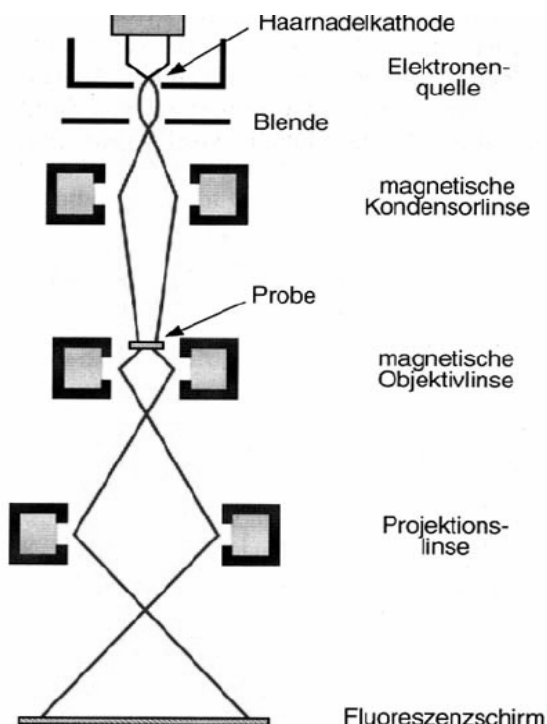
Auflösung heute bis zu 0.1nm

Nachteile:

- In Transmission nur dünne Schichten
- Elektronenstrahl hat hohe Energie und hohe Intensität
- Heizt Probe auf!

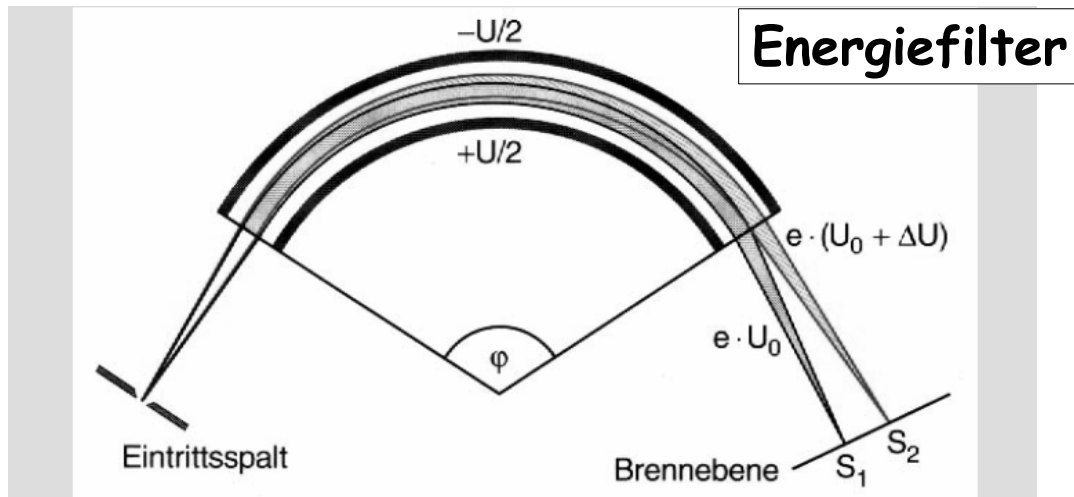


Elektronenmikroskop





Realisierung elektrostatischer Linsen

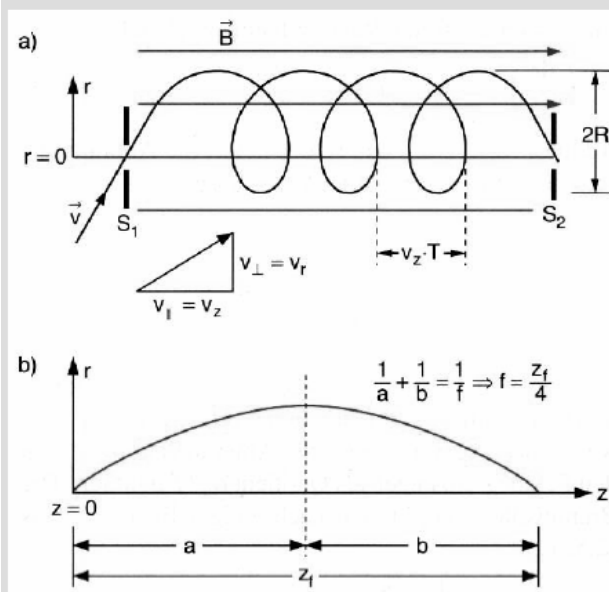


Elektrischer Zylinderkondensator als Elektronen-Zylinderlinse mit Energieselektion. Lage des Spaltbildes hängt von der Energie $e \cdot U_0$ der eintretenden Elektronen ab – wirkt daher als Energieanalysator. Für Elektronen mit der Energie $(m/2)v^2 = e \cdot U_0$ muss Spannung U zwischen den Platten $U = 2U_0 \ln(R_2/R_1)$ sein.



Magnetische Linsen

Elektronen laufen schräg in ein homogenes Magnetfeld B - siehe Abb

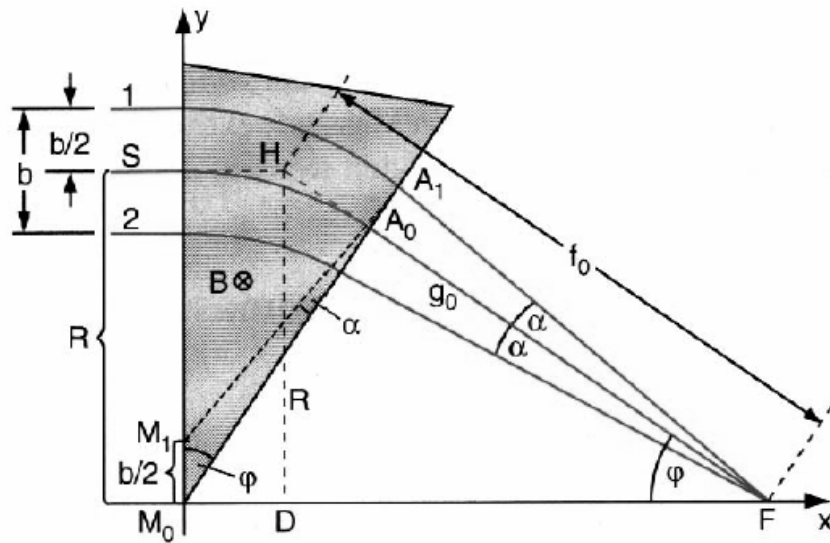


Impulsfilter

Homogenes magnetisches Längsfeld als Elektronenlinse.
(a) Darstellung der Kreisspiralbahn; (b) zur Definition der rennweite für $a = b = z/2$



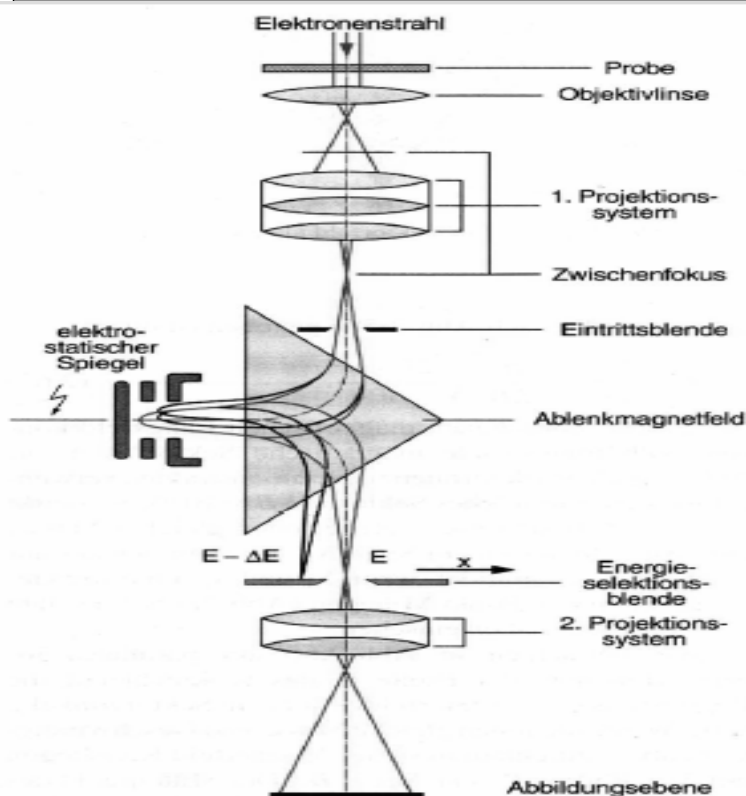
Magnetische Linsen



Fokussierung eines parallelen Ionenstrahls durch ein magnetisches Sektorfeld.



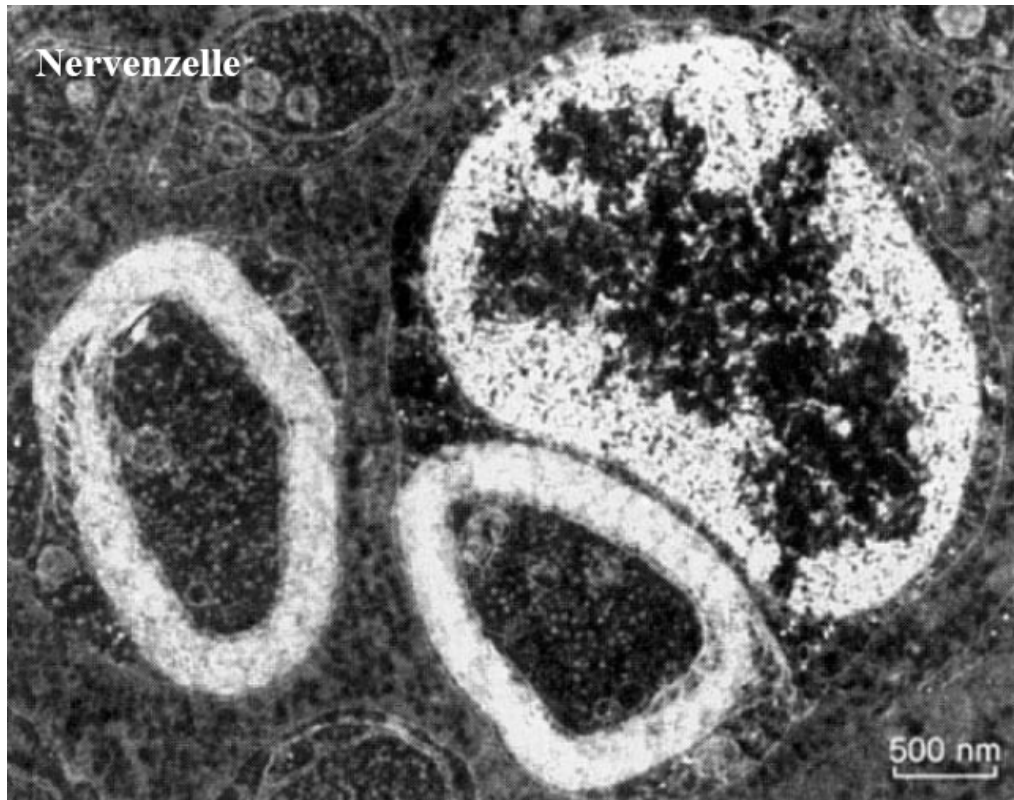
Elektronenmikroskop



wohldefinierte
Energie=
wohldefinierte
Wellenlänge ->
hohe Auflösung



Elektronenmikroskop



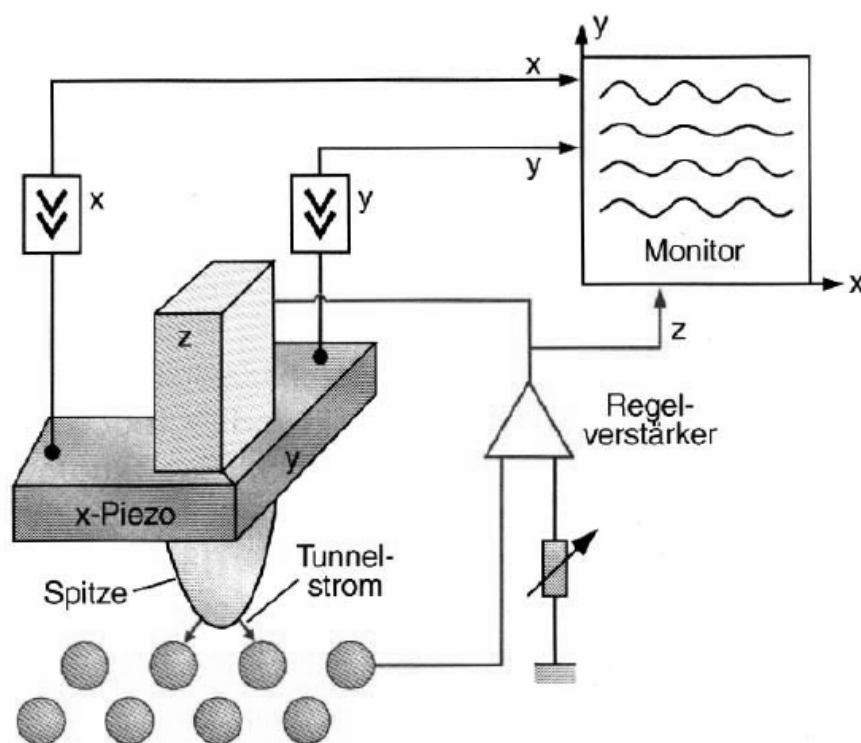
April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

26



Rastertunnelmikroskop



**Konstante
Tunnelstrom
durch
Höhenanpassung
-> Oberflächen-
topographie**

April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

27

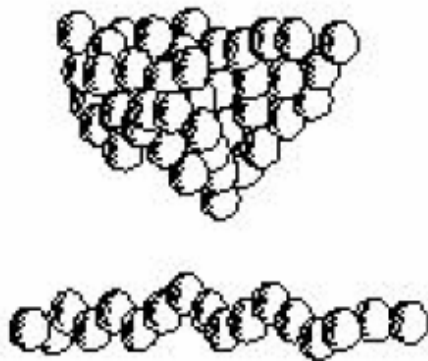


Rastertunnelmikroskop

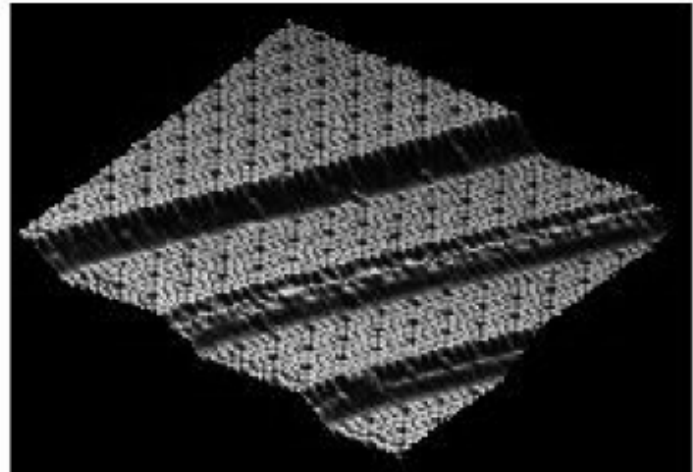
Wechselwirkung: (Tunnel-) Strom (bis pA)

- atomare Oberflächentopographie von elektrischen Leitern
- elektron. Eigenschaften der Oberfläche ("Leitfähigkeit")

Sonde:



HS Basel



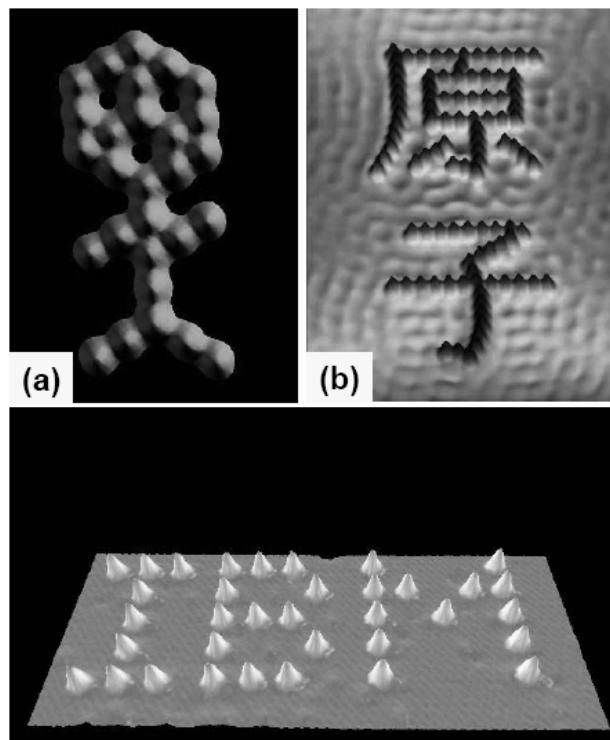
April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

28



Rastertunnelmikroskop



Manipulation einzelner Atomen mit Tunnelspitze

April 26, 2005

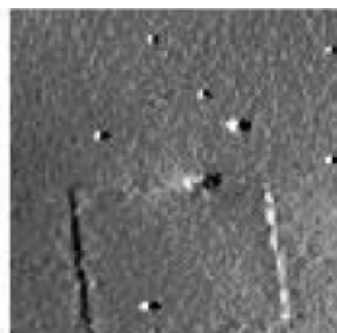
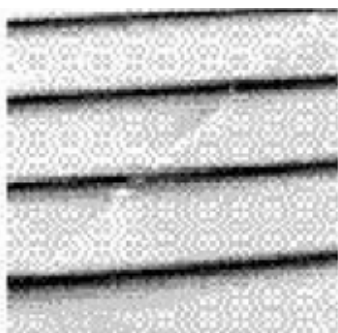
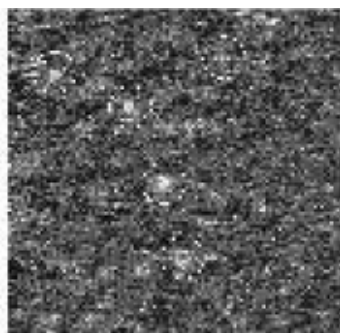
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

29

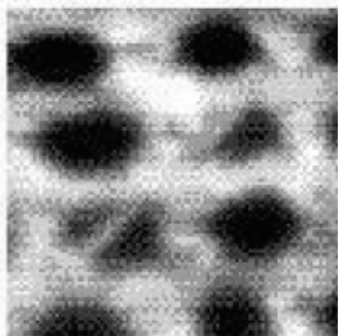
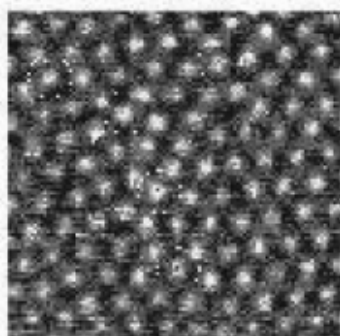


Rastertunnelmikroskop

Topo



WW



STM: Flusslinien in
Supraleiter NbSe₂

SFM: Bits auf einer
magneto-opt. Platte

SNOM: Domänen in
Flüssigkristallfilm

April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

30



Zusammenfassung

Beugung und Interferenz am Spalt, Draht (Fresnel, Möllenstedt) und an Kristallen (Davisson und Germer, 1927) → Bilder.

De Broglie förderte das "Photonbeziehung" $p = \frac{h}{\lambda}$ auch für Teilchen gilt

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

$$\text{Numerisch: } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_{kin}}} = \frac{12.3}{\sqrt{u}}$$

$$(U = \text{Beschleunigungsspannung} \rightarrow E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 = eU)$$

E_{kin}	[eV]	10	10^2	10^3	10^6	$10^9 (= 1 \text{ GeV} = mp)$
λ	[Å]	3,9	1,2	0,4	9×10^{-3}	10^{-5}

$$E_{kin} = \frac{3}{2}kT \text{ (Edelgas, 3 Freiheitsgrade)}$$

$$\lambda_{He} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \left\{ E = \frac{1}{2}mv^2 \right\} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{3mkT}} \text{ wurde bestätigt}$$

Neutronenbeugung: Interferenz wie bei Röntgenstrahlung (6.13)

Schlussfolgerung: $\lambda = \frac{h}{p}$ gilt für Strahlung UND Materie,
d.h. jede Energieform hat sowohl Teilchen als auch Wellencharakter.
Welcher Charakter überwiegt, hängt vom Frequenzspektrum ab!

Wenn Energien, Orte oder Impulse im Bereich $E=h\nu$ und $\lambda=p/h$ kommen, werden Quanteneffekte wichtig!

April 26, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

31



Welle-Teilchen Dualismus

De Broglies Erklärung für die Quantisierung der Atomniveaus und die Interferenzpatrone der Teilchen (Davisson, Germer, Doppelspalt) beweisen eindeutig den Wellencharakter. Jedoch ist das Elektron auch ein Teilchen mit wohl definierter Masse und Ladung, das eindeutige Spuren e.g. in einem Nebelkammer hinterlässt. Wie kann man diese Eigenschaften vereinen?

Max Born schlug in 1926 vor, dass, wie bei einer elektromagn. Welle, die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen vorzufinden, gegeben wird durch die Energiedichte, d.h. das Quadrat der Amplitude der Welle oder $|\Psi|^2 dV$ ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumen dV zu finden (und das Integral über dV ist natürlich 1, da das Teilchen irgendwo sein muss).

Wie ist Bahn des Teilchens mit Fortpflanzung der Welle verknüpft?
Teilchen: $E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 = E = hf$, $mv = p = h/\lambda$.

Die Geschwindigkeit der Welle wäre $v = \lambda f = (h/mv)$. $(\frac{1}{2}mv^2/h) = \frac{1}{2}v$, d.h. die Welle pflanzt sich nur mit halber Teilchengeschwindigkeit fort! WAS IST FALSCH?



De Broglie Wellen

Wiederholung: Ebene, monochromatische Welle in x-Richtung:

$$\psi(x, t) = Ae^{i\varphi}, \quad \varphi = kx - \omega t = \text{Phase}$$

Die vorkommenden Größen

$$\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ p &= h/\lambda = \hbar k \end{aligned}$$

Kreisfrequenz: $\omega = 2\pi\nu$

Wellenzahl $k = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

sind grundsätzlich unabhängig voneinander definiert.

Ebene Flächen mit konstanter Phase propagieren mit:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} \quad \text{„Phasengeschwindigkeit“}$$

Zusätzlich wird später benötigt werden:

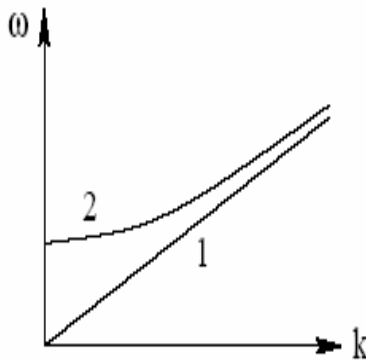
$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad \text{„Gruppengeschwindigkeit“}$$

Der Zusammenhang

$$\omega = \omega(k) \quad \text{heißt Dispersionsrelation.}$$



De Broglie Wellen



- Wenn $v_{ph} = \text{const.}$, unabhängig von ω , ist die Welle *dispersionsfrei*; die Dispersionsrelation ist linear (Beispiel 1).
- Wenn $v_{ph} = v_{ph}(\omega)$, zeigt die Welle *Dispersion*; die Dispersionsrelation ist nichtlinear (Beispiel 2). Dies ist der Normalfall in der Natur.

Dispersionsfreie Wellen sind z.B. EM-Wellen in Vakuum. Wellen mit Dispersion sind z.B. Wasserwellen, EM-Wellen in Materie, schwingende Pianosaiten und de Broglie-Wellen (mehr dazu s. 2.52).

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \text{ oder } (\hbar \omega)^2 = (\hbar k)^2 c^2 + m^2 c^4$$

Für $m=0$ dispersionsfrei, sonst $\hbar \omega = mc^2$ für $k=0$



Lokalisierung eines Teilchens

Wenn ein Elektron ein wohldefinierter Impuls hat, dann hat es auch eine wohldefinierte Wellenlänge. Die einzige Wellengleichung für eine wohldefinierte Wellenlänge ist $\psi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$

mit $k = 2\pi / \lambda$, and $\omega = 2\pi f$.

Das Problem: die Amplitude geht nicht gegen Null im Unendlichen, d.h. das Teilchen ist nicht lokalisiert!

Lösung des Problems: Wellen können interferieren wenn die Impulse - und damit die Wellenlängen - NICHT scharf definiert sind.

Dann Teilchen lokalisiert in Wellenpaket. Wenn Teilchen sehr scharf lokalisiert, muss Unsicherheit in Impuls groß sein. Dies ist Prinzip der Heisenbergsche Unsicherheitsrelation.

Superposition von ZWEI Wellen ergibt Schwebungen:

$$\begin{aligned} & \sin((k - \Delta k)x - (\omega - \Delta \omega)t) + \sin((k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t) = \\ & 2 \sin(kx - \omega t) \cos((\Delta k)x - (\Delta \omega)t) \end{aligned}$$



Superposition von zwei Wellen

$A(x,t) = A \cos(kx - \omega t)$ (klassische Wellengleichung), $k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$, $\omega = 2\pi\nu$

$$A_1 + A_2 = A_0 [\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t)]$$

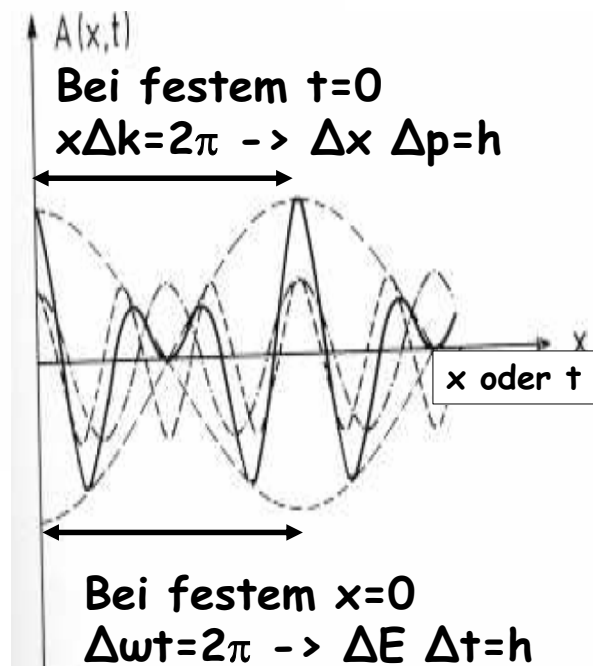
$$= 2A_0 \cos[\Delta k x - \Delta \omega t] \cos(kx - \omega t),$$

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

und $\omega = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2)$; $\Delta \omega = \frac{1}{2}(\omega_1 - \omega_2)$

(Benutze: $\cos u + \cos v = 2 \cos \frac{u+v}{2} \cos \frac{u-v}{2}$)

**Schwebungen konzentrieren
Energiedichte und daher
Aufenthaltswahrscheinlichkeit
eines Teilchens -> Lokalisierung**



Superposition unendlich viele Wellen

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} a \exp[i(kx - \omega t)] dk \quad (1)$$

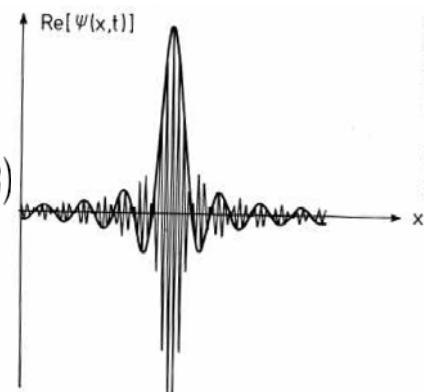
Reihenentwicklung von ω um k_0 mit $k = k_0 + k - k_0$ (2)

ergibt: $\omega = \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) \equiv \omega_0 + \omega' \xi$ (3)

(3) + (2) in (1) ergibt:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= a \exp[-i(\omega_0 t - k_0 x)] \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp[-i(\omega' t - x)\xi] d\xi \\ &= a \exp[i(\omega_0 t - k_0 x)] \cdot 2 \frac{\sin(\omega' t - x)\Delta k}{(\omega' t - x)} \end{aligned}$$

(Benutze: $\int_{-\Delta x}^{\Delta x} \exp(-i\alpha x) dx = -\frac{1}{i\alpha} [\exp(-i\alpha \Delta x) - \exp(i\alpha \Delta x)] = 2 \frac{\sin \alpha \Delta x}{\alpha}$)





Geschwindigkeit der Wellenpakete

Wellenpakete stark lokalisiert im Bereich $x = \omega' t$: Maximum bewegt sich mit der Geschwindigkeit

$$\omega' = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{\partial \frac{p^2}{2m}}{\partial p} = \frac{p}{m} = v_{\text{Teilchen}},$$

D.h. die Gruppengeschwindigkeit des Wellenpaketes

entspricht der Teilchengeschwindigkeit $v_T = \frac{p}{m}$;

die Welle selbst pflanzt sich mit Phasengeschwindigkeit $v_p = \frac{\omega}{k}$ fort.

$$\begin{aligned} \text{(Gilt auch relativistisch: } \omega' &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d\sqrt{p^2 + m^2}}{dp} = \\ &= \frac{1}{2}(p^2 + m^2)^{-\frac{1}{2}} 2p = \frac{p}{E} = \beta = \frac{v}{c}). \end{aligned}$$

..\Downloads\GroupVelocity.htm



Heisenbergsche Unschärferelation

$\Psi(x) \sim \frac{\sin(x\Delta k)}{x}$ für feste Zeit, z.B. $t = 0$:

Ortsunsicherheit $\geq$ Abstand zwischen Minima, d.h.:

$$\frac{\Delta x}{2} \geq \frac{\pi}{\Delta k} \text{ oder mit } p \equiv \hbar \cdot k = \frac{\hbar k}{2\pi}$$

$$\boxed{\Delta x \Delta p \geq \hbar}$$

Äquivalent: $\Psi(t) \sim \sin \omega' t \Delta k$ für einen festen Ort, z.B. $x = 0$,
d.h. $\omega' t \Delta k = t \Delta \omega$ ergibt mit $E = \hbar \omega$ wie oben:

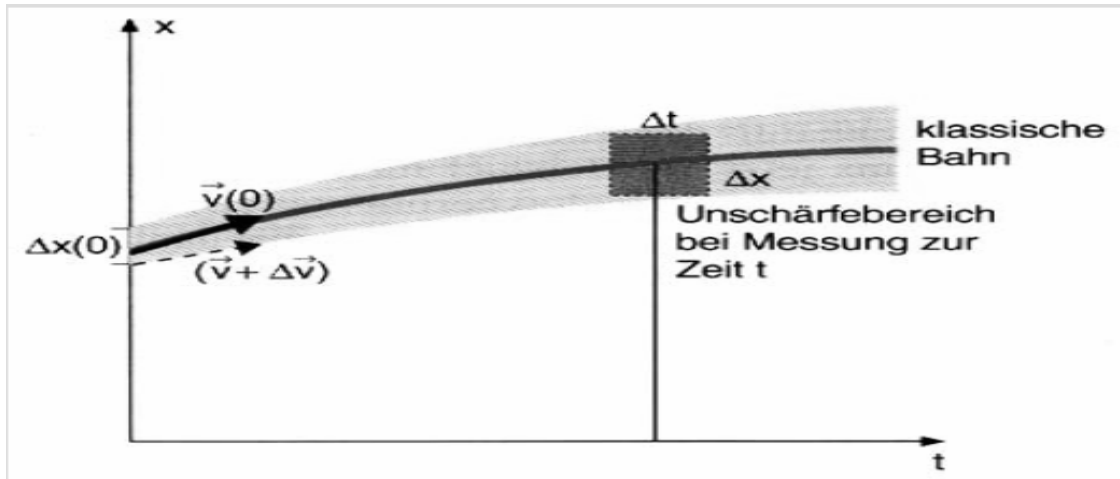
$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \hbar}$$

Die Physik dahinter: Um den Ort zu bestimmen, muss man das Objekt "sehen", d.h. mit Photonen bestrahlen. Dies führt jedoch zu einer merklichen Impulsänderung durch den "Photonendruck", wodurch sich das Objekt wegbewegt, wenn es sehr klein ist. Eine Ortsunschärfe ist bei gegebenem Impuls die Folge. Um die Energie zu bestimmen, braucht man eine gewisse Zeit, d.h., dass sich zum Beispiel bei einer sehr kurzen Lebensdauer τ die Energie und damit die Masse eines Teilchens nur mit einer Präzision der Ordnung von $\Delta E = \frac{\hbar}{\tau}$ bestimmen lässt.

<http://www.itkp.uni-bonn.de/~metsch/pdm/pdmquant.html>



Heisenbergsche Unschärferelation



Unbestimmtheitsgrenze der Teilchenbahn durch die Unschärfe Δx , Δp der Anfangsbedingungen und durch die Unschärfe bei der Messung des jeweiligen Teilchenortes und des Zeitpunktes der Messung.

Jede Messung von x und p ändern den Zustand des Mikroteilchens



Zum Mitnehmen

Teilchen mit Impuls p benehmen sich bei kleinen Abständen wie Wellen.

Wellen mit Wellenlänge λ benehmen sich bei kleinen Abständen wie Teilchen.

Zusammenhang zwischen Wellenlänge und Impuls:

$$\lambda = h/p \text{ (de Broglie)}$$

Man kann nicht beliebig genau ORT und IMPULS bestimmen:

$$\Delta x \Delta p \geq h. \text{ (Heisenberg)}$$

Gleiche gilt für ENERGIE und ZEIT.



Vorlesung 6:

Roter Faden:

Heisenbergsche Unsicherheitsrelation
Messungen in der Quantenmechanik

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>



Lokalisierung eines Teilchens

Wenn ein Elektron ein wohldefinierter Impuls hat, dann hat es auch eine wohldefinierte Wellenlänge. Die einzige Wellengleichung für eine wohldefinierte Wellenlänge ist $\psi(x,t) = A \sin(kx - \omega t)$

mit $k = 2\pi / \lambda$, and $\omega = 2\pi f$.

Das Problem: die Amplitude geht nicht gegen Null im Unendlichen, d.h. das Teilchen ist nicht lokalisiert!

Lösung des Problems: Wellen können interferieren wenn die Impulse -und damit die Wellenlängen -NICHT scharf definiert sind.

Dann Teilchen lokalisiert in Wellenpaket. Wenn Teilchen sehr scharf lokalisiert, muss Unsicherheit in Impuls groß sein. Dies ist Prinzip der Heisenbergsche Unsicherheitsrelation.

Superposition von ZWEI Wellen ergibt Schwebungen:

$$\sin((k - \Delta k)x - (\omega - \Delta \omega)t) + \sin((k + \Delta k)x - (\omega + \Delta \omega)t) = \\ 2 \sin(kx - \omega t) \cos((\Delta k)x - (\Delta \omega)t)$$



Superposition von zwei Wellen

$A(x,t) = A \cos(kx - \omega t)$ (klassische Wellengleichung), $k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$, $\omega = 2\pi\nu$

$$A_1 + A_2 = A_0 [\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t)]$$

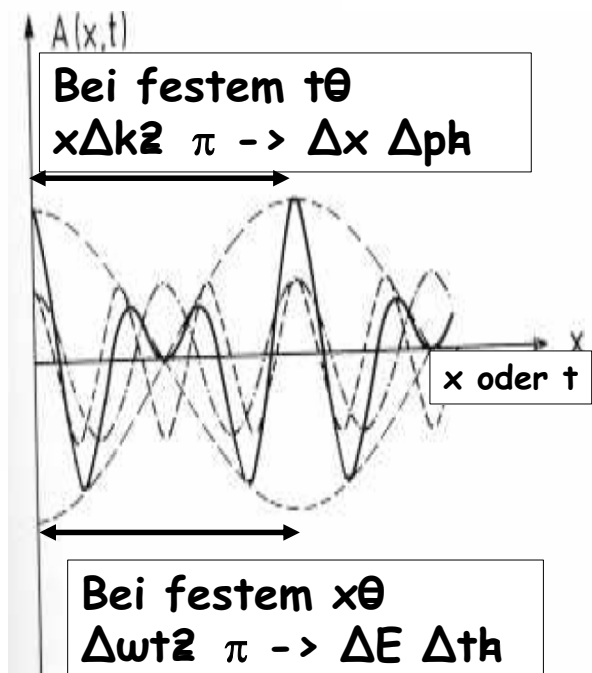
$$= 2A_0 \cos[\Delta k x - \Delta \omega t] \cos(kx - \omega t),$$

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

und $\omega = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2)$; $\Delta \omega = \frac{1}{2}(\omega_1 - \omega_2)$

(Benutze: $\cos u + \cos v = 2 \cos \frac{u+v}{2} \cos \frac{u-v}{2}$)

**Schwebungen konzentrieren
Energiedichte und daher
Aufenthaltswahrscheinlichkeit
eines Teilchens -> Lokalisierung**



Superposition unendlich viele Wellen

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} a \exp[i(kx - \omega t)] dk \quad (1)$$

Fouriertrafo
von Orts- zu
Impulsraum
für $t=0$

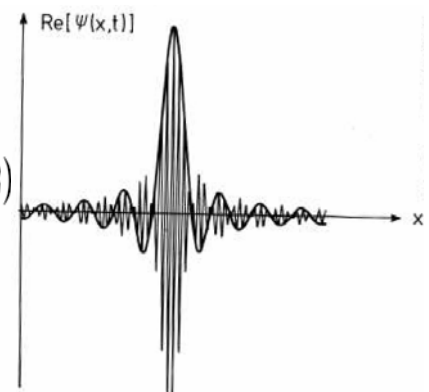
Reihenentwicklung von ω um k_0 mit $k = k_0 + k - k_0$ (2)

ergibt: $\omega = \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) \equiv \omega_0 + \omega' \xi$ (3)

(3) + (2) in (1) ergibt:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= a \exp[-i(\omega_0 t - k_0 x)] \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp[-i(\omega' t - x)\xi] d\xi \\ &= a \exp[i(\omega_0 t - k_0 x)] \cdot 2 \frac{\sin(\omega' t - x)\Delta k}{(\omega' t - x)} \end{aligned}$$

(Benutze: $\int_{-\Delta x}^{\Delta x} \exp(-i\alpha x) dx = -\frac{1}{i\alpha} [\exp(-i\alpha \Delta x) - \exp(i\alpha \Delta x)] = 2 \frac{\sin \alpha \Delta x}{\alpha}$)





Unschärfe der Unschärferelation

Viele Bücher ergeben: $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ statt h .
Wo liegt der Unterschied?

Bei einem gaussförmigen Wellenpaket wird die Unschärfe MINIMAL (mathematisch zu beweisen) aber wie groß ist die Unschärfe?

Ein Standardabweichung oder Ort wo Wahrscheinlichkeit auf $1/\sqrt{e}$ gefallen ist oder ...? Unschärfe ist unscharf definiert!

Δx = Abstand zwischen Beugungsminima $\rightarrow$
 $\Delta x \Delta p \geq h$

$$u(x, 0) = u_0 \exp \left\{ -\frac{x^2}{b^2} \right\}$$

$x = b/2 \rightarrow u^2 = 1/\sqrt{e}$
 $\Delta x = b \rightarrow \Delta x \Delta p \geq \hbar$



Superposition Gaussche Wellenpakete

$A(k) \exp \{i(kx - \omega t)\}$ mit beliebigen Amplituden $A(k)$ addieren, und man erhält eine allgemeine Lösung der Wellengleichung

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

Die Lösung der Anfangswertaufgabe der Wellengleichung bei gegebenem $u(x, 0)$ findet man daraus mit Hilfe der Fourier-Transformation $\delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{ik(x - y)\} dk$

$$u(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp \{ikx\} dk \quad \text{mit} \quad A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} u(x, 0) \exp \{-ikx\} dx.$$

- Gilt speziell $\omega = vk$ mit v unabhängig von k , so erhält man durch Einsetzen $u(x, t) = u(x - vt, 0)$.
- Liegt als Anfangsbedingung eine Gauss-Kurve vor

$$u(x, 0) = u_0 \exp \left\{ -\frac{x^2}{2b^2} \right\}, \quad \text{so ist} \quad A(k) = \frac{u_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2b^2} - ikx \right\} dx = u_0 \frac{b}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{b^2}{2} k^2 \right\}$$

ebenfalls eine Gauss-Kurve, denn es ist $\int_{-\infty}^{\infty} \exp \{-px^2 + qx\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} \exp \left\{ \frac{q^2}{4p} \right\}.$



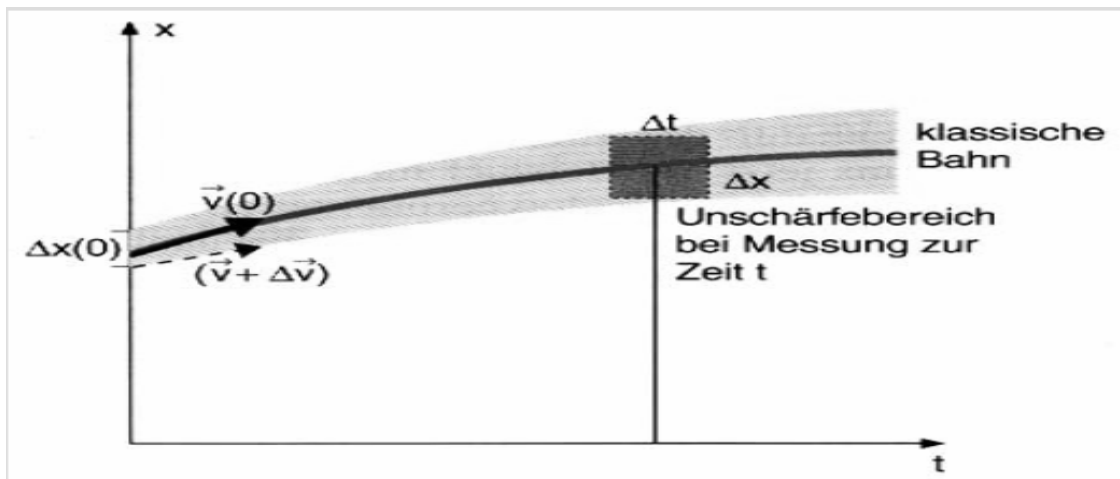
Superposition Gaussche Wellenpakete

Die Fouriertransformierte eines gaussförmigen Wellenpaket mit Standardabweichung σ ergibt Im Impulsraum wieder einen Gaussform, jedoch mit Standardabweichung $1/\sigma$!

<http://www.itkp.uni-bonn.de/~metsch/pdm/pdmquant.html>



Heisenbergsche Unschärferelation



Unbestimmtheitsgrenze der Teilchenbahn durch die Unschärfe Δx , Δp der Anfangsbedingungen und durch die Unschärfe bei der Messung des jeweiligen Teilchenortes und des Zeitpunktes der Messung.

Jede Messung von x und p ändern den Zustand des Mikroteilchens



Beispiel für Anwendung der Unschärferelation

Z^0 - Bosonen (neutrale Austauscheteilchen der schwachen Wechselwirkung) werden in der e^+e^- - Annihilation erzeugt.

Der Wirkungsquerschnitt ist eine Funktion

der Schwerpunktsenergie $\Gamma_s : \sigma \propto \frac{1}{(s-M_Z^2)^2 + \Gamma^2 M_Z^2}$ (Breit-Wigner-Formel).

Die Breite der Resonanzkurve Γ entspricht der Unschärfe der Energie, d.h.

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$$

Daher kann man aus der Breite die Lebensdauer $\tau \approx 10^{-23}$ s bestimmen.

τ wird durch die Zerfallsmöglichkeiten des Z^0 - Bosons bestimmt.

Das Z^0 - Boson zerfällt u.a. in unsichtbare (= nicht messbaren) Neutrinos

→ $\tau = f(N_\nu)$. Aus der Messung von Γ folgt : $N_\nu \cong 2,99 \pm 0,01$.

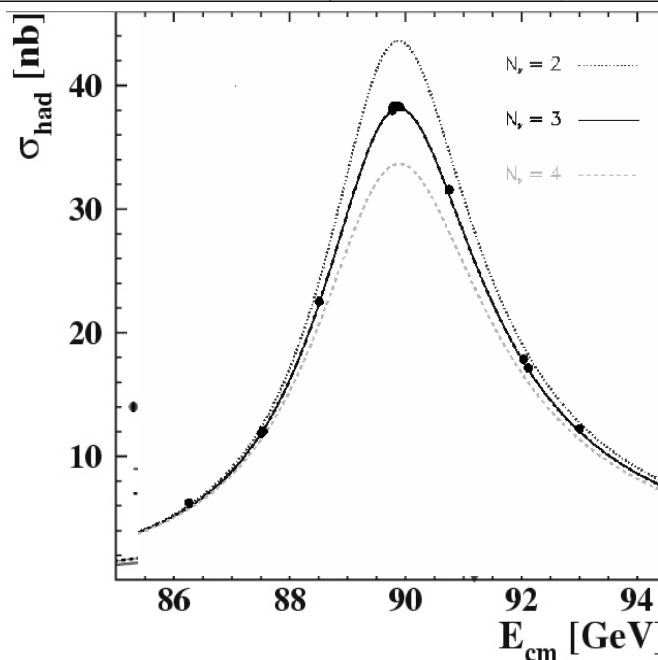
→ Es gibt nur drei Familien von Elementarteilchen

(falls alle Neutrinos $m_\nu < \frac{M_Z}{2}$ haben).

$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \cancel{x} \\ \cancel{x} \end{pmatrix}$
Quarks			Leptonen			<i>existiert nicht!</i>



Wirkungsquerschnitt $e^+e^- \rightarrow$ Quarks versus Schwerpunktsenergie Z^0 -Resonanz



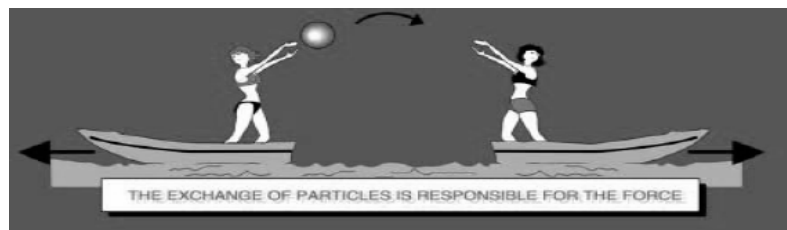
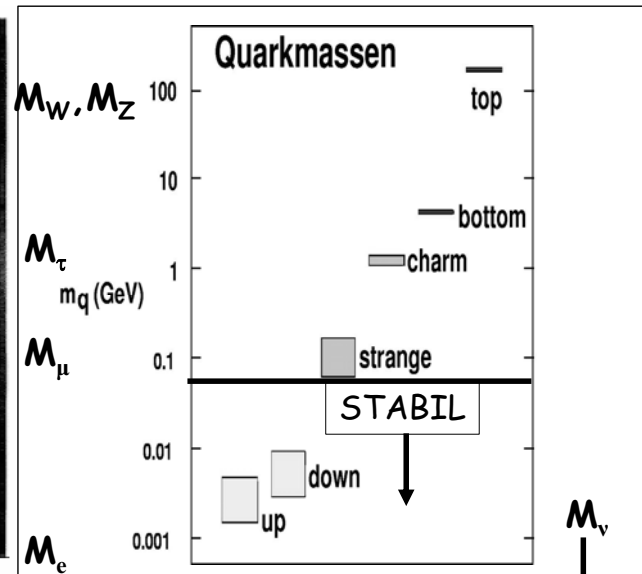
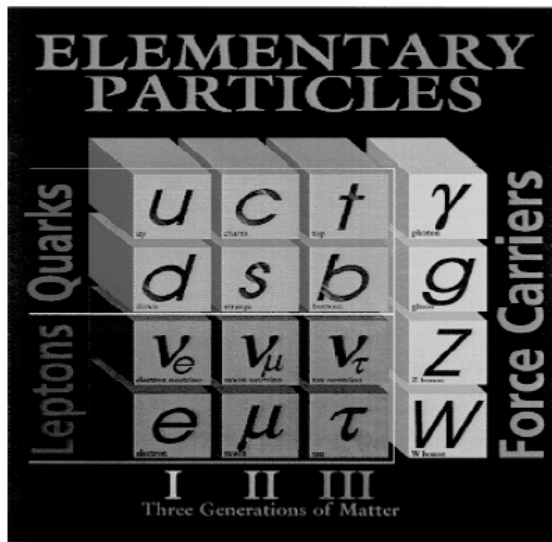
Es gibt nur
DREI leichte
Neutrinos!

Und daher
nur DREI
Generationen
von Quarks
und Leptonen!
(falls alle
Neutrinos fast
masselos sind)

Peak hängt von der totalen Breite Γ_Z ab.
 $\Gamma_Z = \hbar / \text{Lebensdauer} \propto (\text{Anzahl der Neutrinos})$
 (aus $\Delta t \propto \text{Lebensdauer}$, $\Gamma_Z = \Delta E$ und $\Delta E \propto \hbar / \Delta t$)



Das Standard Modell der Teilchenphysik



April 28, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

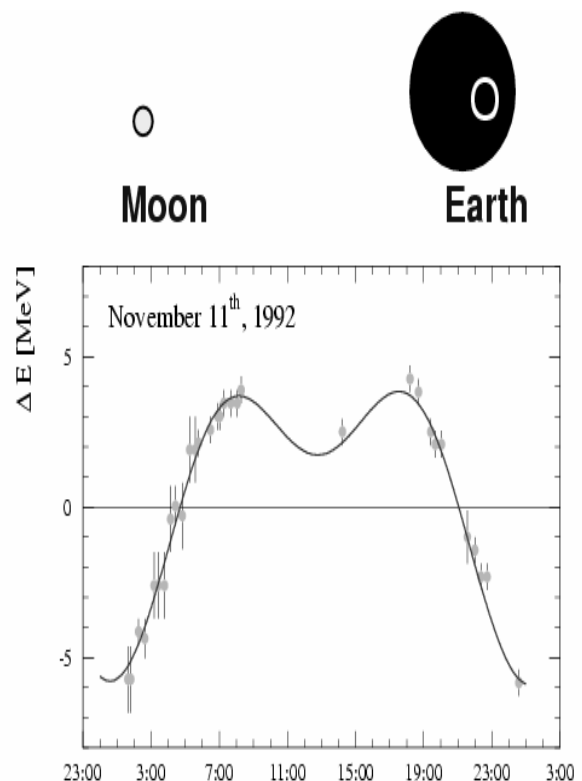
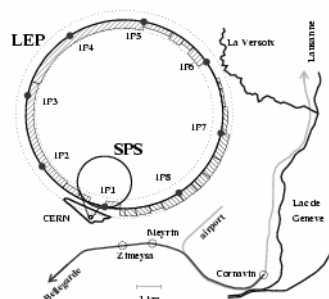
11



Kleine experimentelle Probleme am LEP Beschleuniger: Einfluss des Mondes und Störungen durch TGV



Vacuum Chamber Current Correlation



April 28, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Welle – Teilchen Dualismus

Jede Welle (Licht, Schall, etc ...) zeigt Teilcheneigenschaften
(Photonen, Phononen etc ...)

Jedes Teilchen (Elektron, Atom etc ...) zeigt Welleneigenschaften
(deBroglie Wellen, Beugung, Interferenz)

Welle: Wellenlänge, Frequenz, Dispersion
Superposition, Interferenz

Teilchen: Impuls, Energie, Stoss, 'Klick'

- Wellenpaket
- Heisenberg'sche Unschärferelation
- Interferenz
- Tunneleffekt, Quantenreflexion
- Grundzustandsenergie in Potenzial
- Licht: Lichtdruck, Photoeffekt, Comptoneffekt

Materiewellen (nicht relativistisch) werden mit der
Schrödingergleichung beschrieben



Die Schrödingergleichung Wellengl. um Aufenthaltswahrscheinlichkeit
(AW) Teilchen zu bestimmen. Bedeutung in der QM wie Fma der KM

Die Energie eines Teilchens wird durch die Hamilton-Funktion beschrieben:

$$H = T + V(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = E$$

Die Wellengleichung kann nach der QM gefunden werden durch
die Substitutionen:

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{wobei} \quad -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \text{und} \quad \hat{p}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\ \vec{p} &\rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \end{aligned}$$

Damit lässt sich der Hamiltonoperator schreiben als $\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$

und diese angewandt auf die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$

ergibt uns die Schrödingergleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \mathcal{H} \psi(\vec{r}, t)$

Dies ist die Wellengleichung für nicht-relativistische Teilchen der Masse m.



Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Allgemeinere Lösung: $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$

Einsetzen: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E\right) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = E \psi(\vec{r}, t)$

Zeitunabh. Schrödingergleichung: $\mathcal{H}\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$

**Wichtig für stationäre Probleme wie Atome!
(werden nur die zeitunabh. SG benutzen!)**



Linearität, Superposition, Interferenz 2-Zustands-System

Quantenmechanik (Schrödingergleichung) ist **linear**.

Beliebige Überlagerungen = **Superpositionen** von Lösungen sind gleichwertige Lösungen.

Daher: Ein Quantensystem kann nicht nur in 'Eigenzuständen' sondern auch in allen möglichen Superpositionen sein.

Direkte Folge der Superposition: **Interferenz**

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle$$

with

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Das einfachste Beispiel um Superpositionen zu studieren ist
2-Zustands-System

Polarisation: Horizontal, Vertikal :

45° polarization:

equal superposition of V and H

σ^+ polarisation:

equal superposition of V and H
with $\pi/2$ phase shift

$$|+45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle)$$

$$|-45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle)$$

$$|\sigma^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + i|V\rangle)$$

$$|\sigma^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - i|V\rangle)$$

Spin: up, down

$$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$$

Atom: 2 Zustände

Doppelspalt: Superposition der Zustände

+ Teilchen geht durch Spalt 1

+ Teilchen geht durch Spalt 2

Überlagerung ergibt Interferenz

(links)
(rechts)

$$|L\rangle, |R\rangle$$



Messung in Quantenphysik

- Quantenphysik macht **keine** Aussagen über **Einzelereignisse**
- **Wellenfunktion** $\Psi(x,t)$ beschreibt das System
- $|\Psi|^2$ gibt die **Wahrscheinlichkeit** für ein Ereignis
 - Nur statistische Aussagen
 - Nur Aussagen über Erwartungswerte

Beispiel: Superposition

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \quad \text{with} \quad \sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Eine Frage die wir an das Quantensystem Stellen können:
Ist das System im Zustand $|j\rangle$

Die Antwort die wir bekommen: Ja oder Nein (0 oder 1)
mit Wahrscheinlichkeit $|\alpha_j|^2$

$$\langle \Psi | M_j^+ M_j | \Psi \rangle = \alpha_j^+ \alpha_j = |\alpha_j|^2$$

Frage:

Wie entscheidet die Natur wo und wann ein Ereignis auftritt

?

April 28, 2005

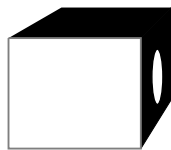
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



Quantenmechanik als statistische Theorie

preparation, state



measurement, observable



1000100101100110101001100101110101000100100100110

$$p(1) \approx \frac{22}{49}$$

$$p(0) \approx \frac{27}{49}$$

**QM sagt nur etwas über Wahrscheinlichkeiten aus.
Keine verbindliche Vorhersagen wie in der KM!**

April 28, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

18



Messung in Quantenphysik Präparation und mehrmalige Messung

Ein Quantenexperiment besteht aus:

- **Präparation**
- **Experiment**
- **Messung**

Diese 3 sind **untrennbar** miteinander verbunden

Messung $\Rightarrow$ Präparation

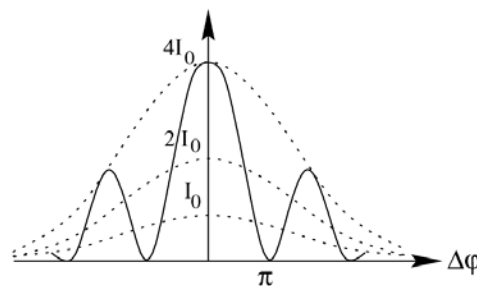
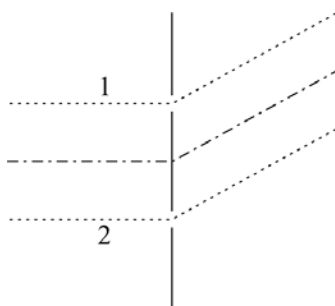
Mehrmalige hintereinander folgende Messung der gleichen Größe ergibt das gleiche Resultat.

Erste Messung $|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \xrightarrow{\text{1. Messung}} |\varphi_i\rangle$ mit $P = |\alpha_i|^2$

Jede weitere Messung $|\varphi_i\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} |\varphi_i\rangle$ mit $P = 1$



Messung und Interferenz Doppelspalt Experiment

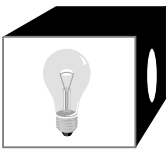


Beugungsbild des Doppelspalts

- Im Doppelspalt Experiment gilt das **Wellenbild** (Interferenz).
- Der Nachweis des Teilchens erfolgt im **Teilchenbild**.
- Experiment mit einzelnen Teilchen (immer nur ein Teilchen zwischen Quelle und Detektor)

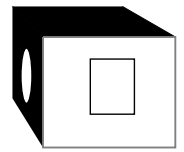
Frage:

- Was passiert mit der Interferenz wenn wir die **Frage nach dem Weg** des Teilchen stellen:
Durch welchen Spalt ist das Teilchen gegangen?

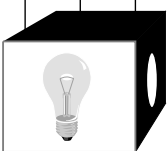
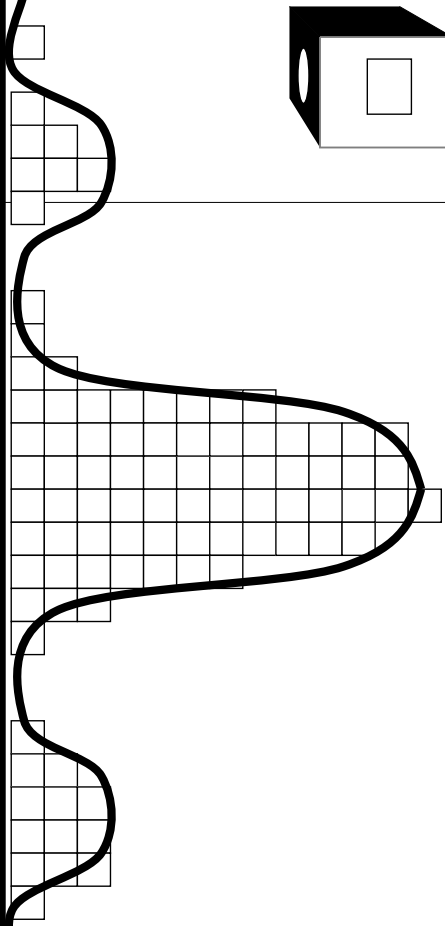


Doppelspalt

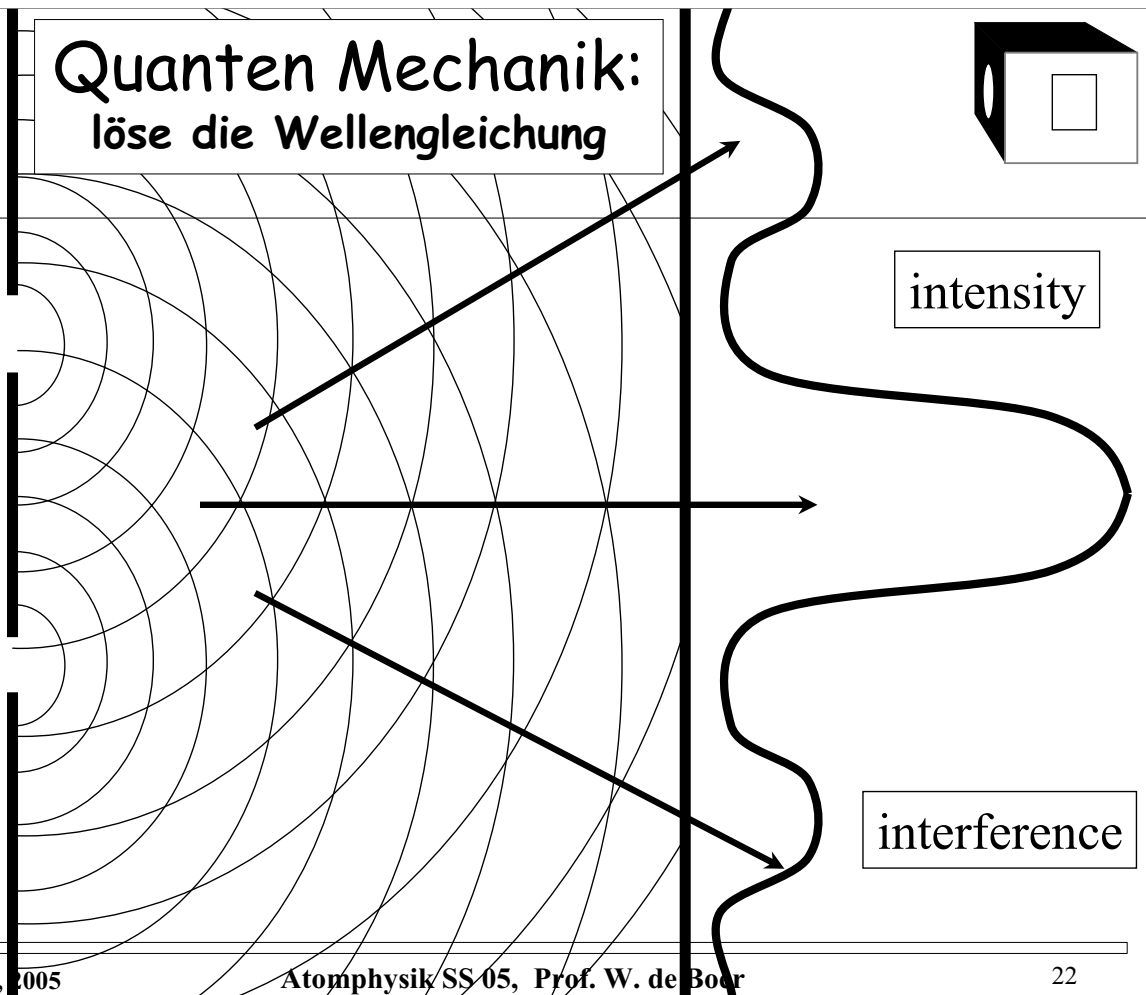
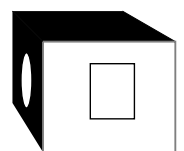
Experiment mit **einzelnen Teilchen**



Verteilung der einzelnen
Teilchen folgt Interferenz
Bild!
Interferenzerscheinungen
durch Unkenntnis des Weges

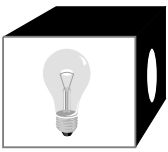


Quanten Mechanik: löse die Wellengleichung

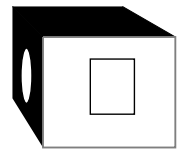


intensity

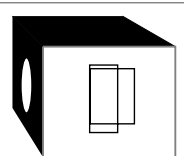
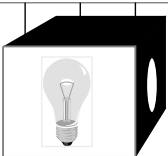
interference



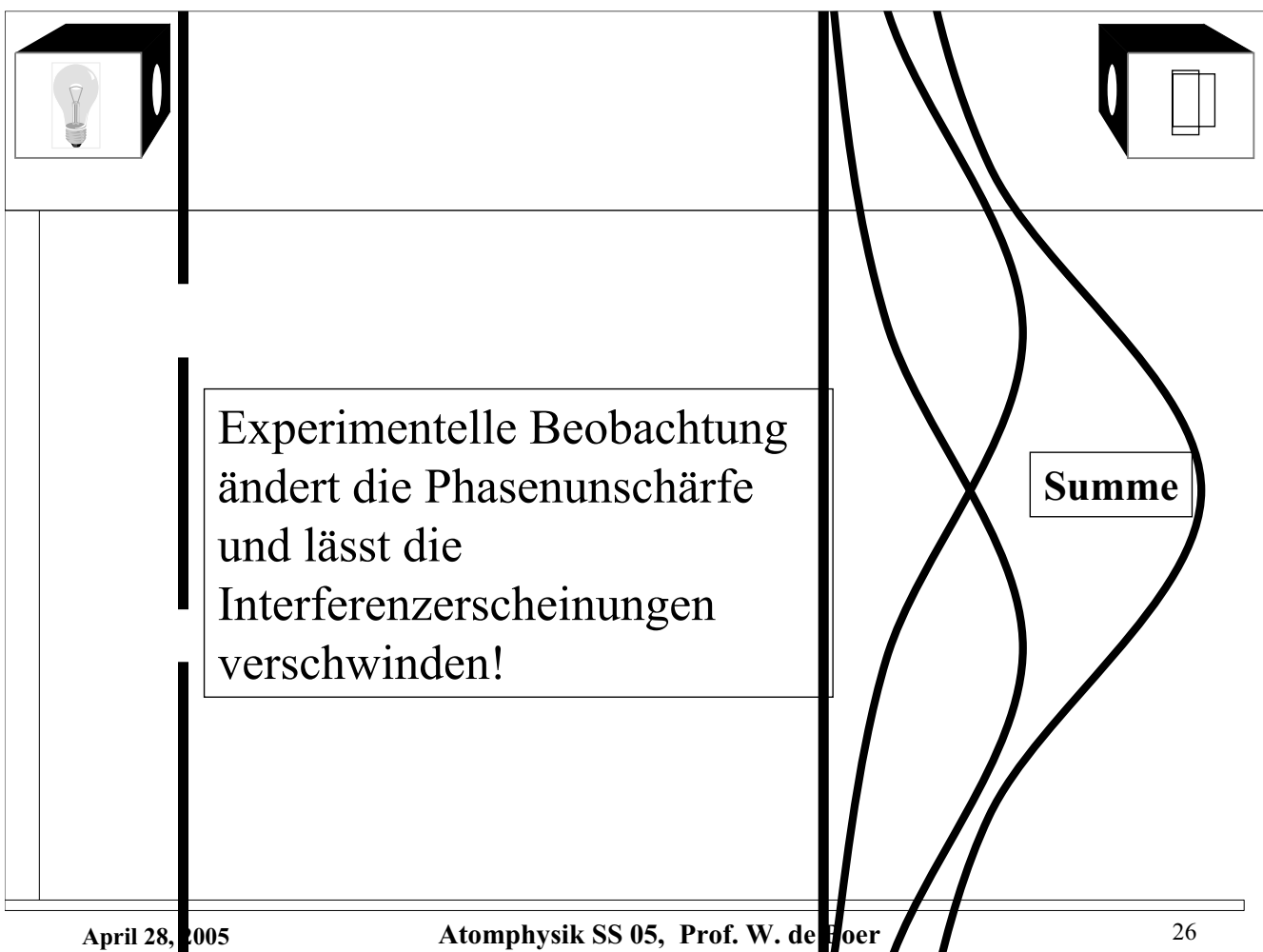
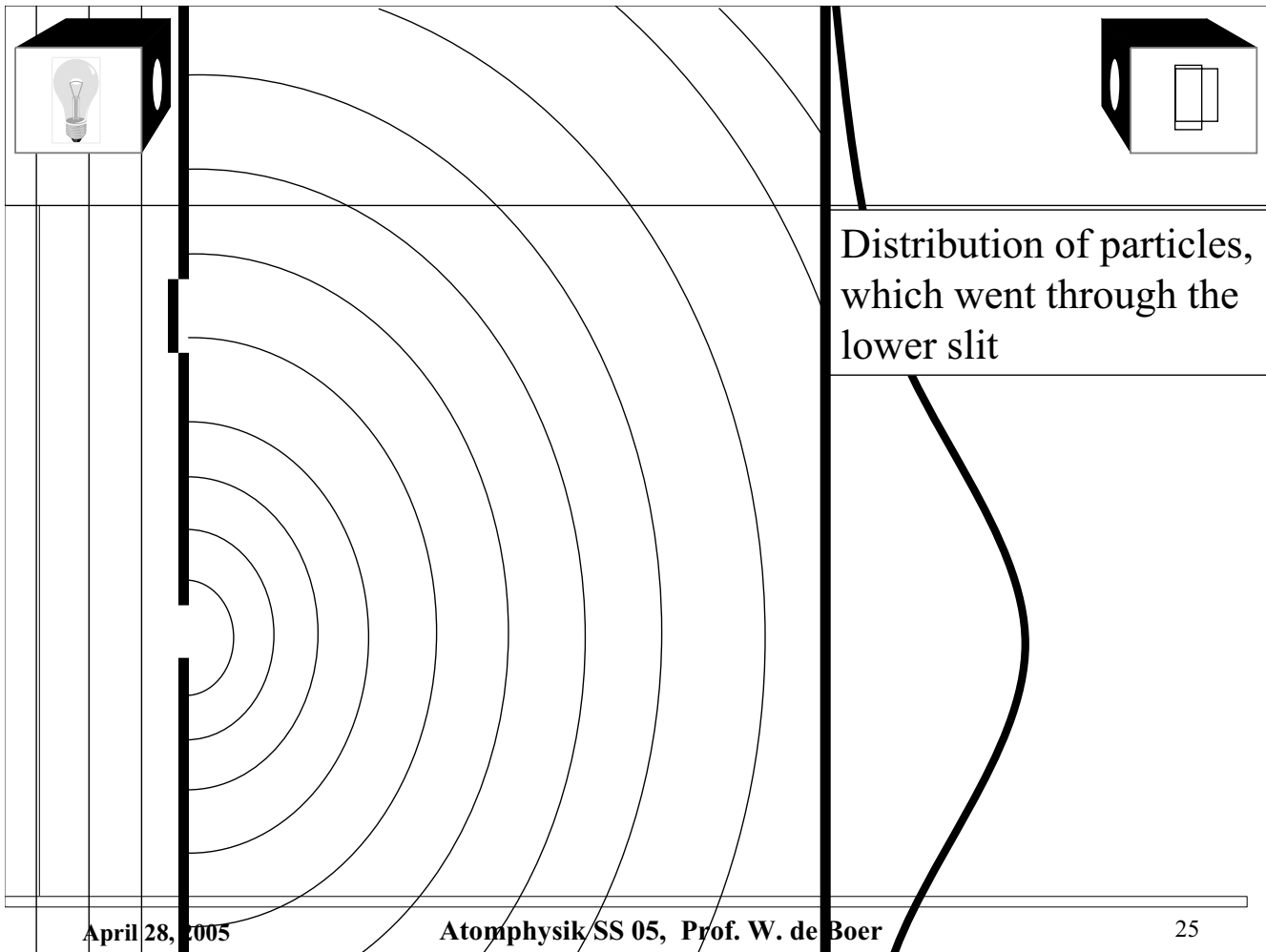
Frage nach dem Weg



Durch welchen Spalt
ist Teilchen gegangen?



Distribution of particles,
which went through the
upper slit





Was ist eine Messung?

Messung 'projiziert' ein Quantensystem aus einer Superposition $|\Psi\rangle = \sum \alpha_i |\varphi_i\rangle$ in einen 'Eigenzustand' des Messapparates $|M_i\rangle |\varphi_i\rangle$.

Kollaps der Wellenfunktion

Mess-Problem:

Eine solche Messung kann in einer linearen Quantenmechanik nicht beschrieben werden. Die Messoperation führt zu einer Verschränkung von zu messendem System und Messapparat: $|\Psi\rangle |M\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle |M_i\rangle$

Seit den 20er Jahren heftig diskutiert. Keine Lösung die nicht zumindest Input von außerhalb der Quantenmechanik benötigt.

Verschiedensten Lösungsansätze, Interpretationen:

Standard Interpretation (z.B. V. Neumann, Dirac):

Separation von Quanten und Makroskopischer Welt, Messung und Quantenphysik. Regel der Quantenphysik geben uns die Wahrscheinlichkeiten der Messresultate. 'Realität' wird erst durch die Beobachtung erzeugt.

Extremfall: Schrödingers Katze:

ohne Messung in superposition von
|lebendig> und |bewusstlos>

April 28, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

27



Schrödingers Katze

Schrödingers Katze ist ein beliebtes Beispiel um ein Phänomen anschaulich darzustellen, das in der Quantenmechanik als „Überlagerung von Zuständen“ bekannt ist. Und zwar wird bei diesem Gedankenexperiment¹ eine Katze in eine undurchsichtige Kiste gesteckt, zusammen mit einer Apparatur, die, gesteuert durch radioaktiven Zerfall, die Katze innerhalb von einer Stunde mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% bewusstlos macht. Die Frage ist nun, in welchem Zustand sich die Katze nach einer gewissen Zeit befindet, wenn man *nicht* in die Kiste hineinschaut - analog zur Frage nach dem quantenmechanischen Zustand eines Systems, solange man keine Messung an ihm vornimmt. Erst wenn man die Kiste öffnet, manifestiert sich der Zustand in einer 100% bewussten oder 100% bewusstlosen Katze.

Vor Messung oder nach
langer Wartezeit:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{c} \text{lebendig} \\ \text{Katze} \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{c} \text{bewusstlos} \\ \text{Katze} \end{array} \right\rangle$$

Superposition von Zuständen

Direkt nach Messung:

$$\Psi = \left| \begin{array}{c} \text{bewusstlos} \\ \text{Katze} \end{array} \right\rangle$$

Kollaps der Wellenfunktion

April 28, 2005

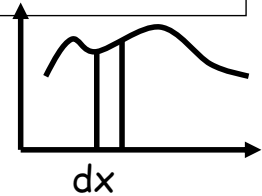
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

28



Frage: ist $\mathcal{Q}$ Mechanik eine komplette Theorie,
d.h. kann man alle Komponenten der Wellenfkt. bestimmen?

$\int |\Psi|^2 dx$ ist Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Intervall dx $|\Psi|^2$ zu finden. Wenn es dort gefunden wird, WOWAR DAS TEILCHEN VOHER?



3 Antworten:

1. Realos (*z.B. Einstein*) : Teilchen war irgendwo, z.B in B; dann braucht die $\mathcal{Q}$ zusätzliche Angaben ("hidden"variables) , die bestimmen, wie es von B nach A kommt.
2. Fundis (*Bohr etc.*) : Das Teilchen war überall und nirgends!
Die Messung zwingt das Teilchen dazu, sich zu zeigen.
(Wie Mister X im Spiel Scotland Yard)
3. Agnostiker (*Pauli*) : Bitte keine Spekulationen, nur Wahrnehmungen zählen!!

bis 1962) bevorzugt und 3) galt nur , wenn 1) und 2) nicht akzeptiert wurden.
ab 1964 John Bell entdeckt, dass man experimentell zwischen 1) und 2) unterscheiden kann, d.h. es macht eine Unterscheid, ob das Teilchen zuvor eine wohldefinierte Position hatte.

Experimente zeigen, dass nur 2) richtig ist. $\mathcal{Q}$ ist eine komplette Theorie, die keine "hidden"parameter braucht.



Zum Mitnehmen

Die Wahrscheinlichkeit einer Messung in der $\mathcal{Q}$ wird gegeben durch das $\mathcal{Q}$ adrat der absoluten Wert einer komplexen Zahl Ψ , die man Wahrscheinlichkeitsamplitude nennt, z.B. für die Wahrscheinlichkeit P ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten $\mathcal{Q}$ anzutreffen gilt:

$$P \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

Ψ ist eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H \Psi(\mathbf{r}, t) = E \Psi(\mathbf{r}, t)$$

wobei H die Energieoperator und E die Energie ist



Vorlesung 7:

Roter Faden:

Lösungen der Schrödingergleichung
Operatoren and Messungen

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: <http://www.chemie.uni-bremen.de/stohrer/skripte/QM-Skript.pdf>



Zum Mitnehmen

Die Wahrscheinlichkeit einer Messung in der QM wird gegeben durch das Quadrat der absoluten Wert einer komplexen Zahl Ψ , die man Wahrscheinlichkeitsamplitude nennt, z.B. für die Wahrscheinlichkeit P ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort anzutreffen gilt:

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

Ψ ist eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H \Psi(x, t) = E \Psi(x, t)$$

wobei H der Energieoperator und E die Energie ist

Herleitung der Schrödingergleichung

Nehme zuerst de Broglie - Welle für eine ebene Welle $\wedge$ freies Teilchen

$$\Psi = \exp i(kx - \omega t) \quad (1)$$

$$p = \hbar k \quad (2)$$

$$E = \hbar \omega \quad (3)$$

k, ω sind unabhängige Parameter, d.h. p und E unabhängig.

Für ein freies Teilchen muß jedoch gelten: $E = \frac{p^2}{2m}$ oder $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4)$

Schrödinger: Wie kann man (4) mit (1) verknüpfen?

p und E mit Ableitungen von Ψ nach x und nach t verknüpft:

$$\hbar \omega \Psi = i \hbar \frac{d\Psi}{dt} \quad (5)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \Psi = - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \quad (6)$$

(4) wird erfüllt, wenn gilt (siehe (5) + (6))

SG (7) :

$$- \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} = i \hbar \frac{d\Psi}{dt}$$

Die Schrödingergleichung (Wellengl. kann Aufenthaltswahrscheinlichkeit (AW) eines Teilchen als Fkt. von Ort und Zeit zu bestimmen. Bedeutung in QM daher wie $F=ma$ der KM, womit Bahn als Fkt. von Ort und Zeit bestimmt wird!

Die relativistische Wellengleichung (Klein-Gordon-Gl.)

Relativistisch kann man eine ähnliche Gleichung herleiten:

statt $E = \frac{p^2}{2m}$ benutzt man $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$

oder $(\hbar \omega)^2 = (\hbar k)^2 c^2 + m^2 c^4$

oder $i \hbar \frac{d^2 \Psi}{dt^2} = \hbar^2 c^2 \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + m^2 c^4 \Psi$

oder $\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi(x, t) = 0$

oder $\left[\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi(x, t) = 0$ (Klein-Gordon-Gleichung)

$\square \equiv \text{Quabla} \equiv \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$ ($\leftarrow$ Laplace Operator) $= \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Ebenso :

Dirac-Gleichung für $s = \frac{1}{2}$ - Teilchen ($s = \frac{1}{2} = \text{Spin}$)

Procca-Gleichung für $s = 1$ Teilchen ($s = 1 = \text{Spin}$)

Für das Wasserstoffatom: $\alpha = \frac{v_{n=1}}{c} = \frac{1}{137}$ so $v \ll c$
 $\rightarrow$ nicht mehr relativistisch $\rightarrow$ Schrödingergleichung O.K.

Vorteil der SG: $E > 0$ (immer). KG: auch $E < 0$ (=Antiteilchen)

Lösung der SG

$\Psi(x, t)$ ist eine Funktion von 2 unabhängigen Variablen $\rightarrow$ Variablentrennung, $\rightarrow$ d.h. versuche Lösungen $\Psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$ (8)

Mathe:

Die allgemeine Lösung der DGL ist eine Linearkombination dieser trennbaren Lösungen: $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x)f_n(t)$

Für (8) gilt: $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \varphi \frac{df}{dt}$ $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \varphi}{dx^2} f$ (9)

Schrödinger-Gleichung: (9) in (7): (10)

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} (abh.vont)}_{L} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} (abh.vonx)}_{R} + V(x)$$

nur möglich wenn $L = R = \text{Konstante} \equiv E$

Jetzt: 2 Gleichungen:

1. $i\hbar \frac{df}{dt} \equiv E f$ (11)

2. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V \varphi = E \varphi$ (12)

(Die Variablentrennung hat die partielle DGL in zwei normale DGL umgewandelt!)

Lösung von (11): $f(t) = \exp(-i \frac{Et}{\hbar})$

Lösung von (12): nur lösbar, wenn das Potential $V(x)$ bekannt ist.

Allgemeine Lösung der Schrödingergleichung (13):

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n \exp(i \frac{E_n t}{\hbar})$$

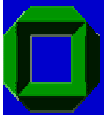
Lösung der SG

Beachte: Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist unabhängig von t:

$$\int |\Psi|^2 dV \equiv \int \Psi^* \Psi dV = \int \varphi \exp(+i \frac{E_n t}{\hbar}) \varphi \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar}) dV = \int \varphi^* \varphi dV = \int |\varphi|^2 dV$$

(unabhängig von t!)

Es gibt stationäre Lösungen!



Linearität, Superposition, Interferenz

2-Zustands-System

Quantenmechanik (Schrödingergleichung) ist **linear**.

Beliebige Überlagerungen = **Superpositionen** von Lösungen sind gleichwertige Lösungen.

Daher: Ein Quantensystem kann nicht nur in 'Eigenzuständen' sondern auch in allen möglichen Superpositionen sein.

Direkte Folge der Superposition: **Interferenz**

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle$$

with

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Das einfachste Beispiel um Superpositionen zu studieren ist **2-Zustands-System**

Polarisation: Horizontal, Vertikal :

45° polarization:

equal superposition of V and H

σ^+ polarisation:

equal superposition of V and H
with $\pi/2$ phase shift

$$|+45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle)$$

$$|-45^\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle)$$

$$|\sigma^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + i|V\rangle)$$

$$|\sigma^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - i|V\rangle)$$

Spin: up, down

$$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$$

Atom: 2 Zustände

Doppelspalt: Superposition der Zustände
+ Teilchen geht durch Spalt 1
+ Teilchen geht durch Spalt 2
Überlagerung ergibt Interferenz

(links) $|L\rangle$, (rechts) $|R\rangle$



Der Hilbert-Raum

Dreidimensionaler Vektorraum	HILBERT-Raum																																													
Die <i>Vektoren</i> $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots$ sind die Elemente des Vektorraumes.	Die <i>Funktionen</i> $f_1(\vec{r}), f_2(\vec{r}), f_3(\vec{r}), \dots$ sind die Elemente des HILBERT-Raumes.																																													
Die Vektoren sind eindeutig festgelegt durch die Angaben der <i>drei</i> Komponenten a_{pq} (mit $p = 1, 2, 3, \dots, \infty$ und $q = 1, 2, 3$) entlang der <i>drei</i> Basisvektoren $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ und $\vec{e}_z$, d. h. der Vektorraum ist <i>dreidimensional</i> .	Die Funktionen sind eindeutig festgelegt durch die Angabe der Funktionswerte für die <i>unendlich</i> vielen Punkte $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_\infty$ im dreidimensionalen Vektorraum, d. h. der HILBERT-Raum ist <i>unendlich-dimensional</i> .																																													
<table><tr><td></td><td>$\vec{e}_x$</td><td>$\vec{e}_y$</td><td>$\vec{e}_z$</td></tr><tr><td>$\vec{r}_1$</td><td>a_{11}</td><td>a_{12}</td><td>a_{13}</td></tr><tr><td>$\vec{r}_2$</td><td>a_{21}</td><td>a_{22}</td><td>a_{23}</td></tr><tr><td>$\vec{r}_3$</td><td>a_{31}</td><td>a_{32}</td><td>a_{33}</td></tr><tr><td>$\vdots$</td><td>$\vdots$</td><td>$\vdots$</td><td>$\vdots$</td></tr></table>		$\vec{e}_x$	$\vec{e}_y$	$\vec{e}_z$	$\vec{r}_1$	a_{11}	a_{12}	a_{13}	$\vec{r}_2$	a_{21}	a_{22}	a_{23}	$\vec{r}_3$	a_{31}	a_{32}	a_{33}	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	<table><tr><td></td><td>$\vec{r}_1$</td><td>$\vec{r}_2$</td><td>$\dots$</td><td>$\vec{r}_\infty$</td></tr><tr><td>$f_1(\vec{r})$</td><td>$f_1(\vec{r}_1)$</td><td>$f_1(\vec{r}_2)$</td><td>$\dots$</td><td>$f_1(\vec{r}_\infty)$</td></tr><tr><td>$f_2(\vec{r})$</td><td>$f_2(\vec{r}_1)$</td><td>$f_2(\vec{r}_2)$</td><td>$\dots$</td><td>$f_2(\vec{r}_\infty)$</td></tr><tr><td>$f_3(\vec{r})$</td><td>$f_3(\vec{r}_1)$</td><td>$f_3(\vec{r}_2)$</td><td>$\dots$</td><td>$f_3(\vec{r}_\infty)$</td></tr><tr><td>$\vdots$</td><td>$\vdots$</td><td>$\vdots$</td><td>$\dots$</td><td>$\vdots$</td></tr></table>		$\vec{r}_1$	$\vec{r}_2$	$\dots$	$\vec{r}_\infty$	$f_1(\vec{r})$	$f_1(\vec{r}_1)$	$f_1(\vec{r}_2)$	$\dots$	$f_1(\vec{r}_\infty)$	$f_2(\vec{r})$	$f_2(\vec{r}_1)$	$f_2(\vec{r}_2)$	$\dots$	$f_2(\vec{r}_\infty)$	$f_3(\vec{r})$	$f_3(\vec{r}_1)$	$f_3(\vec{r}_2)$	$\dots$	$f_3(\vec{r}_\infty)$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
	$\vec{e}_x$	$\vec{e}_y$	$\vec{e}_z$																																											
$\vec{r}_1$	a_{11}	a_{12}	a_{13}																																											
$\vec{r}_2$	a_{21}	a_{22}	a_{23}																																											
$\vec{r}_3$	a_{31}	a_{32}	a_{33}																																											
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$																																											
	$\vec{r}_1$	$\vec{r}_2$	$\dots$	$\vec{r}_\infty$																																										
$f_1(\vec{r})$	$f_1(\vec{r}_1)$	$f_1(\vec{r}_2)$	$\dots$	$f_1(\vec{r}_\infty)$																																										
$f_2(\vec{r})$	$f_2(\vec{r}_1)$	$f_2(\vec{r}_2)$	$\dots$	$f_2(\vec{r}_\infty)$																																										
$f_3(\vec{r})$	$f_3(\vec{r}_1)$	$f_3(\vec{r}_2)$	$\dots$	$f_3(\vec{r}_\infty)$																																										
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$																																										
<i>Vektorsumme:</i> $\vec{r}_3 = \vec{r}_1 + \vec{r}_2 \qquad (6.1)$	<i>Funktionensumme:</i> $f_3(\vec{r}) = f_1(\vec{r}) + f_2(\vec{r}) \qquad (6.2)$																																													



Der Hilbert-Raum

Skalarprodukt, d.h. Multiplikation korrespondierender Komponenten, dann Addition der (drei) Einzelprodukte.

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \sum_{q=1}^3 a_{1q} a_{2q} \quad (6.3)$$

Orthogonalität, d.h. gilt $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = 0$, dann sind $\vec{r}_1$ und $\vec{r}_2$ linear unabhängig.

Vektortransformation: $\vec{T}\vec{r}_1 = \vec{r}_2$

$$\begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ a_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{21} \\ a_{22} \\ a_{23} \end{bmatrix}$$

Die Transformationsmatrix $\vec{T}$ ist linear, wenn $\vec{T}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) = \vec{T}(\vec{r}_1) + \vec{T}(\vec{r}_2)$

Skalarprodukt, d.h. Multiplikation korrespondierender Funktionswerte, dann Integration über den Definitionsbereich des gesamten HILBERT-Raumes $\mathbb{H}^\infty$ (Addition der unendlich vielen Einzelprodukte).

$$\langle f_1 | f_2 \rangle = \int_{\mathbb{H}^\infty} f_1^*(\vec{r}) f_2(\vec{r}) dV \quad (6.4)$$

Orthogonalität, d.h. gilt $\langle f_1 | f_2 \rangle = 0$, dann sind $f_1(\vec{r})$ und $f_2(\vec{r})$ linear unabhängig.

Funktionsoperation: $\vec{O}f_1(\vec{r}) = f_2(\vec{r})$

Wenn $O|f_1\rangle = o|f_1\rangle$ dann heisst $|f_1\rangle$ eine Eigenfkt. von O und o der zu O gehörende Eigenwert. Eigenwerte entsprechen Messwerte!

Der Operator $\vec{O}$ ist linear, wenn $\vec{O}(f_1(\vec{r}) + f_2(\vec{r})) = \vec{O}(f_1(\vec{r})) + \vec{O}(f_2(\vec{r}))$



Der Hilbert-Raum

Jeder Vektor $\vec{r}_p$ ist auf jede vollständige Basis „projizierbar“.

$$\vec{r}_p = a_{p1}\vec{e}_x + a_{p2}\vec{e}_y + a_{p3}\vec{e}_z \quad (6.5)$$

Jede Funktion $f_p(\vec{r})$ ist auf jede vollständige Basis „projizierbar“.

$$f_p(\vec{r}) = \sum_{q=1}^{\infty} a_{pq} \varphi_q(\vec{r}) \quad (6.7)$$

Einheitsvektoren im Hilbertraum meistens geschrieben als: "ket-Vektoren" $|\Phi\rangle$ und das Skalarprodukt wird dann $\langle\Phi| \Phi\rangle$ wobei $\langle\Phi|$ als "bra-Vektor" bezeichnet wird und komplex konjugiert + transponiert bedeutet.

Skalarprodukt ist also ein "bracket" und entspricht "Modulus"

einer komplexen Zahl, z.B. $\Phi = (x, +iy, 0)$ und $\Phi^* = (-iy, x, 0) \rightarrow$

$$\langle\Phi^*|\Phi\rangle = x^2 + y^2.$$



Eigenwerte und Eigenfunktionen

Eigenfunktionen beschreiben Eigenzustände, d.h. physikalisch mögliche Zustände, die durch messbare Größen, den Eigenwerten, charakterisiert werden.

Allgemeine Eigenfunktionsgleichung: $\hat{O} \Psi = O \Psi$ ($\hat{O}$ = Operator, O = Eigenwert)
Operator anwenden entspricht der Durchführung einer Messung.

→ Kollaps der Wellenfunktion auf Eigenfunktion, z.B. Schrödingers Katze:

$\Psi_K = c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} \rightarrow \hat{O} \Psi_K = \Psi_b \text{ oder } \hat{O} \Psi_K = \Psi_{nb}$
(↔ Messung durchführen = "gucken" → Eigenfunktion Ψ_b oder Ψ_{nb} .)

Grundpostulat der Quantenmechanik:

Messungen und Projektionsoperatoren der Wellenfkt. auf Eigenfkt führen beide zur "Kollaps" der Wellenfkt auf eine Eigenfkt. Der Eigenwert o der Eigenfunktionsgleichung $\hat{O}\Psi = o\Psi$ ist identisch mit dem Messwert. Zu jedem Messvorgang gibt es einen entsprechenden Operator.



Kurzfassung der Eigenschaften der Eigenfunktionen

1. Eigenfunktionen sind orthonormal, d.h. ihr Skalarprodukt ist $= 0$;
2. übliche Schreibweise: $|\Psi\rangle = \Psi$, $\langle\Psi| = \Psi^*$
(Dirac - Notation: $\langle| = \text{Bra Vektor}, | \rangle = \text{Ket Vektor}, \langle| \rangle = \text{Bracket}$)

$$\int \Psi^* \Psi dV = \int |\Psi|^2 dV \equiv \langle\Psi|\Psi\rangle$$

(Beachte: Ψ komplex, daher $\Psi = a + ib$ oder $A \exp(i\varphi) \rightarrow \Psi^* = a - ib$
oder $a \cdot \exp(-i\varphi) \rightarrow \Psi^* \Psi = (a+ib)(a-ib) = a^2 + b^2$
oder $\Psi^* \Psi = A \exp(-i\varphi) \cdot A \exp(i\varphi) = A^2$)

$$\text{Orthonormal: } \begin{aligned} \langle\Psi_i|\Psi_i\rangle &= 1 \\ \langle\Psi_i|\Psi_j\rangle &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{z.B.: } \langle\Psi_K|\Psi_K\rangle &= \langle c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} | c_1 \Psi_b + c_2 \Psi_{nb} \rangle \\ &= c_1^2 \langle\Psi_b|\Psi_b\rangle + c_2^2 \langle\Psi_{nb}|\Psi_{nb}\rangle + 2c_1 c_2 \langle\Psi_b|\Psi_{nb}\rangle \\ &= c_1^2 + c_2^2 = 1, \text{ wobei:} \end{aligned}$$

c_1 = Wahrscheinlichkeit, dass Katze bewusstlos ist
 c_2 = Wahrscheinlichkeit, dass Katze nicht bewusstlos ist

2. Eigenfunktionen sind komplett, d.h. alle möglichen Eigenzustände sind berücksichtigt ("Vektorraum komplett aufgespannt")

z.B.: Ψ_K hat nur 2 orthonormale Komponenten, d.h. die Katze ist entweder bewusstlos oder nicht bewusstlos.

Bei der Eigenfunktion der Energie hat man unendlich viele Energieniveaus

($E \propto \frac{1}{n^2}$) → ∞ großer Vektorraum → Eigenfunktion und Polynome mit unendlich vielen Termen.

Beispiel

Gegeben sei der Zustandsvektor eines Systems mit zwei möglichen Zuständen $|\Psi\rangle = \alpha_1 |\Phi_1\rangle + \alpha_2 |\Phi_2\rangle$. Die Eigenfunktionen sind $|\Phi_1\rangle$ und $|\Phi_2\rangle$ und eine Messung wird mit Wahrscheinlichkeit α_1^2 das System in Zustand $|\Phi_1\rangle$ vorfinden.

In der QM wird diese Wahrscheinlichkeit ausgerechnet durch Anwendung des Operators A auf den Zustandsvektor. Z.B. $A|\Phi_1\rangle = |\Phi_1\rangle$ und $A|\Phi_2\rangle = 0$ wenn A der Projektionsoperator auf den Zustand $|\Phi_1\rangle$ entspricht. Weiter gilt für orthogonale Basis $\langle \Phi_1 | \Phi_1 \rangle = 1$ $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = 0$

In der Praxis entspricht die Anwendung eines Operators eine Messung, weil eine Messung auch den Zustandsvektor auf eine Eigenfunktion projiziert! Z.B. Operator A entspricht bei der Katze eine Messung des Blutdruckes, womit bestätigt wird dass die Katze nicht bewusstlos ist. Beide, Messung und Operatoranwendung verursachen einen Kollaps der Wellen- oder Zustandfunktion auf einen Basisvektor (=Eigenzustand).

Damit gilt $\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \alpha_1 \langle \Phi_1 | A | \Phi_1 \rangle + \alpha_2 \langle \Phi_2 | A | \Phi_2 \rangle = \alpha_1^2$ d.h. der "Überlapp" von $|\Psi\rangle$ und $\langle \Phi_1 |$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit.

Erwartungswerte

Allgemein: Erwartungswert $\langle O \rangle$ einer Variablen $O(x)$ ist $\int O(x) f(x) dx$,

wobei $f(x)$ die Wahrscheinlichkeit ist, dass $O(x)$ vorkommt.

In Bracket-Schreibweise: $\langle O \rangle = \int \Psi^* \hat{O}(x) \Psi(x) dx = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$,

wobei $\Psi(x)$ eine Eigenfunktion des Operators $\hat{O}$ ist, d.h. $\hat{O}\Psi(x) = O\Psi$ (O = Messwert).

Beweis: $\langle O \rangle$ {Erwartungswert} = $\int \Psi^* \hat{O} \Psi dx = \{\hat{O}\Psi = O\Psi\} = O \int \Psi^* \Psi dx = O$ {Messwert}

Aufgabe: Finde für jeden möglichen Messwert den zugehörigen Operator $\hat{O}$.

Energieoperator: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, denn es gilt:

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ (←Schrödingergleichung) mit $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

Hieraus folgt:

- Impulsoperator: $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
- Ortsoperator: $\hat{x} = x$
- Drehimpuls: $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{l} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$

In Komponenten: $l_z = x p_y - y p_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$

Beachte:

Jede Messung projiziert Ψ auf Eigenfunktion, d.h. beeinflusst Ψ . Dies kann in Theorie nachvollzogen werden durch Projektionsoperator, der auch "Kollaps" der Wellenfkt. herbeiführt.



Zusammenfassung der Operatoren für Observablen

x	x
y	y
z	z
$\vec{r}$	$\vec{r}$
p_x	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
p_y	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$
p_z	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$
$\vec{p}$	$-i\hbar \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right)$
$O = f(\vec{r}, \vec{p}, t)$	$\bar{O} = f(\vec{r}, -i\hbar \nabla, t)$
E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$\langle O \rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \bar{O} \Psi dV}{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV}$$

Kurzschreibweise für
Berechnung eines
Mittelwertes eines
Operators (entspricht
Mittelwert einer Messung):

$$\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$$



Vertauschungsrelationen

Allgemein: 2 Observable sind gleichzeitig messbar, wenn $\hat{O}_2 \hat{O}_1 = \hat{O}_1 \hat{O}_2$, d.h. die Operatoren sind vertauschbar, oder $\hat{O}_1 \hat{O}_2 - \hat{O}_2 \hat{O}_1 = 0$

In Kurzform : $[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0$ ($[\hat{O}_1 \hat{O}_2] \equiv \hat{O}_1 \hat{O}_2 - \hat{O}_2 \hat{O}_1$) (auch Kommutator genannt)

Beweis: $\hat{O}_1 \Psi = O_1 \Psi - \mathbf{X}, \hat{O}_2 \rightarrow \hat{O}_2 \hat{O}_1 = O_2 O_1 \Psi$ (1)

$(\hat{O}_2 \hat{O}_1 - \hat{O}_1 \hat{O}_2) \Psi = (O_2 O_1 - O_1 O_2) \Psi = 0$, wenn Ψ gleichzeitig Eigenfkt. von $\hat{O}_1$ und $\hat{O}_2$ ist. Kommutator gleich 0 bedeutet also das Messung von O_1 keine Nachwirkung für anschließende Messung von O_2 hat. Umgekehrt: wenn Kommutator zweier Variablen $\neq 0$, dann sind diese nicht gleichzeitig scharf zu bestimmen. Unsicherheit gegeben durch [].

Bsp $\hat{O}_x \hat{O}_p \Psi = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ (3)

$$\hat{O}_p \hat{O}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial (x \Psi)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \Psi + \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$
 (4)

$$(\hat{O}_x \hat{O}_p - \hat{O}_p \hat{O}_x) \Psi = \frac{\hbar}{i} \Psi \text{ oder } [\hat{O}_x \hat{O}_p] = \frac{\hbar}{i}$$

$\Rightarrow$ Ort und Impuls sind NICHT gleichzeitig messbar, weil die Operatoren nicht vertauschbar sind (wie man das ja aus der Heisenberg'schen Unschärferelation auch erwartet hatte).

Weitere Vertauschungsrelationen

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{l} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

$$l_z = x p_y - y p_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0, \quad i=x,y,z$$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$$

Gesamtdrehimpuls und eine der Komponenten nur gleichzeitig zu bestimmen.

Gesamtdrehimpuls und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Z-Komponente des Drehimpulses und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Eigenfunktionen der Energie sind auch Eigenfunktionen des Drehimpulses.

Zustandsvektor für die Energie im Vektorraum unendlich vieler Energien:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n \quad (\Psi_n = \text{Eigenfunktion für das Energieniveau } E_n)$$

$$\langle E \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 E_n$$

c_n^2 = Wahrscheinlichkeit, Energie E_n zu messen.

Bei Messungen an vielen Atomen (NICHT viele Messungen an EINEM Atom wegen Kollaps der Wellenfunktion!)

$$\text{findet man für die mittlere Energie: } \langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 E_n$$

Operatoren der QM müssen hermitesch sein

Definition: Ein Operator $\bar{O}$ ist hermitesch, wenn die folgende Gleichung gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i^* \bar{O} \psi_j dV = \int_{\mathbb{R}^3} \{ \bar{O}^* \psi_i^* \} \psi_j dV = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \bar{O} \psi_i dV \quad (6.9)$$

Satz 6.1 (Reelle Eigenwerte bei hermiteschen Operatoren) Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators sind reell. Umgekehrt gilt: Zu einem reellen Eigenwert korrespondiert ein hermitescher Operator.

Beweis:

$$\bar{O} \psi = o \psi \quad (6.10)$$

„Multiplikation“ von links mit ψ^* und Integration über den gesamten Raum ergibt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \bar{O} \psi dV = o \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \psi dV \quad (6.11)$$

Aufgrund Gleichung (6.9) kann die linke Seite von Gleichung (6.11) wie folgt umgeformt werden:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \{ \bar{O}^* \psi^* \} \psi dV = o \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \psi dV \quad (6.12)$$

$$o^* \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \psi dV = o \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \psi dV \quad (6.13)$$

$$o^* = o \quad (6.14)$$

Eigenfunktionen mit nicht entarteten EW sind orthogonal

Definition: Zwei Funktionen ψ_a und ψ_b sind orthogonal, wenn der folgende Zusammenhang gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_a^* \psi_b dV = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_b^* \psi_a dV = 0 \quad (6.15)$$

Satz 6.2 (Eigenfunktionen mit nicht entarteten Eigenwerten sind orthogonal zueinander)

Die Eigenfunktionen ψ_i mit den nicht entarteten Eigenwerten o_i zum hermiteschen Operator $\bar{O}$ sind orthogonal zueinander.

Beweis:

$$\bar{O}\psi_i = o_i\psi_i \quad (6.16)$$

„Multiplikation“ von links mit ψ_j^* und Integration über den gesamten Raum ergibt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \bar{O}\psi_i dV = o_i \int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \psi_i dV \quad (6.17)$$

Aufgrund Gleichung (6.9) kann die linke Seite von Gleichung (6.17) wie folgt umgeformt werden:

$$\int_{\mathbb{R}^3} \{ \bar{O}^* \psi_j^* \} \psi_i dV = o_i \int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \psi_i dV \quad (6.18)$$

$$o_j^* \int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \psi_i dV = o_i \int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \psi_i dV \quad (6.19)$$

$$0 = (o_i - o_j^*) \int_{\mathbb{R}^3} \psi_j^* \psi_i dV \quad (6.20)$$

Für den Fall, daß die Eigenwerte o_i und o_j^* nicht entartet sind, gilt die Gleichung $o_i - o_j^* \neq 0$. Dann wird die rechte Seite der Gleichung (6.20) aber nur null, wenn das Integral null ist, d. h. die beiden Funktionen ψ_i und ψ_j^* müssen orthogonal sein, q. e. d.^a

Zum Mitnehmen

Teilchencharakter der Strahlung führt zu Störungen bei der Beobachtung

Die Störungen können berechnet werden wenn man die Teilchen als Wellenpakete annimmt. Dies führt zur Unsicherheitsrelation.

Die Wellenfunktion eines Teilchens gehorcht der Schrödingergleichung

Die beobachtbaren Zustände sind Eigenfunktionen der SG und die Messungen entsprechen der Eigenwertgleichung: $\hat{O}|\Psi\rangle = o|\Psi\rangle$
Hier ist $\hat{O}$ ein Operator, der den "Kollaps" der Wellenfkt. auf eine Eigenfunktion herbeiführt und o ist der Messwert.

Nicht-kommutierende Operatoren entsprechen Observablen, die man nicht gleichzeitig scharf messen kann und die Wellenfkt. sind nicht gleichzeitig Eigenfunktionen dieser Observablen.



Vorlesung 8:

Roter Faden:

Lösungen der Schrödingergleichung

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: <http://www.chemie.uni-bremen.de/stohrer/skripte/QM-Skript.pdf>



Zum Mitnehmen

Teilchencharakter der Strahlung führt zu Störungen bei der Beobachtung

Die Störungen können berechnet werden wenn man die Teilchen als Wellenpakete annimmt. Dies führt zur Unsicherheitsrelation.

Die Wellenfunktion eines Teilchens gehorcht der Schrödingergleichung

Die beobachtbaren Zustände sind Eigenfunktionen der SG
und die Messungen entsprechen der Eigenfunktionsgleichung: $\hat{O}|\Psi\rangle = o|\Psi\rangle$
Hier ist $\hat{O}$ ein Operator, der den "Kollaps" der Wellenfkt. auf eine Eigenfunktion herbeiführt und o ist der Messwert.

Nicht-kommutierende Operatoren entsprechen Observablen, die man nicht gleichzeitig scharf messen kann und die Wellenfkt. sind nicht gleichzeitig Eigenfunktionen dieser Observablen.



Vertauschungsrelationen

Allgemein: 2 Observable sind gleichzeitig messbar, wenn $\hat{O}_2\hat{O}_1 = \hat{O}_1\hat{O}_2$, d.h. die Operatoren sind vertauschbar, oder $\hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1 = 0$

In Kurzform : $[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0$ ($[\hat{O}_1\hat{O}_2] \equiv \hat{O}_1\hat{O}_2 - \hat{O}_2\hat{O}_1$) (auch Kommutator genannt)

Beweis: $\hat{O}_1\Psi = O_1\Psi - \boxed{\times}, \hat{O}_2 \rightarrow \hat{O}_2\hat{O}_1 = O_2O_1\Psi$ (1)

$(\hat{O}_2\hat{O}_1 - \hat{O}_1\hat{O}_2)\Psi = (O_2O_1 - O_1O_2)\Psi = 0$, wenn Ψ gleichzeitig Eigenfkt. von $\hat{O}_1$ und $\hat{O}_2$ ist. Kommutator gleich 0 bedeutet also das Messung von O_1 keine Nachwirkung für anschließende Messung von O_2 hat. Umgekehrt: wenn Kommutator zweier Variablen $\neq 0$, dann sind diese nicht gleichzeitig scharf zu bestimmen. Unsicherheit gegeben durch $[\]$.

Bsp $\hat{O}_x\hat{O}_p\Psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x}$ (3)

$$\hat{O}_p\hat{O}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial(x\Psi)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i}\Psi + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\Psi}{\partial x} \quad (4)$$

$$(\hat{O}_x\hat{O}_p - \hat{O}_p\hat{O}_x)\Psi = \frac{\hbar}{i}\Psi \text{ oder } [\hat{O}_x\hat{O}_p] = \frac{\hbar}{i}$$

$\Rightarrow$ Ort und Impuls sind NICHT gleichzeitig messbar, weil die Operatoren nicht vertauschbar sind (wie man das ja aus der Heisenberg'schen Unschärferelation auch erwartet hatte).



Weitere Vertauschungsrelationen

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{l} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

$$l_z = xp_y - yp_x \rightarrow \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0, \quad i=x,y,z$$

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{l}_z] = 0$$

Gesamtdrehimpuls und eine der Komponenten nur gleichzeitig zu bestimmen.

Gesamtdrehimpuls und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Z-Komponente des Drehimpulses und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Eigenfunktionen der Energie sind auch Eigenfunktionen des Drehimpulses.

Zustandsvektor für die Energie im Vektorraum unendlich vieler Energien:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n \quad (\Psi_n = \text{Eigenfunktion für das Energieniveau } E_n)$$

$$\langle E \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 E_n^2$$

c_n^2 = Wahrscheinlichkeit, Energie E_n zu messen.

Bei Messungen an vielen Atomen (NICHT viele Messungen an EINEM Atom wegen Kollaps der Wellenfunktion!)

$$\text{findet man für die mittlere Energie : } \langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^2 E_n^2$$



Zusammenfassung der Operatoren für Observablen

x	x
y	y
z	z
$\vec{r}$	$\vec{r}$
p_x	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
p_y	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$
p_z	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$
$\vec{p}$	$-i\hbar \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right)$
$O = f(\vec{r}, \vec{p}, t)$	$\bar{O} = f(\vec{r}, -i\hbar \nabla, t)$
E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$\langle O \rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \bar{O} \Psi dV}{\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV}$$

**Kurzschreibweise für
Berechnung eines
Mittelwertes eines
Operators (entspricht
Mittelwert einer Messung):**

$$\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$$



Bedingungen einer Zustandsfunktion

Eine Zustandsfunktion muß, außer daß sie Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist, drei Kriterien erfüllen, damit sie physikalisch „sinnvoll“ sein kann:

1. Stetigkeit:
Es darf keine „Sprünge“ im Funktionsverlauf geben.
2. Eindeutigkeit:
Zu jeder Kombination von Variablenwerten gibt es genau einen Funktionswert.

3. Quadratische Integrierbarkeit und Normierbarkeit:
Die bei der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung (2.2) erhaltene Zustandsfunktion Ψ ist nicht notwendigerweise normiert, das heißt das Integral $\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ ist nicht notwendigerweise a priori gleich eins. Da die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen 1 irgendwo im Raum, das Teilchen 2 ebenfalls irgendwo im Raum, ... und das Teilchen N irgendwo im Raum zu finden, gleich eins ist, muß dieses Integral aber immer gleich eins sein. Um dies zu erreichen, wird die Funktion Ψ mit der Normierungskonstanten c multipliziert, wobei c dadurch bestimmt wird, daß das Integral $\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} c^* \Psi^* c \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ (als „Summe“ der differentiell kleinen Einzelwahrscheinlichkeiten dW) gleich eins gesetzt wird:

$$\int dW = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} c^* \Psi^* c \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1 \quad (2.9)$$

Daraus folgt der Ausdruck

$$c^* c = \frac{1}{\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \dots \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N}, \quad (2.10)$$

der nur dann definiert ist, wenn das Integral im Nenner endlich ist; die Zustandsfunktion also, wie man sagt, quadratisch integrierbar ist. Die Funktion $c\Psi$ ist ebenfalls Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung:



Übersicht der Postulate der QM

Postulat 1 (Existenz einer Zustandsfunktion) Jeder Zustand eines Systems von N Teilchen mit der jeweiligen Masse m_i wird so vollständig wie möglich durch eine Zustandsfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ beschrieben.

Jede experimentell meßbare Größe des Systems („Observable“) kann mittels der Zustandsfunktion Ψ berechnet werden.^a So ist beispielsweise der Ausdruck $\Psi^* \Psi dV_1 dV_2 \dots dV_N$ proportional der Wahrscheinlichkeit dW zur Zeit t das Teilchen 1 an der Stelle $\vec{r}_1$ im Volumenelement dV_1 , das Teilchen 2 an der Stelle $\vec{r}_2$ im Volumenelement dV_2 , ... und das Teilchen N an der Stelle $\vec{r}_N$ im Volumenelement dV_N zu finden.

Postulat 2 (Quantenmechanische Operatoren) Zu jeder Observablen O des Systems korrespondiert ein entsprechender quantenmechanischer Operator $\hat{O}$, deren elementaren Vertreter in der Tabelle ☐ aufgelistet sind.

Postulat 3 (Scharfe Messung) Es gebe einen Satz identischer Systeme jeweils mit der Zustandsfunktion Ψ , die Eigenfunktion zum Operator $\hat{O}$ sei, so daß gilt $\hat{O}\Psi = o\Psi$. Jede Messung der Observablen O an den einzelnen Systemen ergibt immer den gleichen Wert o ; jede sich wiederholende Messung an ein und demselben System ergibt ebenfalls immer den selben Wert o , sofern die Messung nicht den ursprünglichen Zustand Ψ des Systems verändert.

Postulat 4 (Unschärfe Messung) Es gebe einen Satz identischer Systeme jeweils mit der Zustandsfunktion Ψ , die nicht Eigenfunktion zum Operator $\hat{O}$ sei. Messungen der Observablen O an den einzelnen Systemen führen nicht zum jeweils gleichen Wert, sondern zu einer Verteilung, deren Erwartungswert^b

durch $\langle o \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ gegeben ist.

^aDie Variablen $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t$ der Zustandsfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ werden häufig aus Platzgründen nicht explizit angegeben.

^bBei einer endlichen Zahl von Messungen wird der gefundene Mittelwert in der Regel vom berechneten Erwartungswert abweichen; erst bei einer unendlichen Zahl von Messungen geht der Mittelwert in den Erwartungswert über.



Übersicht der Postulate der QM

Postulat 5 (Schrödinger-Gleichung) Die Zustandsfunktion Ψ ist Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung (2.2).

$$\hat{E}\Psi = \hat{H}\Psi = (\hat{E}_{kin} + \hat{V})\Psi \quad (2.2)$$

Der Operator $\hat{H} = \hat{E}_{kin} + \hat{V}$ wird als HAMILTON-Operator bezeichnet, wobei $\hat{E}_{kin}$ und $\hat{V}$ für die Operatoren der kinetischen bzw. potentiellen Energie stehen. Diese Operatoren ergeben sich aus den klassischen Observablen gemäß Postulat 2 wie folgt:

$$E_{kin} = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 \quad (2.3)$$

$$\Rightarrow \hat{E}_{kin} = \frac{1}{2m}\vec{p}\vec{p} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (2.4)$$

^cDas Integral $\int_{\mathbb{R}^3} \square dV$ bezeichnet die Integration über den gesamten Definitionsbereich des dreidimensionalen Raumes $\mathbb{R}^3$ und stellt damit eine Kurzschreibweise für das dreifache Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \square dx dy dz$ dar. Der Ausdruck dV bezeichnet hierbei das differentiell kleine Volumenelement $dV = dx dy dz$.

In der Literatur werden die Integrationsgrenzen bei der Integration über den gesamten dreidimensionalen Raum häufig weggelassen, so daß sich die Symbolik für diese Operation auf den Ausdruck $\int \square dV$ beschränkt.



Lösung der SG im eindimensionalen Fall

Die zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung für diesen einfachen Fall lautet dann:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0 \Psi(x, t) \quad (2.13)$$

Es gilt jetzt, eine Funktion $\Psi(x, t)$ zu finden, die sowohl dieser Gleichung genügt als auch alle Nebenbedingungen erfüllt.

1. Ansatz

Am simpelsten ist die Methode, sich der bereits bekannten Funktion (1.36) einer harmonischen Welle zu bedienen.

$$\Psi(x, t) = A \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.14)$$

Durch Einsetzen überprüft man, ob die Funktion Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist.

$$i\hbar A \frac{\partial \sin(k_x x - \omega t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 A}{2m} \frac{\partial^2 \sin(k_x x - \omega t)}{\partial x^2} + V_0 A \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.15)$$

$$-i\hbar A \omega \cos(k_x x - \omega t) = \frac{\hbar^2 A k_x^2}{2m} \sin(k_x x - \omega t) + V_0 A \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.16)$$

$$-i\hbar \omega \cos(k_x x - \omega t) = \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \right) \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.17)$$

Diese Funktion ist offensichtlich nicht Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, da die linke Seite nicht gleich der rechten ist.



2. Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall

Durch Einsetzen wird wieder geprüft, ob die Funktion (2.18) Lösung der Gleichung (2.13) ist.

$$\Psi(x, t) = A e^{i(k_x x - \omega t)} = A e^{ik_x x} e^{-i\omega t} \quad (2.18)$$

$$i\hbar A \frac{\partial e^{i(k_x x - \omega t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 A}{2m} \frac{\partial^2 e^{i(k_x x - \omega t)}}{\partial x^2} + V_0 A e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.19)$$

$$i\hbar (-i\omega) A e^{i(k_x x - \omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2) A e^{i(k_x x - \omega t)} + V_0 A e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.20)$$

$$i\hbar (-i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2) + V_0 \quad (2.21)$$

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \quad (2.22)$$

$$\omega = \frac{\hbar k_x^2}{2m} + \frac{V_0}{\hbar} \quad (2.23)$$

Die Funktion ist also dann Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, wenn die Bedingung der Gleichungen (2.22) bzw. (2.23) erfüllt ist.

Nur komplexe Funktionen als Lösung der SG!
Gilt nicht für relat. Klein-Gordon-Gleichung,
weil dort die ZWEITE Ableitung der Zeit vorkommt.



2. Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall

Die Bedingung (2.22) ist physikalisch sinnvoll, da sie nach Einsetzen der DE BROGLIE-Gleichungen (1.56) und (1.57) zur klassischen Energiebedingung führt.

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \quad (2.22)$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{p_x^2}{m} + V_0 \quad (2.24)$$

$$E = \frac{1}{2} m v_x^2 + V_0 \quad (2.25)$$

Die Zustandsfunktion $\Psi(x, t) = A e^{i(k_x x - \omega t)}$ ist, wie bereits erwähnt, eine komplexe Funktion und kann nach EULER in einen Realteil und einen Imaginärteil zerlegt werden.

$$\Psi(x, t) = A \cos(k_x x - \omega t) + iA \sin(k_x x - \omega t) \quad (2.26)$$

Der reelle Funktionsteil steht für eine sich in x -Richtung von links nach rechts bewegende harmonische Welle mit der x -Komponente k_x des Wellenvektors $\vec{k}$ und der Kreisfrequenz ω . Für den imaginären Funktionsteil gilt dies analog im imaginären Raum.



3. Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall

Als nächstes soll die konjugiert komplexe Funktion von $\Psi(x, t)$ in Gleichung (2.27) getestet werden.

$$\Psi^*(x, t) = A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} \quad (2.27)$$

$$i\hbar A^* \frac{\partial e^{-i(k_x x - \omega t)}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 A^*}{2m} \frac{\partial^2 e^{-i(k_x x - \omega t)}}{\partial x^2} + V_0 A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} \quad (2.28)$$

$$i\hbar(i\omega) A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2) A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} + V_0 A^* e^{-i(k_x x - \omega t)} \quad (2.29)$$

$$i\hbar(i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m} (i^2 k_x^2) + V_0 \quad (2.30)$$

$$-\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0 \quad (2.31)$$

Die Funktion ist zwar im mathematischen Sinne Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, aber vom physikalischen Standpunkt aus unsinnig, da eine negative Gesamtenergie $-\hbar\omega$ resultierte, während die Gegenseite $\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0$ immer positiv ist.



4. Ansatz zur Lösung der SG im eindimensionalen Fall

Eine Variation der Funktion $\Psi(x, t)$ ist die Funktion $\Psi'(x, t) = Ae^{i(-k_x x - \omega t)}$. Wie sich sehr leicht durch Vergleich zeigen läßt, ist $\Psi'(x, t)$ ebenfalls Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung, mit dem gleichen Ergebnis wie im Ansatz 2. Die Zustandsfunktion $\Psi'(x, t)$ beschreibt ein sich auf der x -Achse nach links bewegendes Teilchen. Die allgemeinen Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung lauten dann folgendermaßen:

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = \Psi \pm \Psi' \quad (2.36)$$

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = Ae^{i(k_x x - \omega t)} \pm Ae^{i(-k_x x - \omega t)} \quad (2.37)$$

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = Ae^{-i\omega t} (e^{ik_x x} \pm e^{-ik_x x}) \quad (2.38)$$

$$\Psi'_{1,2}(x, t) = Ae^{-i\omega t} (\cos(k_x x) + i \sin(k_x x) \pm \cos(k_x x) \mp i \sin(k_x x)) \quad (2.39)$$

$$\Psi'_1(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} \cos(k_x x) \quad (2.40)$$

$$\Psi'_2(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} i \sin(k_x x) \quad (2.41)$$

Beide Zustandsfunktionen entsprechen im Realteil stehenden Wellen und sind ebenfalls physikalisch sinnvolle Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung, wie sich durch Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung leicht zeigen läßt.



Zusammenfassung

Tabelle 2.2 Die Wahrscheinlichkeitsdichten und Eigenwertgleichungen für die gefundenen Zustandsfunktionen. Die erste Spalte enthält die zugrundeliegenden Funktionen, die alle Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung sind. Die zweite Spalte enthält die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Teilchen. In den letzten drei Spalten sind die Eigenwertgleichungen für die angegebenen Observablen aufgeführt; der erste Teil der Gleichung steht im Tabellenkopf, der zweite in der Tabelle.

Funktion f	$\frac{dW}{dx} = f^* f = \dots$	$\overline{p_x} f = \dots$	$\overline{E} f = \dots$	$\overline{H} f = \dots$
$\Psi(x, t) = Ae^{i(k_x x - \omega t)}$	$A^* A$	$\hbar k_x \Psi$	$\hbar \omega \Psi$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi$
$\Psi'(x, t) = Ae^{i(-k_x x - \omega t)}$	$A^* A$	$-\hbar k_x \Psi'$	$\hbar \omega \Psi'$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi'$
$\Psi'_1(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} \cos(k_x x)$	$4A^* A \cos^2(k_x x)$	e	$\hbar \omega \Psi'_1$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi'_1$
$\Psi'_2(x, t) = 2Ae^{-i\omega t} i \sin(k_x x)$	$4A^* A \sin^2(k_x x)$	e	$\hbar \omega \Psi'_2$	$\left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + V_0\right) \Psi'_2$

^eDiese Gleichungen stellen kein Eigenwertproblem dar!



Wenn Ψ keine Eigenfkt. von p , was ist dann Erwartungswert von p ?

Der Erwartungswert wird hier nur einmal exemplarisch für die Zustandsfunktion $\Psi_1'(x, t)$ berechnet, da das Ergebnis für $\Psi_2'(x, t)$ das gleiche ist.

$$\langle p_x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1'^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_1'(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1'^*(x, t) \Psi_1'(x, t) dx} \quad (2.52)$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} 2A^* e^{i\omega t} \cos(k_x x) \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right\} 2A e^{-i\omega t} \cos(k_x x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} 2A^* e^{i\omega t} \cos(k_x x) 2A e^{-i\omega t} \cos(k_x x) dx} \quad (2.53)$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{4A^* A i\hbar k_x \int_{-\infty}^{\infty} \cos(k_x x) \sin(k_x x) dx}{4A^* A \int_{-\infty}^{\infty} \cos^2(k_x x) dx} \quad (2.54)$$

Dieses Integral läßt sich leicht graphisch lösen. Das Integral $\int \cos(k_x x) \sin(k_x x) dx$ im Zähler ist über eine ganzzahlige Phase gleich null, ansonsten endlich und klein, nämlich maximal $\frac{1}{2k_x}$, wie sich graphisch ebenfalls leicht zeigen läßt. Das Integral $\int \cos^2(k_x x) dx$ im Nenner ist unendlich groß.

Damit folgt für den Gesamtausdruck:

$$\langle p_x \rangle = i\hbar k_x \frac{a}{\infty} \quad 0 \leq |a| \leq \frac{1}{2k_x} \quad (2.55)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad (2.56)$$

Abschließend bleibt zu bemerken, daß zwar alle vier Zustandsfunktionen Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung sind, sie aber im Sinne der Quantenmechanik noch keine „guten“ Zustandsfunktionen darstellen, da keine von ihnen quadratisch integrierbar ist.



Wellenpakete sind Lösung der SG

Wellenpaket ist Superposition vieler Wellen: $\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar C(k_x) \frac{\partial e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)}}{\partial t} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} C(k_x) \frac{\partial^2 e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)}}{\partial x^2} dk_x \quad (2.61)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar C(k_x) (-i\omega(k_x)) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar^2}{2m} C(k_x) (i^2 k_x^2) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x \quad (2.62)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hbar \omega(k_x) C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x = \int_{-\infty}^{\infty} \hbar \frac{\hbar k_x^2}{2m} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x \quad (2.63)$$

Die letzte Gleichung ist aber nur dann gültig, wenn die Bedingung $\omega(k_x) = \hbar k_x^2 / (2m)$ erfüllt ist, da nur dann die Integranden gleich sind, q. e. d.

Wellenpakete sind Lösung der SG und sind quadratisch integrierbar

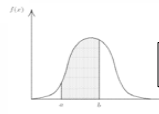


Wellenpakete also Lösung der SG, jedoch Lösung begrenzt durch Unschärferelation

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega(k_x) t)} dk_x$$

$$C(k_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ik_x x} dx$$

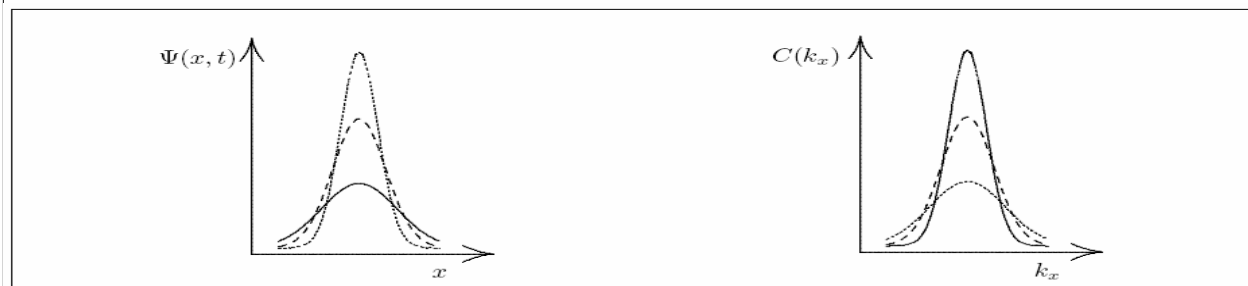
Liegt als Anfangsbedingung eine Gauss-Kurve vor



Wahrscheinlichkeitsdichte $\langle \Psi | \Psi \rangle$

$$u(x, 0) = u_0 \exp\left\{-\frac{x^2}{2b^2}\right\}, \quad \text{so ist} \quad A(k) = \frac{u_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{x^2}{2b^2} - ikx\right\} dx = u_0 \frac{b}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{b^2}{2} k^2\right\}$$

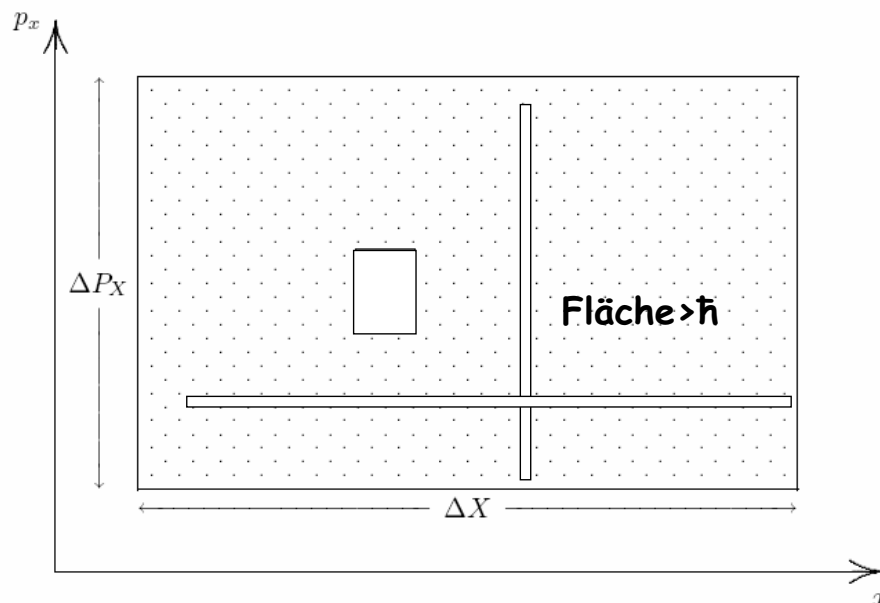
ebenfalls eine Gauss-Kurve, denn es ist $\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-px^2 + qx\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} \exp\left\{\frac{q^2}{4p}\right\}$.



Die Fouriertransformierte eines gaussförmigen Wellenpaket mit Standardabweichung σ ergibt im Impulsraum wieder einen Gaussform, jedoch mit Standardabweichung $1/\sigma$!



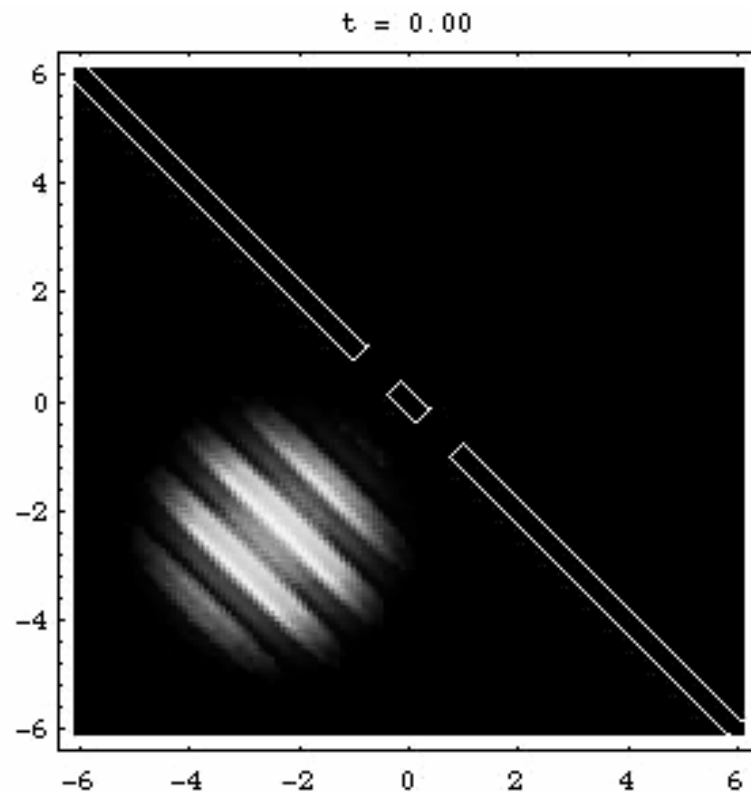
Unschärferelation im Phasenraum



Phasenraumpunkt $[dx, dy, dz, dp_x, dp_y, dp_z]$ nicht beliebig genau zu bestimmen: $\Delta x \Delta p_x > \hbar$ $\Delta y \Delta p_y > \hbar$ $\Delta z \Delta p_z > \hbar$



Lösung der SG bei Streuung am Doppelspalt



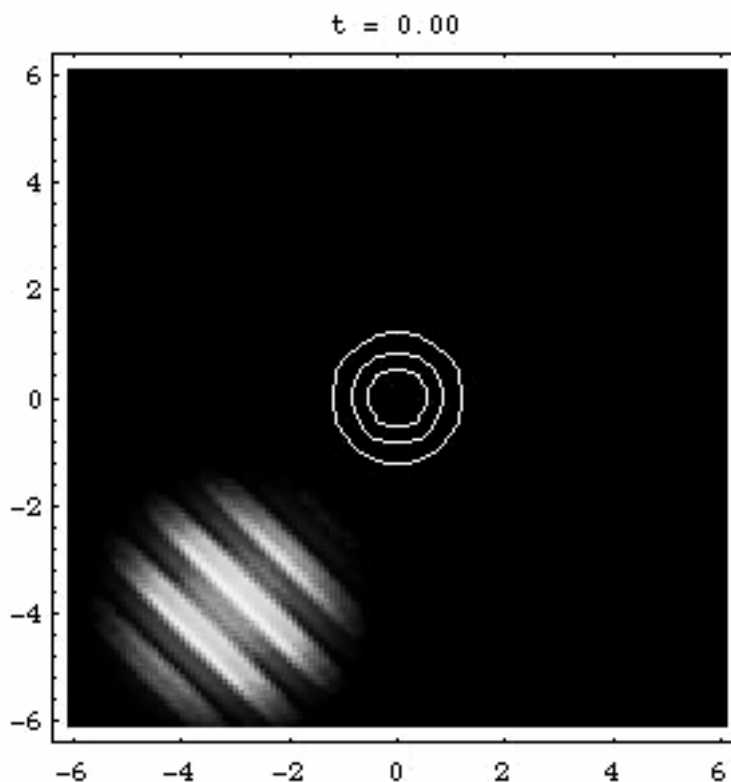
Teil der
Welle
reflektiert.

Anfang:

Gaussches
Wellenpaket



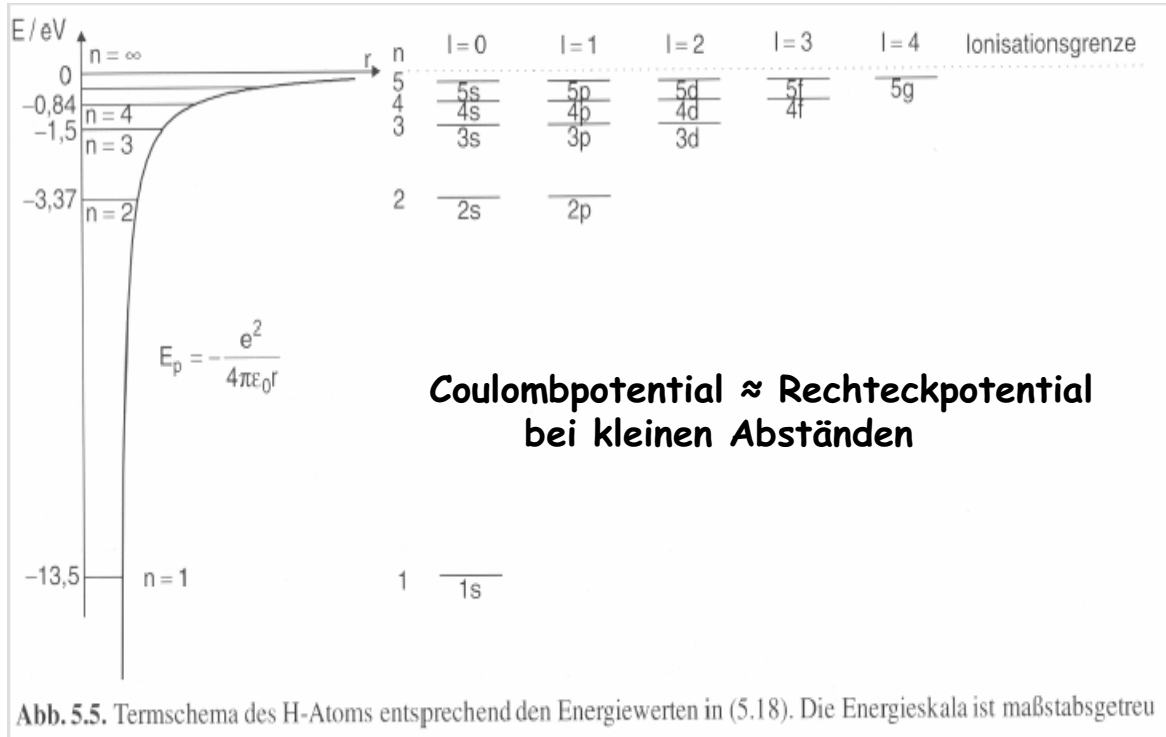
Lösung der SG bei Streuung an einem attraktiven Potentialwall



Streuung von
2 Teilchen
(Gaussche
Wellenpakete)
mit Impakt-
parameter $\neq 0$



Lösung der SG in einem externen Potentialfeld



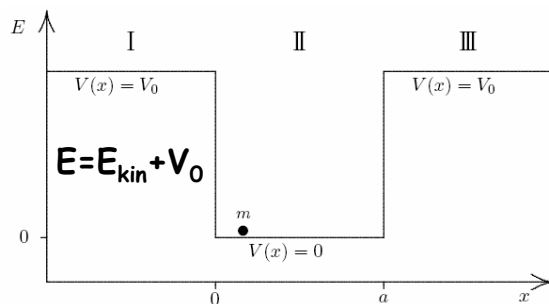
Mai 10, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

21



Lösung der SG für Teilchen in einem endlichen Potentialtopf (schwach gebundener Zustand)



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & : -\infty \leq x \leq 0 \quad (\text{Bereich I}) \\ 0 & : 0 < x < a \quad (\text{Bereich II}) \\ V_0 & : a \leq x \leq \infty \quad (\text{Bereich III}) \end{cases}$$

$$E_{kin} = \begin{cases} E - V_0 & : -\infty \leq x \leq 0 \quad (\text{Bereich I}) \\ E & : 0 < x < a \quad (\text{Bereich II}) \\ E - V_0 & : a \leq x \leq \infty \quad (\text{Bereich III}) \end{cases}$$

Ansatz: $\Psi(x, t) = u(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \Rightarrow \frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} u(x)$$

Lösung für I+III

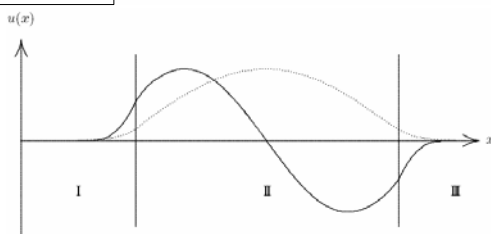
$$u_A(x) = Ae^{\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}x}$$

$$u_B(x) = Be^{-\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}x}$$

Lösung für II

$$u_C(x) = C \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$

$$u_D(x) = D \cos \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$$



Quadratische Integrierbarkeit verlangt u_A für $x < 0$ und u_B für $x > 0$.
Zusätzlich Stetigkeit der Lösung ergibt gezeichnete Lösung: AW max. im Topf, aber exp. abnehmend ausserhalb (=Tunneleffekt, klassisch nicht erlaubt!)

Mai 10, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

22



Lösung der SG für Teilchen in einem unendlich tiefen Potentialtopf (gebundener Zustand)

Bereich I: $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} u_A(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} A e^{\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} x} = 0$ $u(x) = \begin{cases} 0 & : -\infty \leq x \leq 0 \quad (\text{Bereich I}) \\ u_C(x) + u_D(x) & : 0 < x < a \quad (\text{Bereich II}) \\ 0 & : a \leq x \leq \infty \quad (\text{Bereich III}) \end{cases}$

Bereich III: $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} u_B(x) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty} B e^{-\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} x} = 0$

Stetigkeit der Lösung verlangt:

$u(x) = C \sin \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x$ **mit Randbedingung** $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = n\pi \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, 3, \dots$

oder $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$ **mit** $u_n(x) = C \sin \frac{n\pi}{a} x$ **Quantisierung der Energie durch Randbedingungen!**

Bereich I: $\Psi(x, t) = 0$

Bereich II: $\Psi_n(x, t) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$
 $= C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \exp\left(-i \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} t\right)$

Bereich III: $\Psi(x, t) = 0$

n=1 entspricht Nullpunktsenergie, die nicht unterschritten werden kann, auch bei T=0K. Nach Unschärferel. $\Rightarrow$ Nullpunktsschwingungen

Für n=0

$E_0 = \pi^2 \hbar^2 0^2 / 2ma^2 = 0$

$\Rightarrow \Psi=0$, daher sinnlos, da Teilchen nicht vorkommt. $\rightarrow n>0$, d.h. $n=1, 2, 3, \dots$



Normierung der Wellenfunktion

Aus $\int_{-\infty}^0 0^2 dx + C^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx + \int_a^{\infty} 0^2 dx = 1$

mit $\int \sin^2 ax dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax$

folgt $0 + C^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin 2 \frac{n\pi}{a} x}{4 \frac{n\pi}{a}} \right]_0^a + 0 = 1$

$C^2 \left(\left(\frac{a}{2} - \frac{\sin 2 \frac{n\pi}{a} a}{4 \frac{n\pi}{a}} \right) - (0) \right) = 1$

$C^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{\sin 2n\pi}{4 \frac{n\pi}{a}} \right) = 1$

$C^2 \left(\frac{a}{2} - \frac{0}{4 \frac{n\pi}{a}} \right) = 1$

$C^2 \frac{a}{2} = 1$

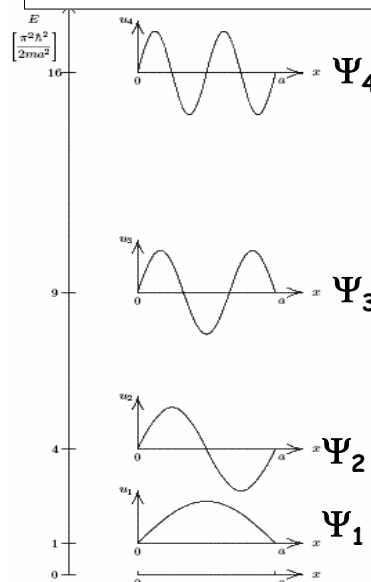
$C^2 = \frac{2}{a}$

$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$

Gesamtwellenfunktion:

$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i \frac{\hbar \pi^2 n^2}{2ma^2} t}$

Realteil Ψ formt stehende Wellen



Amplitude der Wellenfkt. Ψ_n für diskrete Energieniveaus (Eigenfkt. der Energie)



Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

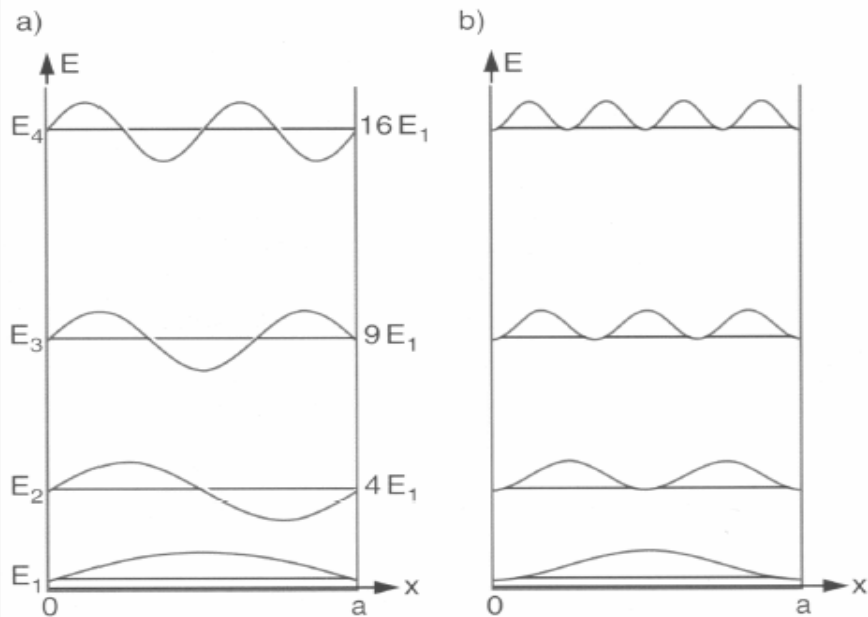


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ des Teilchens



Erlaubte Energieniveaus in unterschiedlichen Potentialkasten

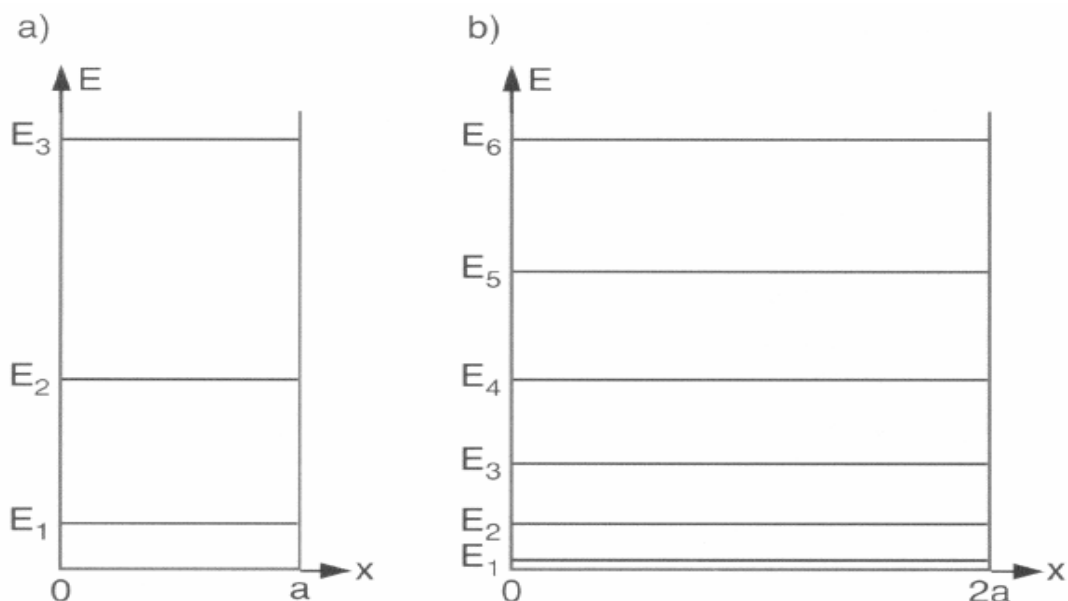


Abb. 4.17a,b. Vergleich der Energieniveaus in einem eindimensionalen unendlich hohen Potentialkasten der Breite (a) $\Delta x = a$, (b) $\Delta x = 2a$



Korrespondenzprinzip: QM $\Rightarrow$ KM für makroskopische Systeme

In Übereinstimmung mit der klassischen Vorstellung sind die beiden Bereiche I und III mit unendlich hohem Potential für das Teilchen absolut tabu.

Im Gegensatz zu den klassischen Vorstellungen gilt aber zweierlei:

1. Das Teilchen kann im gebundenen Zustand nicht beliebige Energiebeträge aufnehmen; es sind gemäß $n = 1, 2, 3, \dots$ nur bestimmte, scharfe Energiewerte erlaubt.
2. Es existiert eine **Nullpunktsenergie** bei $n = 1$, die nicht unterschritten werden kann, d. h., das Teilchen hat diese Energie auch beim absoluten Nullpunkt der Temperatur ($T = 0$ K) und kann (in Übereinstimmung mit HEISENBERG) damit natürlich niemals in Ruhe sein.

Der Abstand zwischen den erlaubten Energieniveaus E_n ist um so kleiner,

- je größer die Masse m und
- je größer der dem Teilchen zugestandene Raum, d. h. je größer die Topflänge a ist.

Das bedeutet, daß bei makroskopischen Körpern und/oder bei makroskopisch großen Potentialtöpfen (z. B. ein Gasbehälter mit einem Teilchen darin) die Energieniveaus so dicht aneinanderrücken, daß das quantenmechanische Ergebnis in das (scheinbare) Energiekontinuum der klassischen Mechanik übergeht.

Dies ist das Korrespondenzprinzip



Erwartungswert von x

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ gilt folgende Rechnung:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.35)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0x0 dx \\ &\quad + \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} dx \\ &\quad + \int_a^{+\infty} 0x0 dx \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\langle x \rangle = 0 + \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx + 0 \quad (3.38)$$



Erwartungswert von x

Mit der trigonometrischen Umformung $\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$ folgt aus Gleichung (3.38)

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \frac{1}{2} \int_0^a x \left[1 - \cos 2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \right] dx \quad (3.39)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a \left(x - x \cos \frac{2n\pi}{a} x \right) dx. \quad (3.40)$$

In Integraltabellen findet man $\int x \cos bx dx = \frac{\cos bx}{b^2} + \frac{x \sin bx}{b}$. Damit lässt sich Gleichung (3.40) weiter vereinfachen:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2} x^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} x}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{x \sin \frac{2n\pi}{a} x}{\frac{2n\pi}{a}} \right]_0^a \quad (3.41)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2} a^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} a}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{a \sin \frac{2n\pi}{a} a}{\frac{2n\pi}{a}} - \frac{1}{2} 0^2 + \frac{\cos \frac{2n\pi}{a} 0}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + \frac{0 \sin \frac{2n\pi}{a} 0}{\frac{2n\pi}{a}} \right] \quad (3.42)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2} a^2 - \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - 0 - 0 + \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + 0 \right] \quad (3.43)$$

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \quad (3.44)$$

Die Erwartung ist dass der Mittelwert von x in der Topfmitte ist



Erwartungswert von p_x

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.45)$$

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \\ &\quad + \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar} t} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t} \right) dx \\ &\quad + \int_a^{+\infty} 0 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 - i\hbar \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar} t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar} t} \int_0^a \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \right) dx + 0 \quad (3.48)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a \sin \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \left(\frac{n\pi}{a} \cos \left(\frac{n\pi}{a} x \right) \right) dx \quad (3.49)$$



Erwartungswert von p_x

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad (3.50)$$

In Integraltabellen findet man $\int \sin ax \cdot \cos ax \, dx = \frac{1}{2a} \sin^2 ax$, daraus folgt:

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a^2} \left[\frac{1}{2\frac{n\pi}{a}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \quad (3.51)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{1}{a} \left(\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}a\right) - \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}0\right) \right) \quad (3.52)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} (\sin^2(n\pi) - 0) \quad (3.53)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} 0 \quad (3.54)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad (3.55)$$

Die Erwartung ist dass der Mittelwert von p_x 0 ist, d.h. Teilchen hat mit gleicher Wahrscheinlichkeit ein Impuls nach links oder nach rechts.



Zum Mitnehmen

Die Randbedingungen der SG führt zur Quantisierung der Energien

Klassische Zustände sind immer Überlagerungen von vielen Eigenzuständen.

Es gibt eine niedrigste Energie für jedes Quantensystem $\neq 0$, weil ansonsten die AW 0 wird. Dies entspricht eine Impulsunschärfe und dementsprechend eine Ortsunschärfe $\Rightarrow$ Nullpunktsschwingungen (auch bei absoluter Temp. = 0!)



Vorlesung 9:

Roter Faden:

Wiederholung Quantisierung der Energien in QM

Franck-Hertz Versuch

Emissions- und Absorptionsspektren
der Atome

Spektren des Wasserstoffatoms

Bohrsche Atommodell

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>



Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in einem rechteckigen Potentialtopf

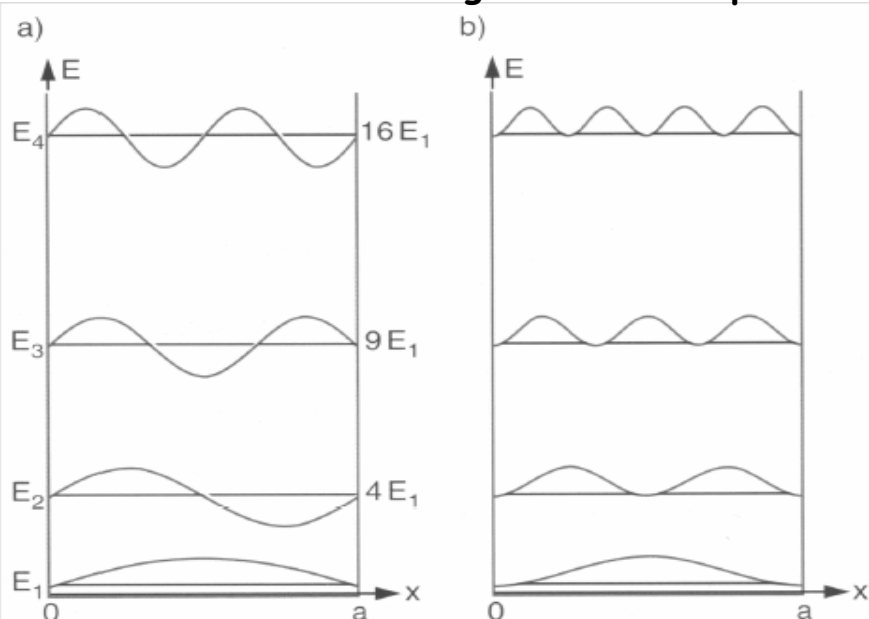


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ des Teilchens



Erlaubte Energieniveaus in unterschiedlichen Potentialkasten

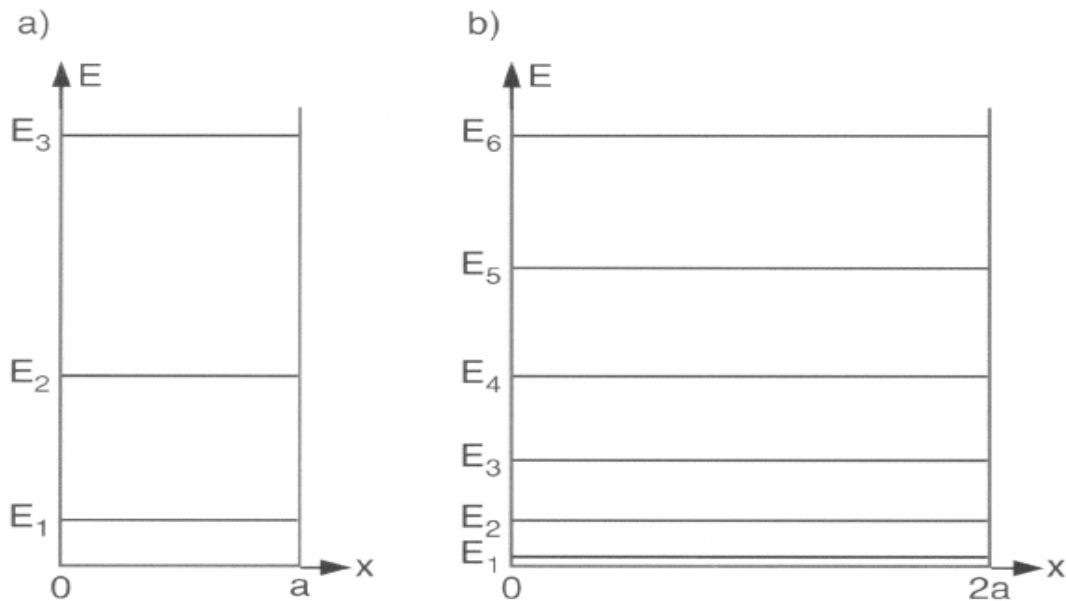


Abb. 4.17a,b. Vergleich der Energieniveaus in einem eindimensionalen unendlich hohen Potentialkasten der Breite (a) $\Delta x = a$, (b) $\Delta x = 2a$



Korrespondenzprinzip: QM $\Rightarrow$ KM für makroskopische Systeme

In Übereinstimmung mit der klassischen Vorstellung sind die beiden Bereiche I und III mit unendlich hohem Potential für das Teilchen absolut tabu.

Im Gegensatz zu den klassischen Vorstellungen gilt aber zweierlei:

1. Das Teilchen kann im gebundenen Zustand nicht beliebige Energiebeträge aufnehmen; es sind gemäß $n = 1, 2, 3, \dots$ nur bestimmte, scharfe Energiewerte erlaubt.
2. Es existiert eine **Nullpunktsenergie** bei $n = 1$, die nicht unterschritten werden kann, d.h., das Teilchen hat diese Energie auch beim absoluten Nullpunkt der Temperatur ($T = 0$ K) und kann (in Übereinstimmung mit HEISENBERG) damit natürlich niemals in Ruhe sein.

Der Abstand zwischen den erlaubten Energieniveaus E_n ist um so kleiner,

- je größer die Masse m und
- je größer der dem Teilchen zugestandene Raum, d.h. je größer die Topflänge a ist.

Das bedeutet, daß bei makroskopischen Körpern und/oder bei makroskopisch großen Potentialtöpfen (z.B. ein Gasbehälter mit einem Teilchen darin) die Energieniveaus so dicht aneinanderrücken, daß das quantenmechanische Ergebnis in das (scheinbare) Energiekontinuum der klassischen Mechanik übergeht.

Dies ist das Korrespondenzprinzip



Erwartungswert von x

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ gilt folgende Rechnung:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.35)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \bar{x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0x0 dx \\ &\quad + \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} x \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} dx \\ &\quad + \int_a^{+\infty} 0x0 dx \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\langle x \rangle = 0 + \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx + 0 \quad (3.38)$$



Erwartungswert von x

Mit der trigonometrischen Umformung $\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x)$ folgt aus Gleichung (3.38)

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \frac{1}{2} \int_0^a x \left[1 - \cos 2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right] dx \quad (3.39)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \int_0^a \left(x - x \cos \frac{2n\pi}{a}x \right) dx. \quad (3.40)$$

In Integraltabellen findet man $\int x \cos bx dx = \frac{\cos bx}{b^2} + \frac{x \sin bx}{b}$. Damit läßt sich Gleichung (3.40) weiter vereinfachen:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2}x^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a}x}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{x \sin \frac{2n\pi}{a}x}{\frac{2n\pi}{a}} \right]_0^a \quad (3.41)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2}a^2 - \frac{\cos \frac{2n\pi}{a}a}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - \frac{a \sin \frac{2n\pi}{a}a}{\frac{2n\pi}{a}} - \frac{1}{2}0^2 + \frac{\cos \frac{2n\pi}{a}0}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + \frac{0 \sin \frac{2n\pi}{a}0}{\frac{2n\pi}{a}} \right] \quad (3.42)$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a} \left[\frac{1}{2}a^2 - \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} - 0 - 0 + \frac{1}{\frac{4n^2\pi^2}{a^2}} + 0 \right] \quad (3.43)$$

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \quad (3.44)$$

Die Erwartung ist dass der Mittelwert von x in der Topfmitte ist



Erwartungswert von p_x

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.45)$$

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^0 \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_0^a \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx + \int_a^{+\infty} \Psi_n^*(x, t) \overline{p_x} \Psi_n(x, t) dx \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^0 0 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \\ &\quad + \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \right) dx \\ &\quad + \int_a^{+\infty} 0 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} 0 \right) dx \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 - i\hbar \frac{2}{a} e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx + 0 \quad (3.48)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left(\frac{n\pi}{a} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx \quad (3.49)$$



Erwartungswert von p_x

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad (3.50)$$

In Integraltabellen findet man $\int \sin ax \cdot \cos ax dx = \frac{1}{2a} \sin^2 ax$, daraus folgt:

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{2n\pi}{a^2} \left[\frac{1}{2\frac{n\pi}{a}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right]_0^a \quad (3.51)$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{1}{a} \left(\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}a\right) - \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}0\right) \right) \quad (3.52)$$

$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} (\sin^2(n\pi) - 0) \quad (3.53)$$

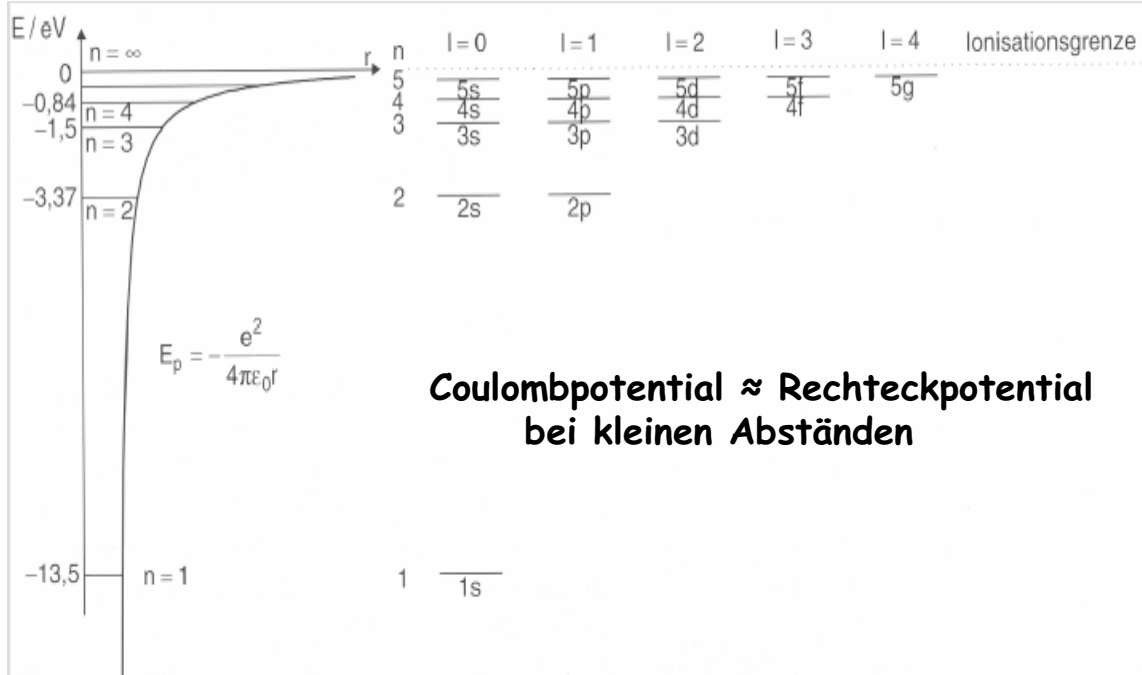
$$\langle p_x \rangle = -\frac{i\hbar}{a} 0 \quad (3.54)$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad (3.55)$$

Die Erwartung ist dass der Mittelwert von p_x 0 ist, d.h. Teilchen hat mit gleicher Wahrscheinlichkeit ein Impuls nach links oder nach rechts.



Coulomb-Potentiale der Atome

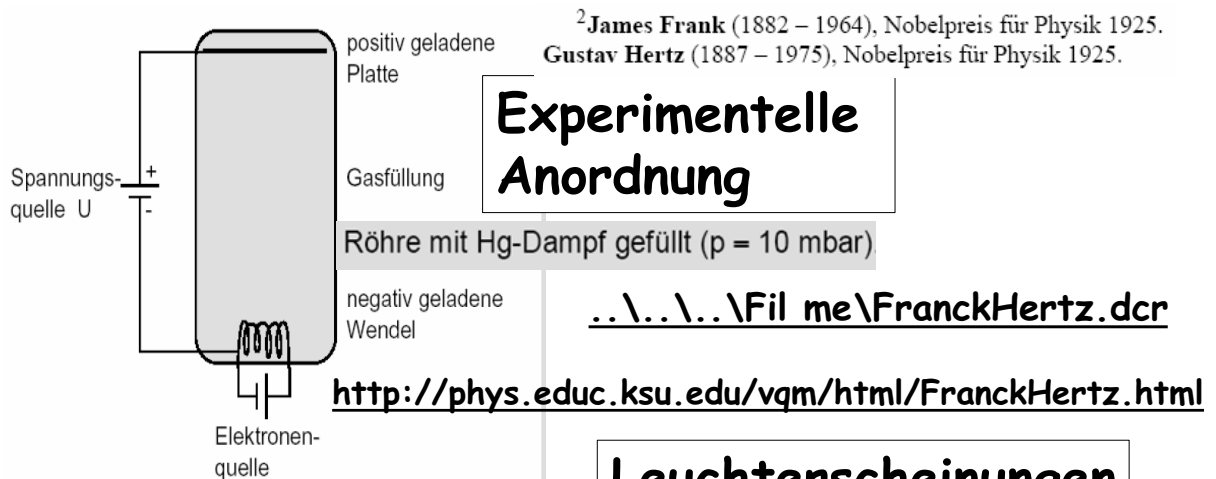


**Coulombpotential $\approx$ Rechteckpotential
bei kleinen Abständen**

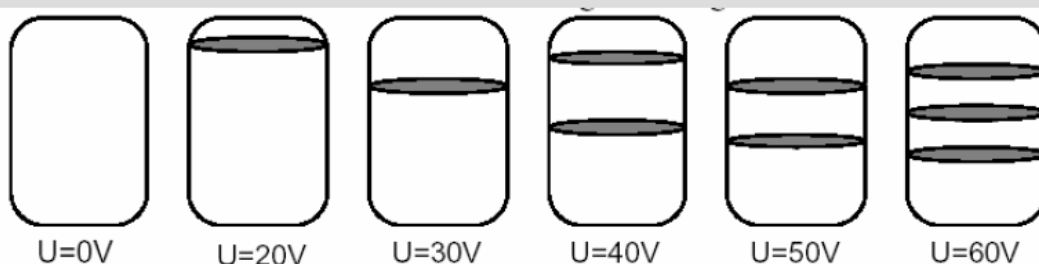
Abb. 5.5. Termschema des H-Atoms entsprechend den Energiewerten in (5.18). Die Energieskala ist maßstabsgetreu



Frank-Hertz Versuch beweist Energie Quantelung der Energieniveaus

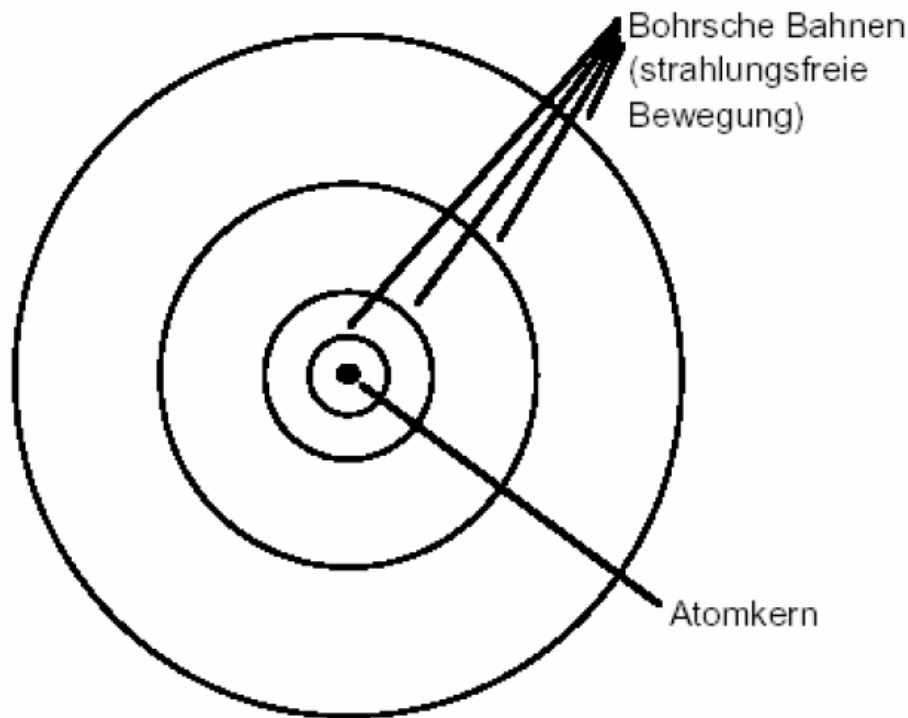


Leuchterscheinungen

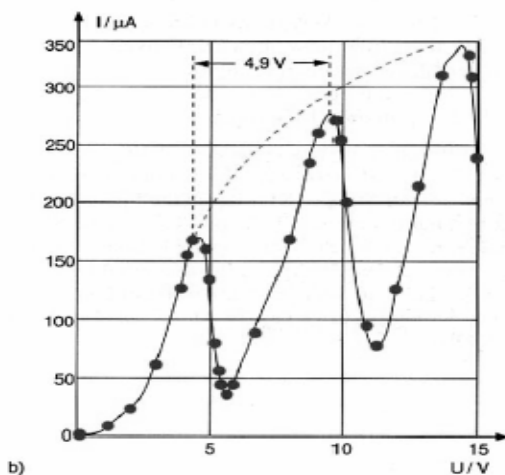
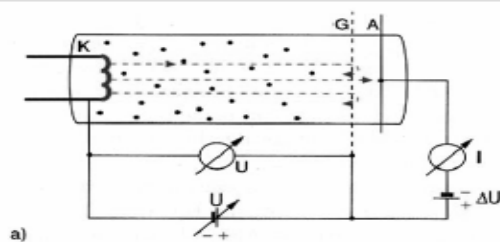




Anregung durch Stöße, Emission durch Übergänge zum Grundzustand



Frank-Hertz Versuch beweist Energie Quantelung der Energieniveaus



Franck-Hertz-Versuch. (a) Experimentelle Anordnung. (b) Verlauf des Elektronenstroms $I_e(U)$ als Funktion der Beschleunigungsspannung in einer Röhre mit Quecksilberdampf.

Ursache: inelastische Stöße d. Elektronen mit Hg-Atomen - führen zu Anregung der Atome gemäß: $e^- + \text{Hg} \rightarrow \text{Hg}^*(E_a) + e^- - \Delta E_{\text{kin}}$

mit $\Delta E_{\text{kin}} \approx E_a$ Elektronen geben $\Delta E_{\text{kin}} \approx E_a$ als E_a an Hg-Atom ab - Energieverlust des Elektrons - El. kann $-\Delta U$ nicht überwinden.

Elastische Stöße: Elektron kann max. $m_e/m_{\text{Hg}} \approx 10^{-5}$ abgeben.

Nur elastische Stöße $I(U)$ - gestrichelte Verlauf.

Bei höherer Beschleunigungsspannung - mehrere inelastische Stöße möglich.



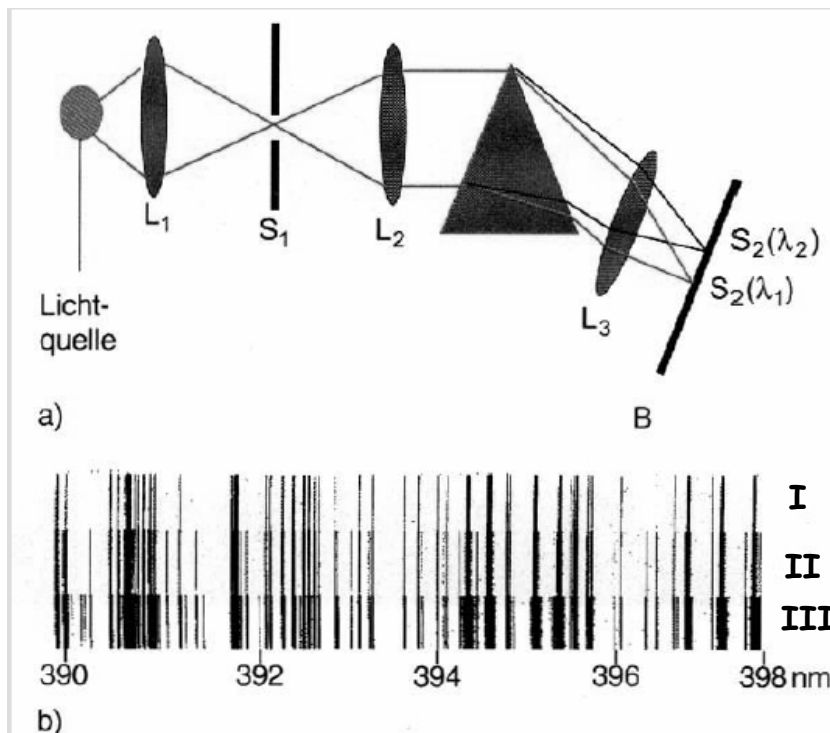
Frank-Hertz Versuch beweist Energie Quantelung der Energieniveaus

Die Beobachtungen lassen sich so erklären:

1. Die Elektronen werden beim Durchlaufen des elektrischen Feldes ständig beschleunigt, so daß ihre Energie kontinuierlich zunimmt. Man kann also den Elektronen in jedem Punkt in der Röhre eine Energie zuordnen.
2. Die Gasatome in der Röhre können nur ganz bestimmte Energieportionen aufnehmen, die durch die Energiedifferenz zwischen zwei Zuständen gegeben ist. Da die Gasatome im Grundzustand vorliegen, handelt es sich um die Energiedifferenz zwischen einem angeregten Zustand und dem Grundzustand.
3. Die Elektronen stoßen beim Durchlaufen des Gases ständig mit den Gasatomen zusammen, können aber nur dann Energie auf ein Atom übertragen, wenn ihre kinetische Energie größer ist als die Energie, die benötigt wird, um ein Atom anzuregen. Ist dies nicht der Fall, wird beim Zusammenstoß keine Energie übertragen, das Elektron also auch nicht abgebremst.
4. An bestimmten Punkten in der Röhre reicht die kinetische Energie der Elektronen aus, um Gasatome anzuregen. An dieser Stelle läßt sich eine Leuchterscheinung beobachten, da das Atom sofort wieder in den Grundzustand zurückfällt und dabei Licht aussendet. Die Elektronen haben nun soviel Energie verloren, daß sie keine weiteren Atome mehr anregen können. Sie werden weiter zur positiven Platte hin beschleunigt, bis die kinetische Energie wiederum ausreicht, um ein Gasatome anzuregen. An diesem Punkt kann man eine weitere Leuchterscheinung beobachten.



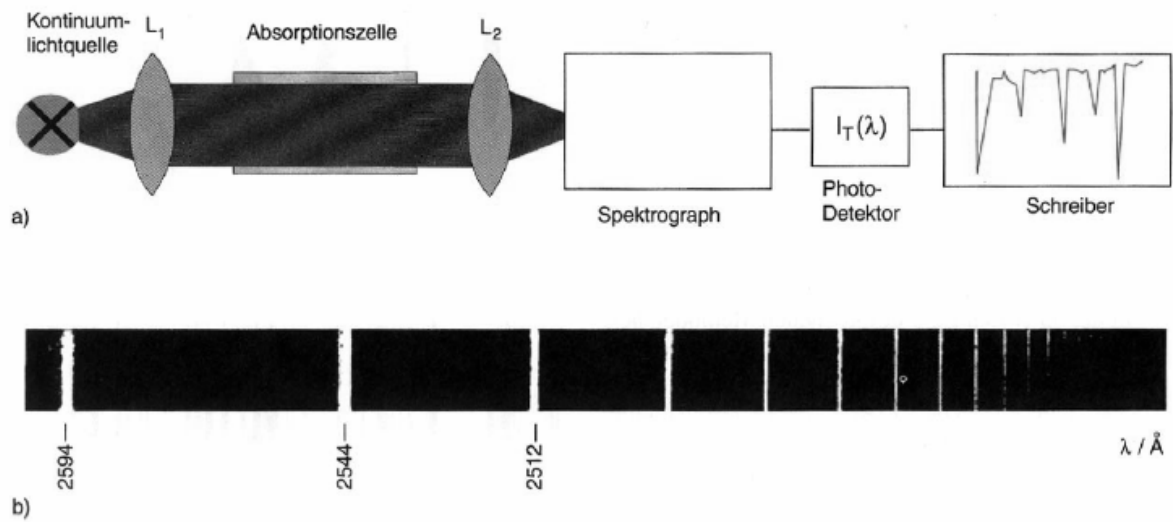
Emissionsspektren



(a) Anordnung zur Aufnahme von Emissionsspektren mit einem Prismenspektrographen; (b) Emissionsspektrum eines Eisenbogens im Spektralbereich von 390 bis 398 nm mit drei verschiedenen Belichtungszeiten.



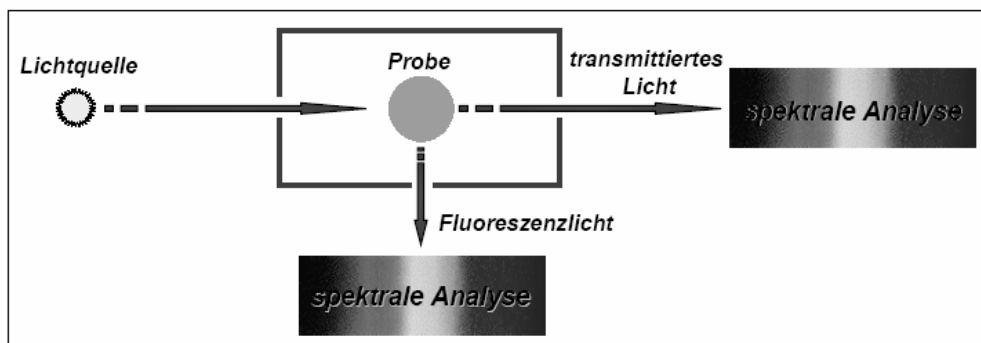
Absorptionsspektren



Messung von Absorptionsspektren. (a) Experimentelle Anordnung; (b) Absorptionsspektrum von Natriumdampf.



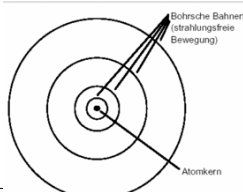
Gleichzeitige Messung von Absorption und Emission



Jeder Absorptionslinie (Wellenlänge) entspricht auch eine Emissionslinie. Emissions- bzw. Absorptionsspektrum ist für jedes Atom charakteristisch. **Spektralanalyse**

Spektrallinien sind nicht unendlich scharf! - Intensitätsverteilung mit endlicher Breite - Atome senden nicht streng monochromatisches Licht aus

Lösung:



Atome haben diskrete, aber nicht perfekt scharfe Energieniveaus. Übergänge zwischen den Niveaus möglich durch Absorption oder Emission von Lichtquanten mit $h\nu = \Delta E$.



Emissionsspektren von H-Atomen

J.J. Balmer: Emissionsspektrum des Wasserstoffatoms

Wellenlänge λ_k folgt einfachem Gesetz:

$$\nu_k = 1/\lambda_k = Ry \cdot \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{mit } n_1 = 2 \text{ und } n_2 = 3, 4, 5, \dots$$

$Ry = 109678 \text{ cm}^{-1}$ (Rydbergkonstante)

Lymanserie $n_1 = 1$

Paschenserie $n_1 = 3$

Erklärung?

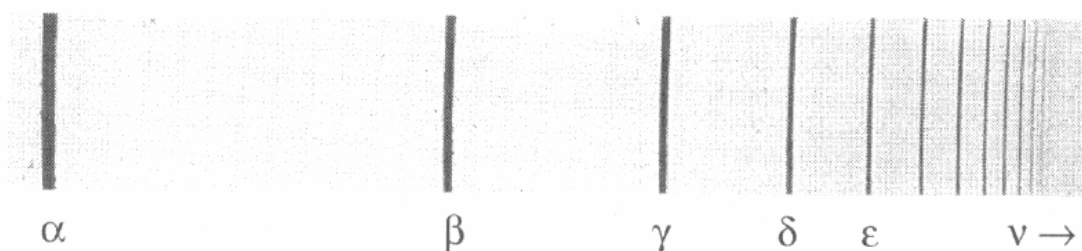
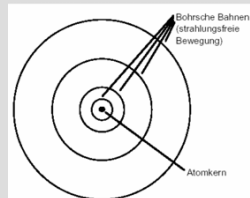
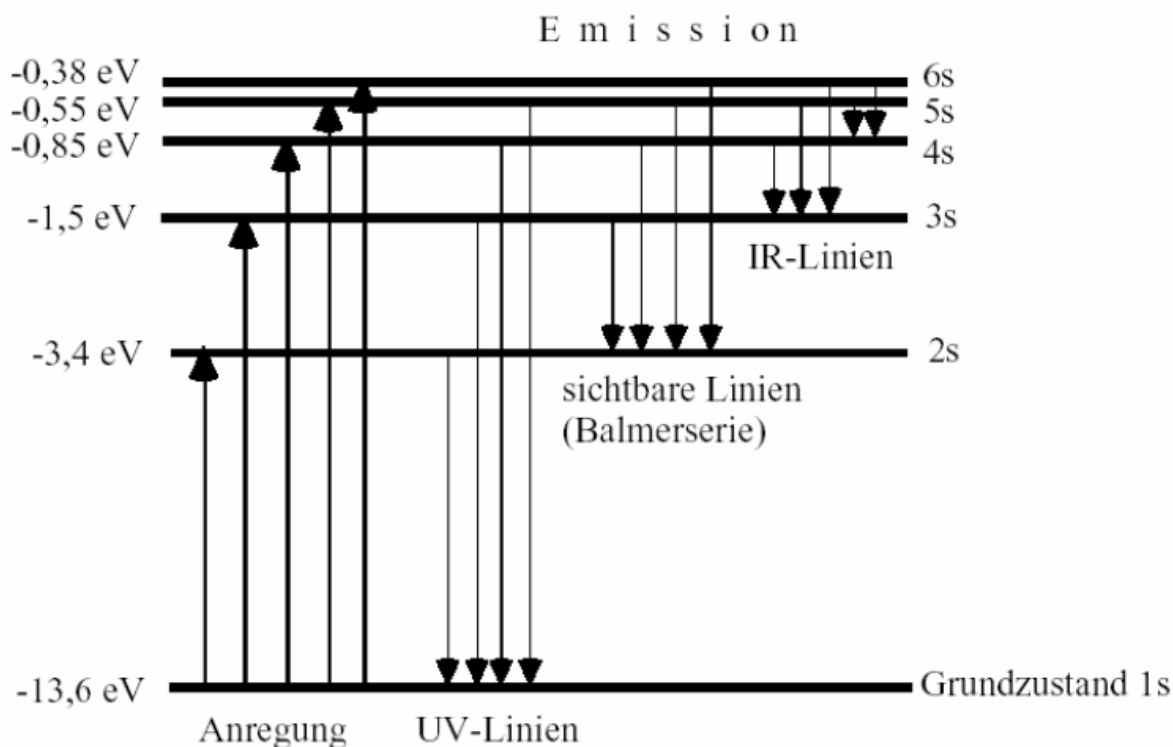


Abb. 3.26. Balmer-Spektrum des Wasserstoffatoms, emittiert von einer Wasserstoff-Gasentladungslampe

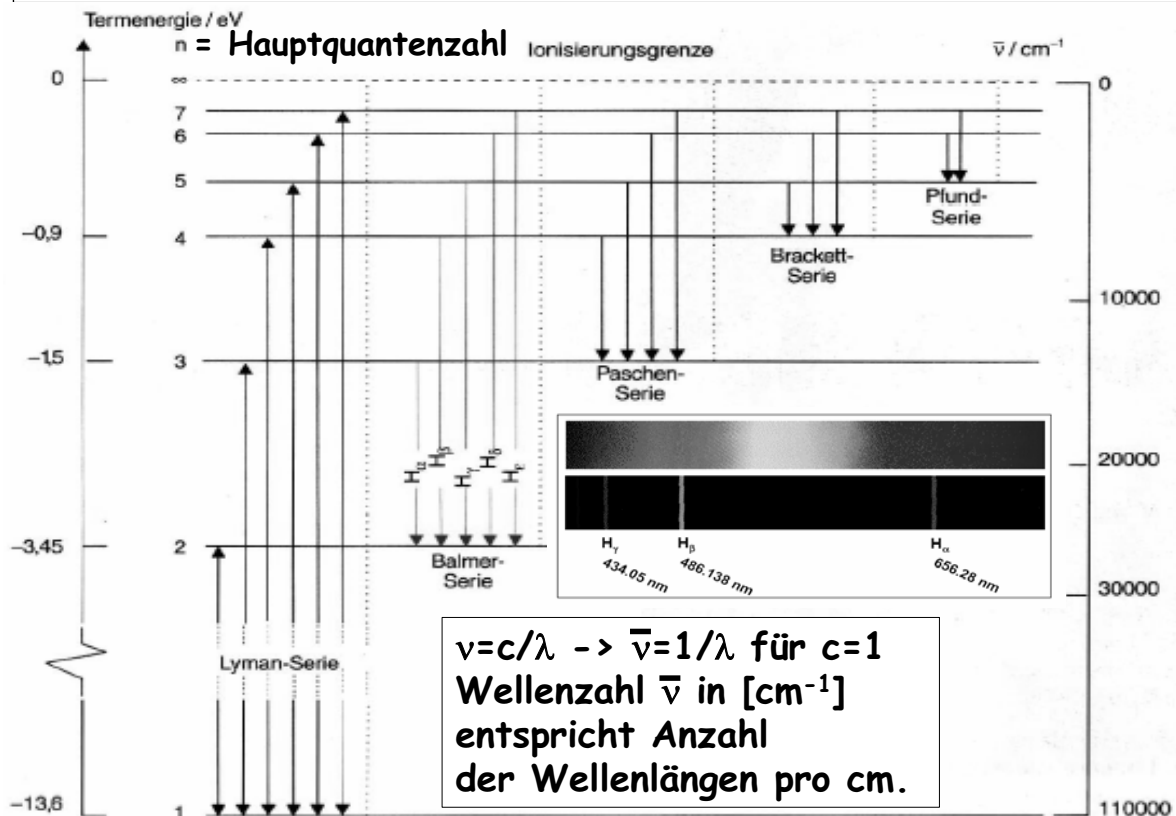


Spektren der H-Atome





Spektren der H-Atome



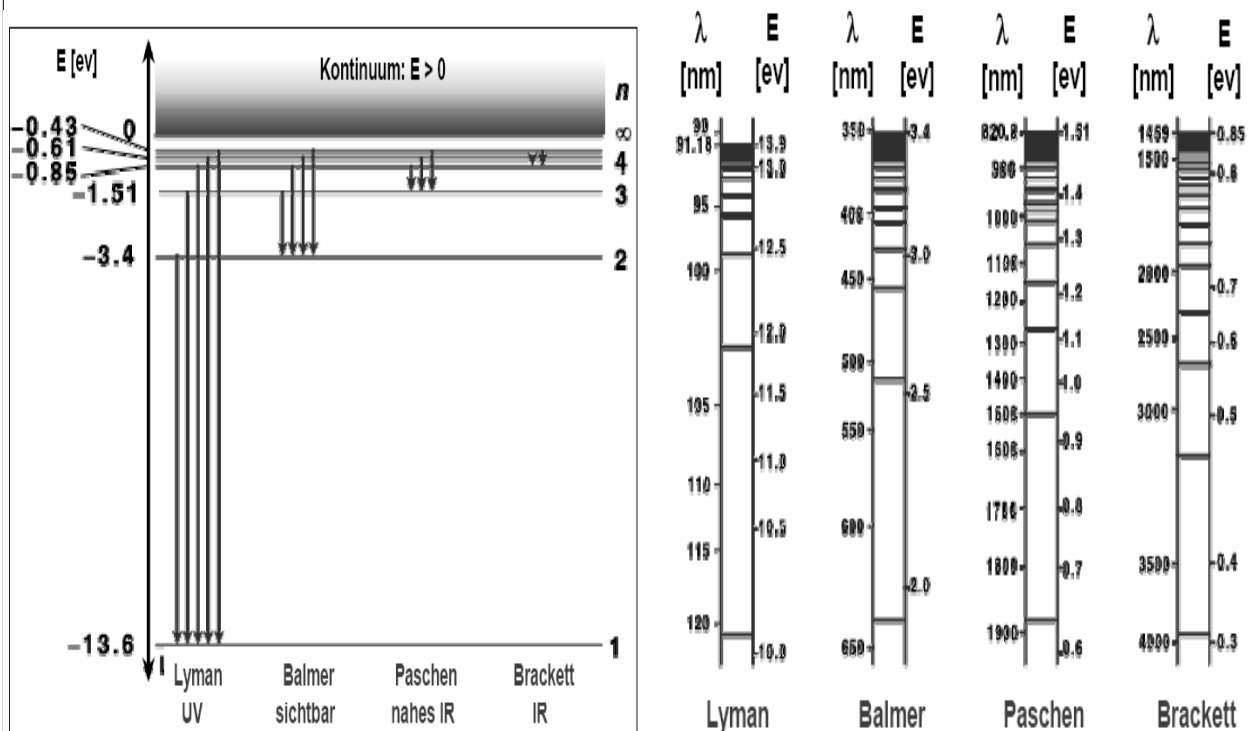
Mai 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

19



Spektren der H-Atome



Mai 12, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

20



Umrechnen der Einheiten

- Wellenlänge λ in Einheiten von m.
- Wellenzahl $\bar{\nu} = 1/\lambda = \nu/c$ in Einheiten von cm^{-1}
- Frequenz ν in Einheiten von Hz.
- Energie $h\nu = \hbar\omega$ in Einheiten von eV.

Dispersionsrelation für Licht: $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu}$

Daraus folgt:

$$E = 1 \text{ meV} \equiv \nu = 0.24 \text{ THz} \equiv \bar{\nu} = 8.066 \text{ cm}^{-1} \equiv \lambda = 0.125 \text{ cm}$$

z.B Licht von 500 Å hat Wellenzahl von $1/500 \cdot 10^{-8} = 20000$ und entspricht eine Energie von $20000/8.066 = 2.5 \text{ eV}$



Bohrsche Atommodell

Niels Bohr (1885 - 1962) "Planetenmodell" der Atome!

Elektron (Masse m_e) läuft mit Geschw. v auf einer Kreisbahn um den Schwerpunkt.

Bedingung: **Zentripetalkraft = Coulombkraft**, d.h.:

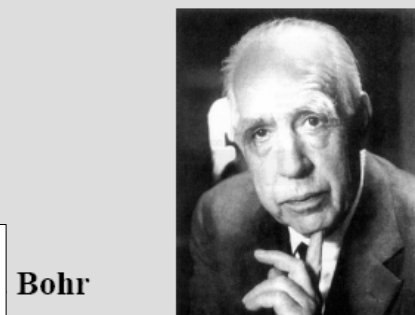
$$\frac{\mu \cdot v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} \quad \text{mit} \quad \mu = \frac{m_e \cdot m_K}{m_e + m_K} \approx m_e \Rightarrow \text{Radius der Kreisbahn:}$$

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \mu v^2}$$

Wenn keine Einschränkung für Energie d. Elektrons $\mu v^2/2$ existiert ist jeder Radius erlaubt.

**ABER in der QM
sind Energien
quantisiert!**

**Aber: Planetenmodell flach, Atome rund.
QM: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten NICHT in Planetenbahnen.**



Bohr



Bohrsche Atombahnen aus der QM!

Elektron durch Materiewelle beschreiben - **stationärer Zustand** des Atoms - **stehende Welle** $\Rightarrow$ Kreisumfang $n \cdot \lambda$

Es gilt: $2\pi \cdot r = n \cdot \lambda_D$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)

$\lambda_D = h/(\mu v) \Rightarrow$ Geschw. des Elektrons $v = n \cdot \frac{h}{2\pi \mu r}$

Für v in $r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\mu v^2}$ einsetzen:

Mögliche Radien der Elektronenbahn: $r = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi \cdot \mu \cdot Z \cdot e^2} = \frac{n^2}{Z} a_0$

a_0Bohrsche Radius: $a_0 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi \mu e^2} = 5,297 \cdot 10^{-11} \text{m} \approx 0,5 \text{\AA}$

Bedingung $2\pi \cdot r = n \cdot \lambda_D$ führt zu **QUANTELUNG der Elektronenbahnen!**

Kinetische Energie des Elektrons: $E_{kin} = \frac{\mu}{2} v^2 = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} E_{pot}$

Gesamtenergie: $E = E_{kin} + E_{pot} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ negativ

Es gilt für $r \rightarrow \infty$ und $n \rightarrow \infty$ $E \rightarrow 0$



Coulomb-Potentiale der Atome

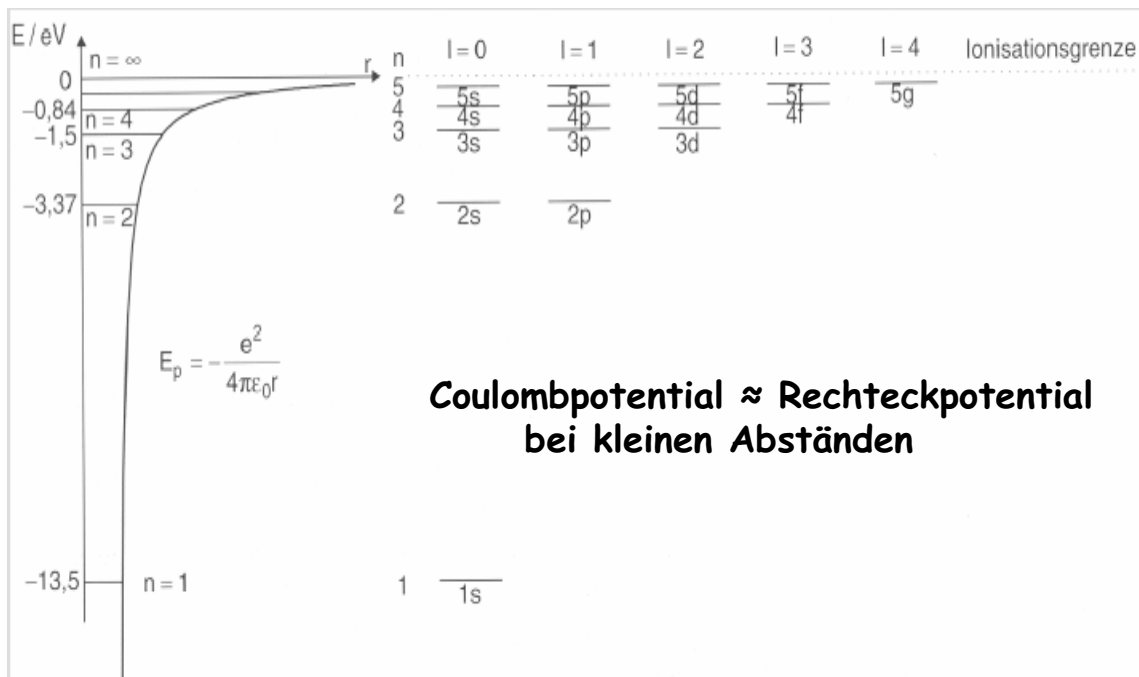
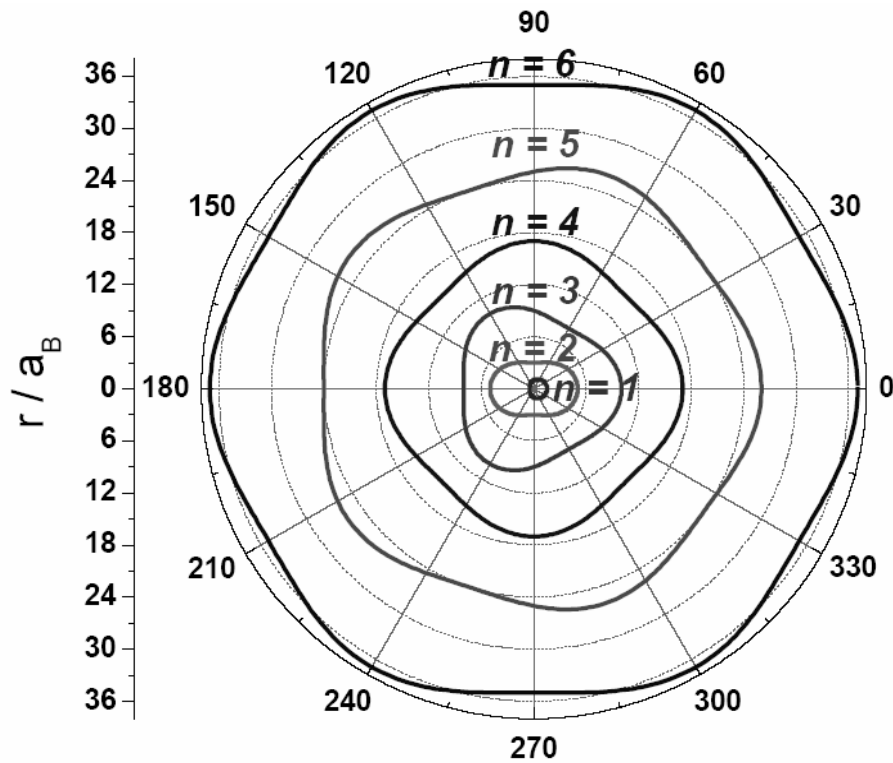


Abb. 5.5. Termschema des H-Atoms entsprechend den Energiewerten in (5.18). Die Energieskala ist maßstabsgetreu



Stehende de Broglie Wellen im Bohrschen Atommodell



Vorsicht:
diese Darstellung
dient nur zur
Illustration.
AW der Elektronen
viel komplizierter
wie wir nachher
sehen werden!



Teilchen auf einem Kreis

The operator $H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}$ on the interval $[0, 2\pi]$ with periodic boundary conditions

$$\psi(0) = \psi(2\pi), \quad \psi'(0) = \psi'(2\pi)$$

has the eigenvalues

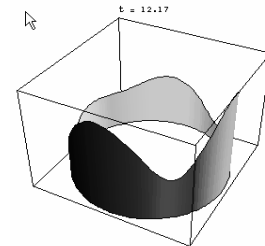
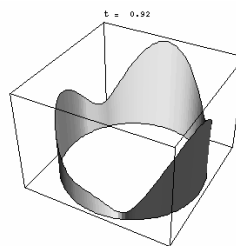
$$E_n = \frac{n^2}{2}$$

and the eigenfunctions

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-in x)$$

for $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

VQM 4.12, 5.1, 5.18



The movie shows the superposition of the eigenstate

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_2(x) + \psi_{-2}(x))$$

which has energy $E_2 = 2$ and of the eigenstate $\psi_1(x)$ with energy $E_1 = 1/2$. The time evolution is given by

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi(x) e^{2it} + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) e^{i t/2}$$

This state is periodic in time with period $T = 4\pi$.



Energiequantelung beim Wasserstoffatom

Andere Schreibweise: $E = -\frac{\mu e^4 \cdot Z^2}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -Ry^* \cdot \frac{Z^2}{n^2}$

Mit $Ry^* = Ry \cdot h \cdot c = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^2}$

n=Hauptquantenzahl

Energie des Elektrons nimmt nur diskrete Werte $E(n)$ an!

Durch Quantenzahlen $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ festgelegt

Stationärer Zustand - Quantenzustand des Atoms!

Quantenzahl gibt Zahl der Perioden der de Broglie Welle auf Kreisumfang an.

Man beachte:

Rydbergkonstante $Ry_\infty = 109737,31534 \text{ cm}^{-1}$ ($m_K = \infty; \mu = m_e$)

Rydbergkonstante für reale m_K : $Ry = Ry_\infty \cdot \mu/m_e$



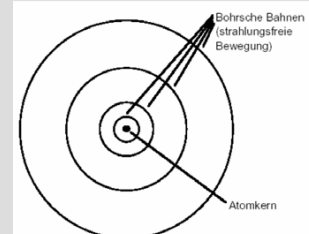
Erklärung der Spektren im Bohrschen Modell

Bohrsches Atommodell nimmt Quantenbedingung für klassische Bewegung des punktförmigen Elektrons im Coulombfeld an.

Quantenbedingung mit Drehimpuls:

Aus $(v = n \cdot \frac{h}{2\pi\mu r}) \cdot \mu \cdot r \rightarrow \mu \cdot r \cdot v = |\vec{L}| = n \cdot h$

Drehimpuls ist quantisiert!



Erklärung des Linienspektrums im Bohrschen Atommodell:

Absorption eines Lichtquants $h\nu \rightarrow$ Atom geht von E_i in E_k

$$h\nu = E_k - E_i$$

bzw.:

$$\nu = \frac{Ry^*}{h} Z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_k^2} \right)$$

Für $\bar{\nu} = \nu/c$ und $Z = 1$ mit $Ry^* = Ry \cdot h \cdot c$ Balmerformel.

Emission eines Lichtquants geht Atom v. höheren in niederen Energiezustand gemäß $h\nu = E_k - E_i$ über.



Zusammenfassung Bohrsches Planetenmodell

Bohrsche Modell erklärt experimentelle Spektren gut, ABER dieses "Planetenmodell" erklärt nicht warum Elektron keine Synchrotronstrahlung abstrahlt, d.h. warum Elektron nicht durch eine Spiralbewegung in den Kern fällt.

Antwort:

Elektronen nicht auf Bahnen, sondern AW durch SG bestimmt (inkl. Unsicherheit durch Unschärferelation).



Stabilität der Atome

a.....mittlere Radius Wasserstoffatom

Abstand r Elektron von Kern: $\Delta r \leq a \rightarrow$ Elektron innerhalb des Atoms.

Unbestimmtheit des Impulses: $\Delta p_r > \hbar/a$

Mittlere kinetische Energie d. Elektrons: $E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2ma^2}$

Potentielle Energie im Abstand a : $E_{pot} = -e^2/(4\pi\epsilon_0 a)$

Gesamtenergie: $E = E_{kin} + E_{pot} \rightarrow E > \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a}$

Größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei a_{Min} - dort ist $dE/da=0$

$$a_{Min} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2} = a_0 \quad \text{"Bohrsche Radius"}$$

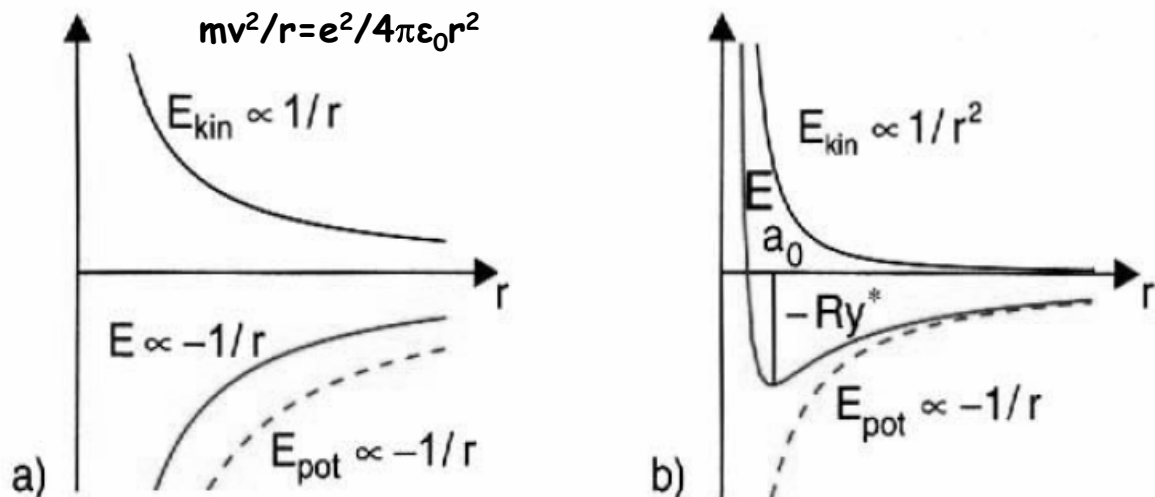
Stabiler Zustand (minimale Energie) f. H-Atom (**Heisenberg!**):

$$E_{min} = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} = -Ry^*$$

Stimmt f. Grundzustand mit Experiment überein.



Stabilität der Atome



Verlauf von kinetischer, potentieller und Gesamtenergie des Elektrons im Coulombfeld des Kerns als Funktion des Abstandes r zwischen Elektron und Kern: (a) klassisch, (b) quantenmechanisches Modell



Zusammenfassung Bohrscher Atommodell

Elektron bew. sich auf Kreisbahnen um Kern.

Radien gequantelt - nehmen quadratisch mit Quantenzahl n zu.

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0 = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi \mu Z e^2}$$

Radien verkehrt prop zu Kernladung $Z \cdot e$

Vorsicht:

Drehimpuls im Bohrschen Modell schlicht FALSCH, weil Elektron sich nicht auf "Bahnen" bewegt, sondern die AW sich aus SG ergibt

Zu Quantenbahn charakterisiert durch Quantenzahl n - def. negative Gesamtenergie

$$E = -Ry^* \cdot \frac{Z^2}{n^2} \text{ bzw. } E_{pot} = 2E \text{ und } E_{kin} = -E$$

Als Energienullpunkt gewählt Ionisierungsgrenze ($n \rightarrow \infty$), ($r \rightarrow \infty$)

Absorption von Licht mit Frequenz ν mit $h\nu = E_k - E_i$ von E_i in E_k bei Emission von E_k in E_i .



Anregungen der Atome

Es ist allgemein üblich, den energetisch niedrigsten Zustand eines Atoms als *Grundzustand* E_0 zu bezeichnen. Die bei der Anregung aufgenommene Energie nennen wir *Anregungsenergie*. Die Anregungsenergie kann auf verschiedene Arten zugeführt werden:

- *optische Anregung*: Anregung durch Licht im infraroten, sichtbaren und ultravioletten Spektralbereich.
- *mechanische Anregung*: Anregung durch Stöße mit Elektronen.
- *thermische Anregung*: Anregung durch Stoßprozesse zwischen den Atomen aufgrund ihrer thermischen Bewegung.

Die thermische Anregung von Atomen ist bei Raumtemperatur sehr ineffektiv, da die mittlere thermische Energie der Atome hier nur $\frac{3}{2}k_B T \simeq 38 \text{ meV}$ beträgt, während die typischen Anregungsenergien der Atome im eV-Bereich liegen. Bei sehr hohen Temperaturen, wie sie z.B. in den Atmosphären von Fixsternen wie unserer Sonne vorzufinden sind, können dagegen thermische Anregungsprozesse dominieren.



Zum Mitnehmen

Quantisierung der Energien der Atome aus Spektrallinien und Franck-Hertz Versuch

Bohrsche Atommodell erklärt Quantisierung der Spektren durch Quantisierung der Drehimpulse. Spektrallinien sind Übergänge zwischen den Energieniveaus.

Erklärt jedoch nicht die Stabilität der Atome, da im Planetenmodell die Bahnen durch Strahlung instabil sind.

QM erklärt Stabilität aus Randbedingung stehender Wellen und Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen kombiniert mit Unschärferelation zwischen Ort und Impuls



Vorlesung 10:

Roter Faden:

Der harmonische Oszillator Der Drehimpuls

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: <http://www.wmi.badw-muenchen.de/E23/lehre/skript/>

Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

1



Energiewerte, Wellenfkt. und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in einem rechteckigen Potentialtopf

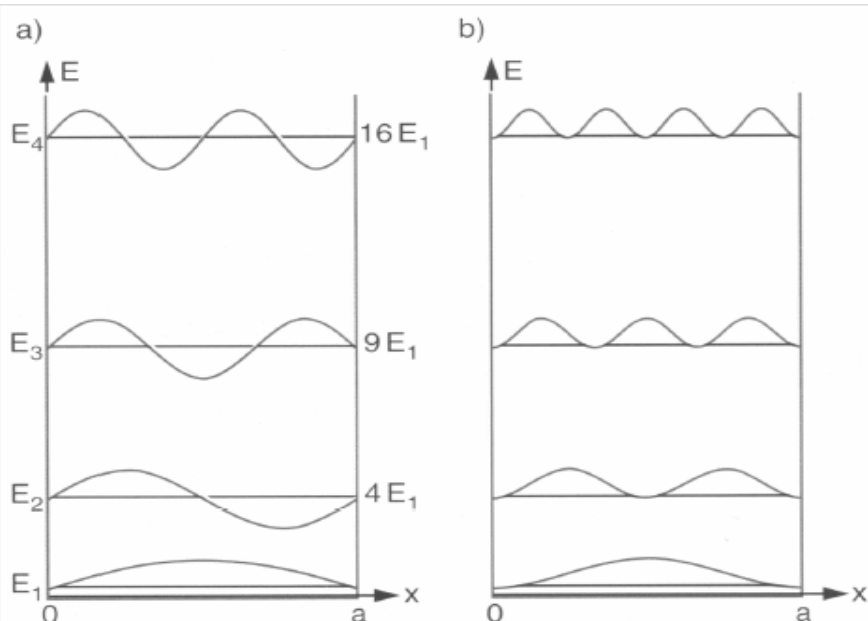


Abb. 4.16a,b. Energieeigenwerte eines Teilchens im unendlich hohen eindimensionalen Potentialkasten. (a) Wellenfunktionen, (b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W(E, x) dx = |\psi(x)|^2 dx$ des Teilchens

Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



Lösung der SG mit beliebigen Potentialen (bisher eindimensionales Rechteckpotential)

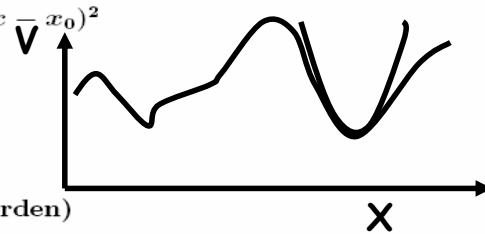
Das Potential um das Minimum x_0 kann wie jedes Polynom als Taylorsche Reihe entwickelt werden:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

$$V' = \frac{dV}{dx} \quad V'' = \frac{d^2V}{dx^2}$$

Im Minimum:

- $V' \equiv 0$
- $V(x_0) = \text{konstant}$ (darf subtrahiert werden)
- $V_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$



Dies ist das Potential eines harmonischen Oszillators ($V \propto x^2$!)

$$V = \int_0^x F dx = -\frac{1}{2}kx^2(1) ; V < 0 \rightarrow \text{anziehend}$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \rightarrow$$

$$\text{DGL: } m\ddot{x} = -kx \quad (2)$$

$$\text{Lösungsansatz: } x = A \cos \omega t \quad (3)$$

$$(3) \text{ in } (2) : -mA\omega \cos \omega t = -kA \cos \omega t \Rightarrow$$

$$V = -\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \rightarrow x = A_0 \cos \sqrt{\frac{k}{m}} t$$

KM

QM

QM : statt $F = ma$ jetzt: SG

$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0}{2} \omega^2 x^2(1), \text{ wobei } \hat{H} = \text{Hamiltonoperator}$$

Erwarte wieder diskrete Energieniveaus, wie beim Rechteckpotential!



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

2 LÖSUNGSARTEN: für $V = cx^2$

1. algebraisch via Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (oder Auf- und Absteigeoperatoren)

2. analytisch (wie vorher beim Rechteckpotential)

Hier: nur 1. (Notation Griffiths)

$$\text{SG : } \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \Psi = E \Psi(2)$$

$$\text{oder } (a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar \omega) \varphi = E \varphi \quad (6)$$

$$\langle u^2 + v^2 = (u + iv)(u - iv) \rangle$$

$$\text{so auch : } a_+ a_- = \hat{H} - \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (7)$$

Definition der Auf- und Absteigeoperatoren:

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \pm im\omega x \right) \quad (3)$$

$$\text{Aus (5) + (7) : } a_- a_+ - a_+ a_- \equiv [a_- a_+]$$

Was ist $a_- a_+ f(x)$?

$$a_- a_+ f = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} + im\omega x f \right)$$

Der Kommutator $[a_-, a_+] = \hbar \omega \neq 0$, d.h. Ψ nicht gleichzeitig Eigenfkt. von a_- und a_+ .

$$= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar m \omega \frac{df(x)}{dx} - \hbar m \omega x \frac{df}{dx} + (m\omega x)^2 f \right]$$

$$= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 + \hbar m \omega \right] f \quad (4)$$

$$\text{d.h. } a_- a_+ = \hat{H} + \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (5)$$



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

1. springender Punkt:

Wenn φ eine Lösung der SG $\hat{H}\varphi = E\varphi$ ist (1), dann gilt (2) : $\hat{H}a_+\varphi = (E + \hbar\omega)a_+\varphi$.

Dies ist wieder eine SG mit Wellenfunktion $a_+\varphi$ und Energie $E = \hbar\omega$

D.h. statt die kontinuierlichen Lösungen der KM für den harmonischen Oszillator hat man jetzt diskrete Lösungen mit Energien $E = n\hbar\omega$ ($n = 1$



Beweis für (2): es gilt : $\hat{H}\varphi = E\varphi, \hat{H} \equiv a_-a_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega \rightarrow$ und $\hat{H} \equiv a_+a_- - \frac{1}{2}\hbar\omega$

Wir berechnen :

$$\hat{H} a_+\varphi = (a_+a_- + \frac{1}{2}\hbar\omega)a_+\varphi = a_+a_-a_+\varphi + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\varphi =$$

$$= a_+(E + \frac{1}{2}\hbar\omega)\varphi + \frac{1}{2}\hbar\omega a_+\varphi = (E + \hbar\omega)a_+\varphi$$

So auch:

$$\hat{H} a_-\varphi = (E - \hbar\omega)a_-\varphi$$

d.h. a_- erniedrigt die Energie um $\hbar\omega$ (Absteigeoperator)

und a_+ erhöht die Energie um $\hbar\omega$ (Aufsteigeoperator)

Energieniveaus von $\hbar\omega$ ist gerade das, was man braucht um diskrete Energieniveaus eines harm. Osz. zu beschreiben.



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

Daraus folgt: Durch Verschiebungsoperatoren kann ich ∞ viele Lösungen der SG finden.

Jede Eigenfunktion hat ihre eigene Energie.

2.Springender Punkt: $E > 0$ [$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$], d.h. es muss eine niedrigste Stufe der Energie geben,

für die gilt: $a_-\varphi_0 = 0$ oder $\frac{1}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi_0}{dx} - im\omega x \varphi_0 \right] = 0 \rightarrow$

$$\rightarrow \int \frac{d\varphi_0}{\varphi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \rightarrow \ln \varphi_0 = -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} + c \rightarrow$$

$$\rightarrow \varphi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

Welche Energie E_0 gehört zu φ_0 ?

$$SG : \hat{H}\varphi_0 \equiv (a_-a_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega_0)\varphi_0 \equiv E_0\varphi_0$$

Da $a_-\varphi_0 = 0$ muss gelten : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \leftarrow \text{Nullpunktsenergie}$

Da die Wellenfunktion der niedrigsten Energiestufe jetzt bekannt ist, können alle weitere Energiefunktionen durch Anwendung der Aufsteigeoperatoren berechnet werden:

$$\varphi_0 = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\varphi_1 = a_1\varphi_0 = A_0 \frac{1}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) =$$

$$= \frac{A_0}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \left(-\frac{m\omega x}{\hbar} \right) + im\omega x \right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) = iA_1\omega\sqrt{2m}x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

$$\rightarrow E_1 = E_0 + \hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \varphi_2 = a_+\varphi_1 \rightarrow E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \text{ usw.}$$



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

Inklusive Normierung: $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$ gilt:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

mit $H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n \exp(-\xi^2)}{d\xi^n}$ (Hermite'sche Polynome)

z.B.: $H_0 = 1$, $H_1 = 2\xi$, $H_2 = 4\xi^2 - 2$, $H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$,

$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$,

$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi + \dots$,

$H_{n+1}(x) = 2\xi H_n(x) - 2n H_{n-1}(x)$

(Rodrigues-Gleichung)

$\rightarrow \varphi_0 \rightarrow$ Gausskurve

$\varphi_1 \rightarrow \varphi_0 2x$

$\varphi_2 \rightarrow \varphi_0 (4x^2 - 2)$

Rechts: 2 Plots zusammengefügt:

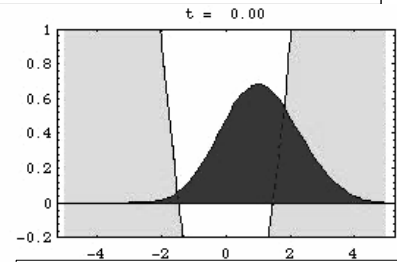
a) die Amplitudenfkt.

des harm. Osz. für $n=0,1,2\dots,5$

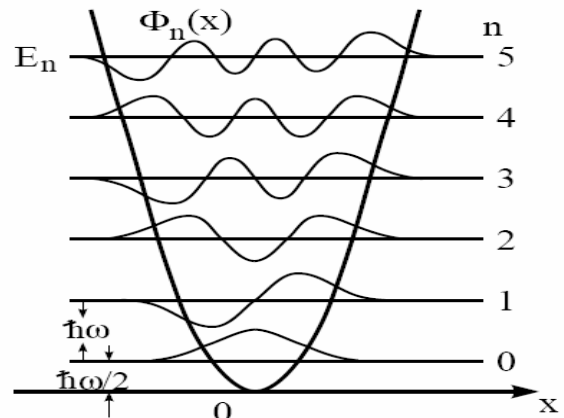
aufgetragen gegen Auslenkung

x bei der jeweiligen Energie E_n

b) das Potential als Fkt. von x



$x=0$ mit $E=0$ verboten
nach Unsicherheitsrel. $\rightarrow$
Nullpunktschwingungen



Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

7



Berechnung der AW beim klassischen Oszillator

Wahrscheinlichkeit, dass Kugel sich am Position x aufhält: $P(x) = k \frac{dt}{dx} = \frac{k}{v}$ (1).

Betrachte Energie und verlange gleiche Energie wie in der QM (Korrespondenzprinzip):

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \equiv (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\rightarrow v = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar\omega - m\omega^2 x^2}{m}} \equiv \sqrt{\frac{2}{m}} \quad (2)$$

$$(2) \text{ in } (1): P(x) = k \sqrt{\frac{m}{2}} \quad (3)$$

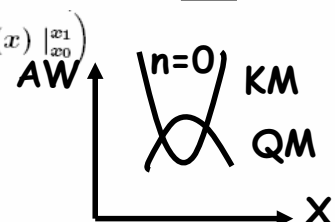
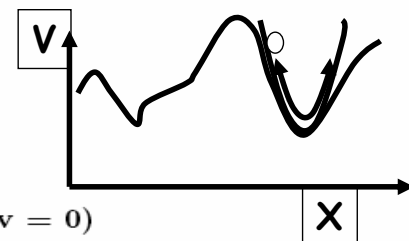
$$k \text{ aus Normierung: } \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} P(x) dx = 1 \quad (4)$$

$$\text{mit } x_{\min} = 0; x_{\max} = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} \text{ (aus (2) mit } v = 0)$$

$$\text{Aus (3) + (4): } k = \frac{\omega}{\pi} \quad (5) \quad \left(\text{benutze: } \int_{x_0}^{x_1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} = \arcsin(x) \Big|_{x_0}^{x_1} \right)$$

$$(5) \text{ in } (3): P(x) = \frac{\omega\sqrt{m}}{\sqrt{(2n+1)\hbar\omega - m\omega^2 x^2}}$$

Dies entspricht klassische AW mit $E = (n+1/2)\hbar\omega$.



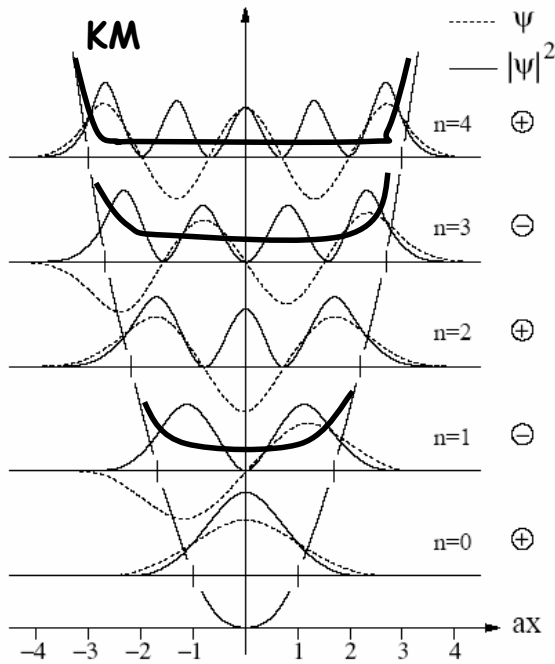
Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

8



Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators



$$n = 2$$

$$\psi_2(x) \propto (4a^2x^2 - 2)e^{-(1/2)a^2x^2}$$

$$n = 1$$

$$\psi_1(x) \propto (2ax)e^{-(1/2)a^2x^2}$$

$$n = 0$$

$$\psi_0(x) \propto e^{-(1/2)a^2x^2}$$

Nullpunkts-“Schwingung”

ψ_0 und $|\psi_0|^2$ Gauß-Funktionen
zentriert bei $x = 0$

**Paritätsoperator = Spiegelung gegen Ursprung ($x \rightarrow -x$).
Eigenwert + oder -1, hier $(-1)^n$**

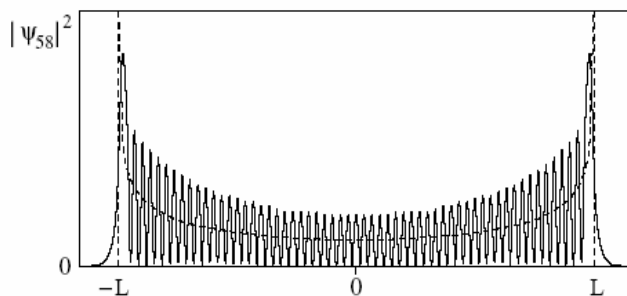


Lösung der SG mit Potential eines harmonischen Oszillators

Beachte folgende Eigenschaften der $\psi_n(x)$:

- 1) Alle Wellenfunktionen sind $\neq 0$ *außerhalb* des klassisch erlaubten Bereichs ($V(x) > E_n$, im Bild auf der jeweiligen Achse markiert)
 $\Rightarrow$ Exponentiell abklingendes Eindringen in den klassisch verbotenen Bereich (Tunneleffekt)
- 2) Wellenfunktionen haben definierte “Parität” (die beim H-Atom erwähnten $\Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$ ebenfalls, dort aber nicht diskutiert): bei Spiegelung am Ursprung ($x \rightarrow -x$) kein Vorzeichenwechsel für gerade n (+), Vorzeichenwechsel für ungerade n (-).
- 3) Asymptotisches Verhalten für $n \gg 1$

$$n = 58$$



$$(n + 1) \text{ Maxima für } |\psi_n|^2$$

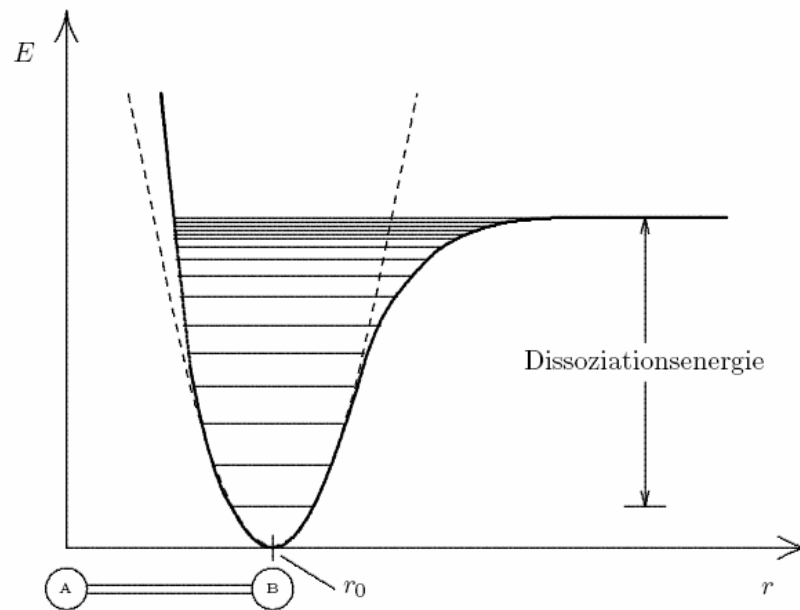
Hauptmaxima außen: Oszillation um die *klassisch* zu erwartende Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines schwingenden Systems (maximal an den Umkehrpunkten $x = \pm L$)

$\Rightarrow$ *Bohrsches Korrespondenzprinzip*:
Übergang zur klassischen Physik im Grenzfall sehr hoher Quantenzahlen



Der anharmonische Oszillator

Beispiel für Abweichung eines harm. Osz.: Energieniveaus eines zweiatomiges Molekül mit "Morse-potential" mit Dissoziation ab einem bestimmten Distanz und Energie



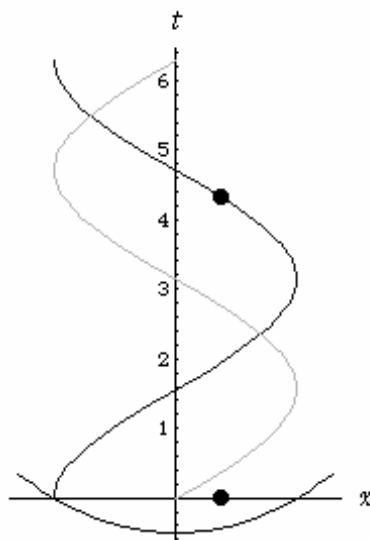
Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



Der klassische harmonische Oszillator



The state of a classical harmonic oscillator is determined by Newton's equation of motion:

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) = -x(t)$$

(assuming that the mass of the particle is equal to 1). The solution is

$$x(t) = a \sin(t - b), \quad (\text{position, blue curve})$$

$$\dot{x}(t) = a \cos(t - b), \quad (\text{velocity, green curve})$$

The constants a and b have to be determined from the initial conditions

$$x(0) = x_0 \quad \text{and} \quad \dot{x}(0) = p_0.$$

Here they are given by

$$a = 1, \quad b = -\pi/2.$$

5.1. Classical motion of the harmonic oscillator

Technical Note

Page 2 of 3

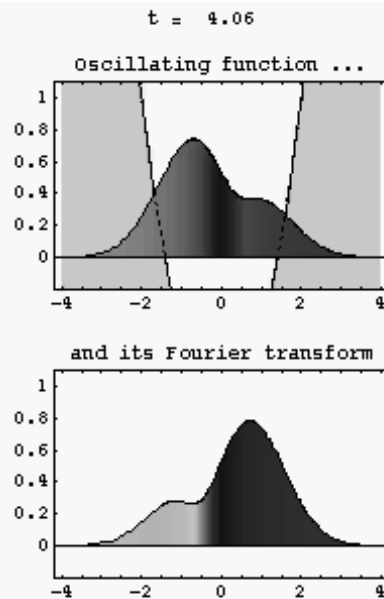
Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Bewegung im Impulsraum



A harmonic oscillator eigenfunction ϕ_n is related to its Fourier transform $\hat{\phi}_n$ by

$$\hat{\phi}_n(k) = (-i)^n \phi_n(k).$$

For the time evolution of an arbitrary state in the field of a harmonic oscillator we have

$$\psi(x, t + \pi/2) = e^{-i\pi/4} \hat{\psi}(k, t).$$

Up to a phase factor, the wave function in momentum space at time t looks like the wave function in position space at time $t + \pi/2$. An analogous relation holds between momentum and position of a classical harmonic oscillator.

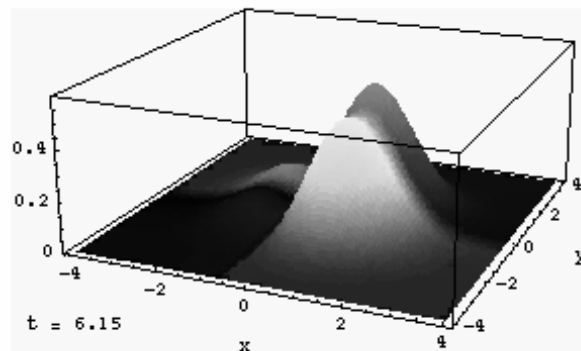
5.3. Oscillating state "0+1" 3: Momentum space

Technical Note

Page 1 of 1



Bewegung im Phasenraum



For any solution $\psi(x, t)$ of the harmonic oscillator, the Fourier transform $\hat{\psi}(k, t)$ is a solution of the same equation:

$$i \frac{d}{dt} \hat{\psi}(k, t) = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dk^2} + k^2 \right) \hat{\psi}(k, t).$$

Hence the product

$$f(x, k, t) = \psi(x, t) \hat{\psi}(k, t)$$

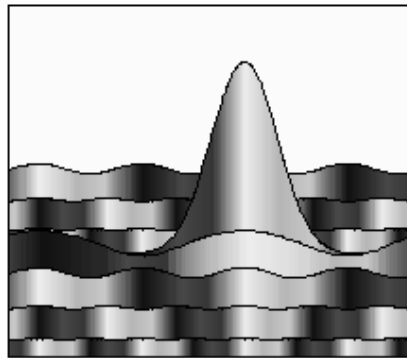
is a solution of the two-dimensional oscillator equation which reads (after the variable substitution $k \rightarrow y$)

$$i \frac{d}{dt} f(x, y, t) = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{dy^2} + (x^2 + y^2) \right) f(x, y, t).$$

5.3. Oscillating state "0+1" 4: Wave function in phase space

Technical Note

Page 1 of 1



2.1. Trigonometric sums

3: Complex Gaussian function

Approximation of a complex-valued periodic function by a Fourier sum:

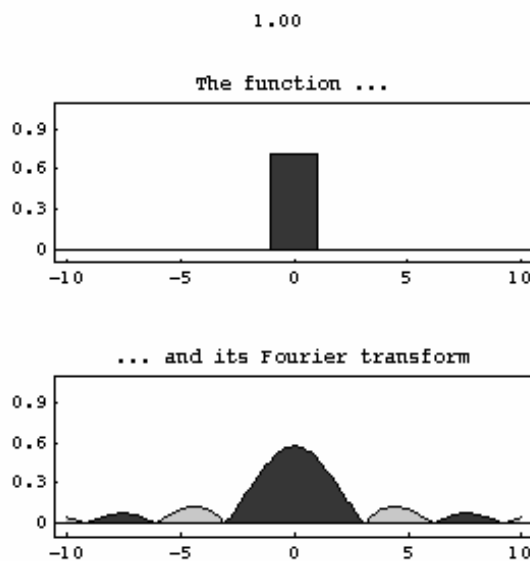
The summand of order n in the Fourier series of a real-valued periodic function is of the form $\cos(nx + b)$, which can be written as a linear combination of the exponential functions $\exp(inx/2)$ and $\exp(-inx/2)$.

In the Fourier series of a **complex-valued** function the summand of order n is a more general linear combination of these exponential functions. This time the summand of order n may be complex-valued.

Click "More" if you are ready to continue.

Topics:

- 1: Approximation of a Gaussian
- 2: Sum of $\exp(ix)$ and $\exp(-ix)$
- 3: Complex Gaussian function
- 4: The Fourier-coefficients



The step function is given by

$$f(x, L) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \begin{cases} 1, & \text{for } |x| < L, \\ 0, & \text{for } |x| \geq L. \end{cases}$$

The Fourier transform is

$$\begin{aligned} \hat{f}(k, L) &= \frac{1}{\sqrt{2L}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L}^L e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi L}} \frac{\sin(kL)}{k}. \end{aligned}$$

2.11. Step function

1: Fourier transform and scaling



Der Drehimpuls

Im kugelsymmetrischen Coulombpotential gibt es nur radiale Kräfte, d.h. keine Drehmomente auf das Elektron im H-Atom! Daher erwarte ich Drehimpulserhaltung im Falle der Kugelsymmetrie und Wellenfkt. sollte Eigenfkt. des Drehimpulsoperators sein. Bei mehreren Elektronen wird Kugelsymmetrie aufgehoben -> kleine Störungen -> können nur numerisch berechnet werden.
Hier nur Einelektron-Atome.

Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen des Operators $\hat{L}^2$

Drehimpuls ist quantisiert: $|L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$

l ...Drehimpulsquantenzahl



Hamiltonoperator für kugelsymmetrisches Potential

Wir betrachten nochmals den Hamilton-Operator wie er zum Beispiel bei der Diskussion des Wasserstoff-Problems auftrat. Es ist

$$\hat{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \hat{T}(\vec{p}) + V(\vec{r}) \quad (573)$$

mit

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \quad (574)$$

Wir stellen den Laplace-Operator $\Delta = \vec{\nabla}^2$ in Kugelkoordinaten dar. Es ist

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\nabla_{\vartheta, \varphi}^2}{r^2} \quad (575)$$

Mit

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad (576)$$

und dem Quadrat des Bahndrehimpulsoperators können wir den Operator der kinetischen Energie schreiben als

$$\hat{T} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2m r^2} \quad (577)$$



Vertauschungsrelationen

Wir wollen nun die Vertauschungsrelation für die Komponenten des Drehimpulses ermitteln. Wir berechnen den Kommutator

$$\hat{G} = \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y \quad . \quad (542)$$

Hierzu betrachten wir zunächst den Operator $\hat{L}_y \hat{L}_z$,

$$\begin{aligned} \hat{L}_y \hat{L}_z &= (\hat{p}_z x - \hat{p}_x z) (\hat{p}_x y - \hat{p}_y x) \\ &= \hat{p}_z x \hat{p}_x y - \hat{p}_x z \hat{p}_x y - \hat{p}_z x \hat{p}_y x + \hat{p}_x z \hat{p}_y x \\ &= y \hat{p}_z x \hat{p}_x - z y \hat{p}_x^2 - x^2 \hat{p}_z \hat{p}_y + z \hat{p}_y \hat{p}_x x \quad . \end{aligned} \quad (543)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y &= i\hbar \hat{L}_x \quad , \\ \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z &= i\hbar \hat{L}_y \quad , \\ \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= i\hbar \hat{L}_z \quad . \end{aligned}$$

Kurzform:

$$\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$$

In ähnlicher Weise erhalten wir durch explizites Ausrechnen

$$\hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{p}_z \hat{p}_x x - z y \hat{p}_x^2 - x^2 \hat{p}_z \hat{p}_y + z \hat{p}_y \hat{p}_x x \quad . \quad (544)$$

Wir subtrahieren jetzt (544) von (543) und finden

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{p}_z (x \hat{p}_x - \hat{p}_x x) + z \hat{p}_y (\hat{p}_x x - x \hat{p}_x) \quad . \quad (545)$$

Unter Verwendung der obigen Vertauschungsrelationen zwischen Ort und Impuls bekommen wir

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar (y \hat{p}_z - \hat{p}_y z) = i\hbar \hat{L}_x \quad (546)$$



Vertauschungsrelationen

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{L} = \vec{r} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

$$L_z = x p_y - y p_x \rightarrow \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \\ [\hat{L}^2, \hat{L}_i] &= 0, \quad i=x,y,z \end{aligned}$$

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

Gesamtdrehimpuls und eine der Komponenten nur gleichzeitig zu bestimmen.

Gesamtdrehimpuls und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Z-Komponente des Drehimpulses und Energie gleichzeitig zu bestimmen.

Eigenfunktionsgleichungen:

$$\hat{H} \Psi = E(\Psi) \quad (1)$$

$$\hat{L}^2 F(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 F(\theta, \varphi) \quad (2)$$

$$\hat{L}_z F(\theta, \varphi) = m\hbar F(\theta, \varphi) \quad (3)$$



Drehimpuls in der QM

Während also in der klassischen Mechanik der Drehimpuls eines Teilchen, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential bewegt, nach Betrag und Richtung zeitlich konstant ist, sagt die QM, dass zwar der Betrag des Drehimpulses zeitlich konstant ist, dass aber von seinen drei Komponenten nur eine einen zeitlich konstanten Messwert besitzt! Dies kann man auffassen als eine Präzession des Drehimpulses um die Achse mit dem konstanten Messwert.



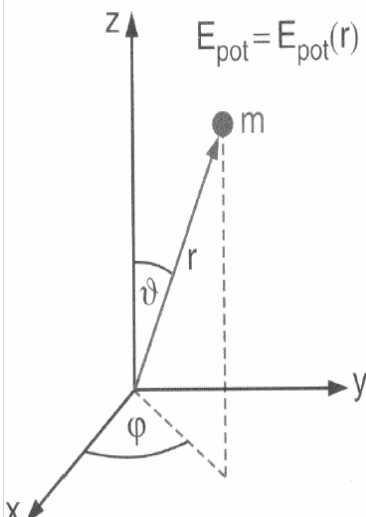
Mathematisches Intermezzo

Kartesische Koordinaten:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \text{Laplace-Operator}$$

Kugelkoord.:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2m_0 r^2} \hat{l}^2 + V(r, \theta, \varphi)$$



$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$\varphi = \arctan \frac{y}{x}$$

Betrachte ein Längenelement ds :

$$\rightarrow ds = x \hat{u}_x + y \hat{u}_y + z \hat{u}_z \quad \text{Einheitsvektoren: } \hat{u}_x, \hat{u}_y, \hat{u}_z$$

$$\rightarrow (r \sin \theta \cos \varphi) \hat{u}_x + (r \sin \theta \sin \varphi) \hat{u}_y + (r \cos \theta) \hat{u}_z$$

$$ds_r = dr \quad ds_\theta = r d\theta \quad ds_\varphi = r \sin \theta d\varphi$$



Mathematisches Intermezzo

Gradient einer Funktion f : $\nabla f \equiv \frac{1}{\left|\frac{\partial s_r}{\partial r}\right|} \frac{\partial f}{\partial r} \hat{u}_r + \frac{1}{\left|\frac{\partial s_\theta}{\partial \theta}\right|} \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{u}_\theta + \frac{1}{\left|\frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi}\right|} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \hat{u}_\varphi$

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{u}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{u}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \hat{u}_\varphi \quad (2)$$

Divergenz einer Funktion F :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} \equiv \frac{1}{\left|\frac{\partial s_r}{\partial r}\right| \left|\frac{\partial s_\theta}{\partial \theta}\right| \left|\frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi}\right|} \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{\partial F_r}{\partial r} \left| \frac{\partial s_\theta}{\partial \theta} \right| \left| \frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi} \right| + \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \left| \frac{\partial s_\varphi}{\partial \varphi} \right| \left| \frac{\partial s_r}{\partial r} \right| + \frac{\partial F_\varphi}{\partial \varphi} \left| \frac{\partial s_r}{\partial r} \right| \left| \frac{\partial s_\theta}{\partial \theta} \right| \right] \quad (3)$$



Mathematisches Intermezzo

(2) in (3) :

$$\begin{aligned} \nabla^2 f &= \nabla \cdot \nabla f = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^2 \sin \theta \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{r \sin \theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{r}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

oder:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}$$

wobei $\hat{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = \text{Drehimpuls}^2$ und der dazugehörige Operator $\hat{l}^2$:

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

D.h. die Winkelabhängigkeit des Laplace-Operators wird durch den Drehimpuls bestimmt.



Drehimpulsoperator von kartesischen Koor. in Kugelkoordinaten umwandeln

Für Funktion $f = f(r, \theta, \varphi)$ gilt:

$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial f}{\partial \varphi} d\varphi \text{ und demzufolge :}$$

$$(\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}) : \begin{aligned} \hat{l}_x &= i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{l}_y &= i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ \hat{l}_z &= i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \text{ oder } \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

wobei:

- $\frac{\partial r}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi$ (aus : $r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow 2r dr = 2x dx \rightarrow \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi$)
- $\left. \begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \text{ (aus : } \theta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \text{ und } \frac{d \arccos \alpha}{d\alpha} = -\frac{1}{\sqrt{1-\alpha^2}} \text{)} \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{xz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} \end{aligned} \right\}$
- $\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}$ (aus : $\varphi = \arctan \frac{y}{x}$)
- $\rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$



Drehimpulsoperator von kartesischen Koor. in Kugelkoordinaten umwandeln

Analog folgt:

$$\bullet \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Einsetzen in $\hat{l}_z$:

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

so auch:

$$\hat{l}_x = i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$\hat{l}_y = i\hbar \left[\cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$

womit für

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

folgt:

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



Stehende Wellen auf einem Kreis

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \quad \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Betrachte stehende Wellen auf einem Kreis.

Randbedingung: $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) = A e^{ikx} = A e^{im\varphi}$

$\Rightarrow m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (Quantisierung durch Randbedingung!)

Betrachte $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$\Phi(\varphi) = \hbar m \Phi(\varphi)$$

$\Rightarrow$ z-Wert des Drehimpulses ist quantisiert!

Wie groß ist Gesamtdrehimpuls, d.h. Erwartung von $\hat{l}^2$.



Eigenwert des Drehimpulses ist $\sqrt{l(l+1)}$

Warum ist der Eigenwert von $\hat{l}^2 = l(l+1)\hbar^2$ und nicht $l^2\hbar^2$?

Annahme: $\hat{l}^2 F(\theta, \varphi) = \omega^2 \hbar^2 F(\theta, \varphi)$

Zu beweisen: $\omega^2 = l(l+1)$ und l gerade

$$\begin{aligned} \hat{l}_- \hat{l}_+ F_{l,m} &\equiv (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) F_{l,m} \\ &= [\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + i\hat{l}_x \hat{l}_y - i\hat{l}_y \hat{l}_x] F_{l,m} \\ &= (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z) F_{l,m} \\ &= (\omega^2 \hbar^2 - m^2 \hbar^2 - m \hbar^2) F_{l,m} \quad (1) \end{aligned}$$

Setze $F_{l,m} = F_{l,m_{\max}} \equiv F_{l,l}$

Dann gilt: $\hat{l}_+ F_{l,m_{\max}} = 0$ oder damit aus (1) $\omega^2 = m_{\max}^2 - m_{\max} = 0$ oder (2)

$$\omega^2 = m_{\max}(m_{\max} + 1) = l(l+1)$$

Da L_z immer kleiner als L_{tot} muss gelten: $|m| \leq l$ und $l \geq 0, l = 0, 1, 2, 3$



Mögliche Werte von L_z für mehrere Werte von L_{tot}

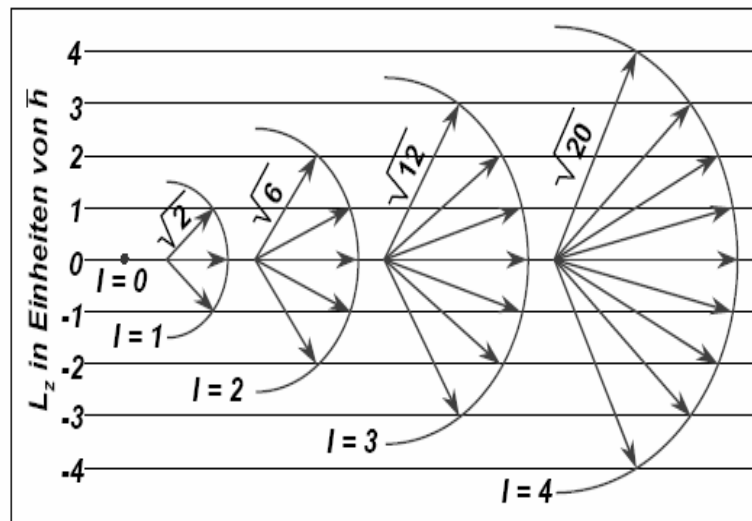
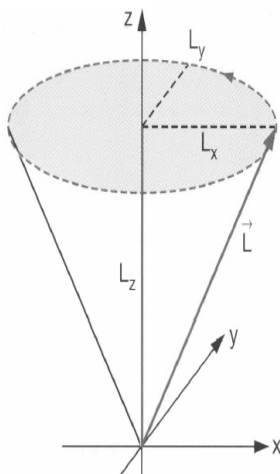


Abbildung 3.10: Mögliche Richtungen eines Drehimpulses mit definierter Komponente L_z und definiertem Betrag $|L|$ für verschiedene Bahndrehimpulsquantenzahlen l .

Da $|L| > L_z$ und L_x, L_y unbestimmt, liegt Vektor L auf Kegelmantel mit Öffnungswinkel $\cos\theta = |m|/\sqrt{l(l+1)}$



Zusammenfassung Drehimpuls

Klassische Mechanik: Drehimpuls in kugelsymmetrischen Potential nach Betrag und Richtung zeitlich konstant - alle drei Komponenten haben wohldefinierte Werte.

Quatenmechanische Beschreibung:

Betrag von L zeitlich konstant

$|L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$, aber von Komponenten hat nur L_z zeitlich konstanten Weßwert - anderen beiden Komponenten nicht gleichzeitig meßbar.

z-Richtung sei "Quantisierungsachse"

$\hat{L}^2 \cdot \Psi = l(l+1) \cdot \Psi$ und $\hat{L}_z \Psi = m\hbar \Psi \Rightarrow$ Quantisierung der Richtungseinstellung.



Räumliche Einstellung eines Drehimpulses

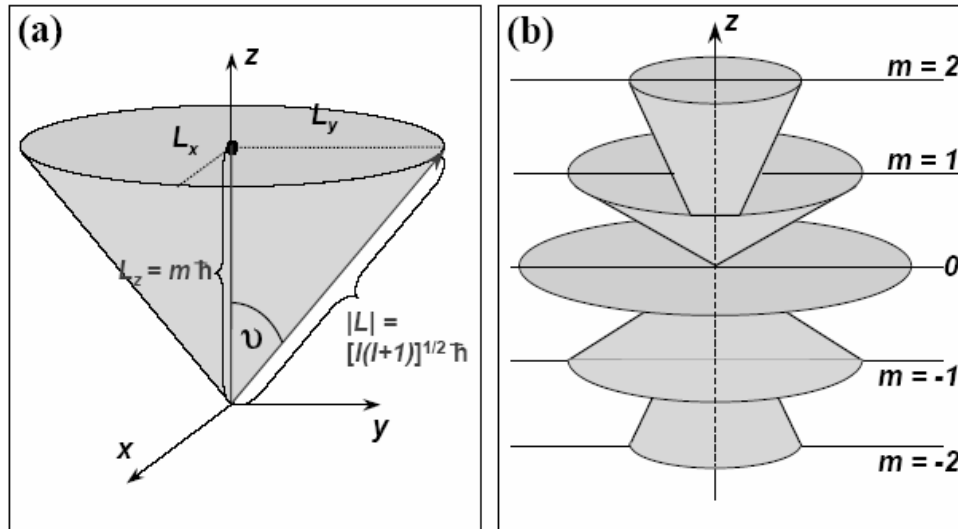


Abbildung 3.11: (a) Räumliche Einstellung eines Drehimpulses. (b) Einstellmöglichkeiten des Drehimpulses $\mathbf{L}$ mit der Quantenzahl $l = 2$. L_x und L_y sind unbestimmbar, nachdem $|L|$ und L_z festgelegt wurden und liegen auf Kegelmänteln.

Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators sind die Kugelflächenfunktionen. Für jedes Paar Quantenzahlen ℓ, m gibt es eine eigene Funktion $Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$

Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

31



Jede Funktion kann nach Kugelflächenfunktionen ("spherical harmonics") entwickelt werden

Description: The plane wave we are going to analyze is of the form $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ with wave vector $\mathbf{k} = (1, 2, 0)$. The image shows the values of an approximation in the xy -plane. If you click the button "View summand", you can see the individual summands in the approximation.

The expansion of a plane wave in spherical waves is given by the following formula:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \frac{1}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell, m}(\mathbf{k}) \hat{j}_{\ell}(kr) Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi),$$

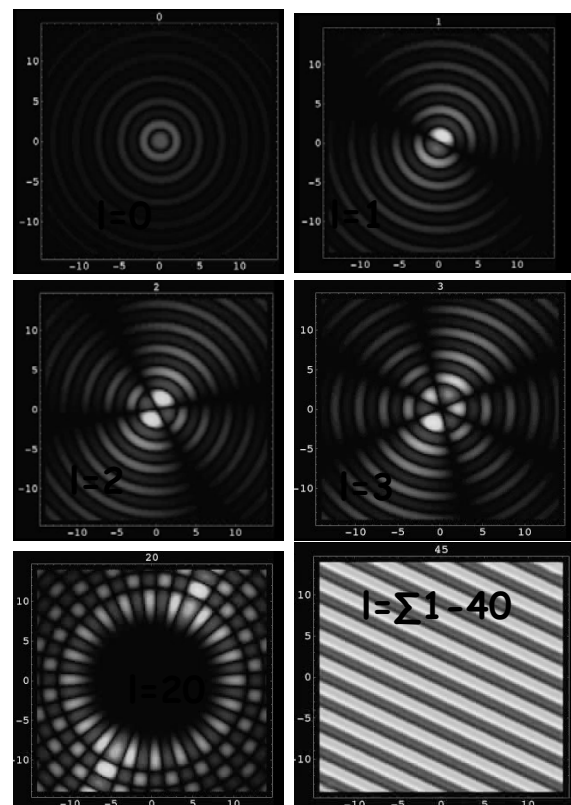
where (r, ϑ, φ) are the spherical coordinates of $\mathbf{x}$. The coefficients in this expansion are given by

$$c_{\ell, m}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi i^{\ell}}{k} Y_{\ell}^m(\vartheta', \varphi').$$

Here $(k, \vartheta', \varphi')$ are the spherical coordinates of $\mathbf{k}$.

In the visualization, the individual summands are the contributions with a fixed angular momentum ℓ , that is, the summand of order ℓ is given by

AVQM 1.16



Mai 17, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

32



Zusammenfassung

- Die Drehimpulskomponenten L_x , L_y und L_z von Quantenobjekten sind untereinander nicht verträgliche Observablen. Damit ist der Drehimpuls $\mathbf{L}$ nicht scharf messbar.
- Jede der Drehimpulskomponenten und der Betrag des Drehimpulses sind miteinander verträgliche Observablen und damit prinzipiell gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit messbar. Es gilt

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0 \quad i = 1, 2, 3.$$

- In kugelsymmetrischen Potenzialen sind jede Drehimpulskomponente und die Gesamtenergie des Quantenobjekts miteinander verträgliche Observable und damit gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit messbar. Es gilt:

$$[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0.$$

- Der Betrag $|\mathbf{L}|$ des Bahndrehimpulses eines Hüllenelektrons und seine z -Komponente sind gequantelt:

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$L_z = m\hbar \quad m = -l, -(l-1), \dots, +(l-1), +l.$$

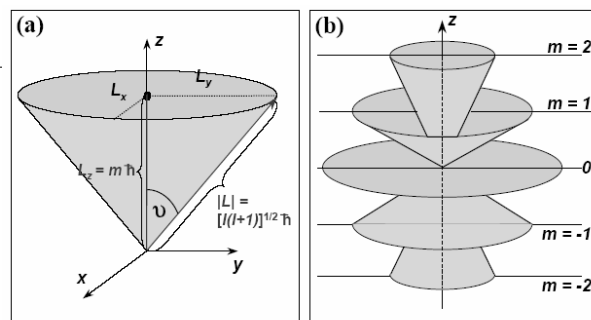


Zum Mitnehmen

Die Randbedingungen der SG führen zur Quantisierung der Energien

Ein beliebiges Potential kann im Minimum als quadratisches Potential angenähert werden (Taylor-Entwicklung). Dies entspricht das Potential eines harmonischen Oszillators, dessen Energien wieder quantisiert sind. Die Wellenfunktionen der einzelnen Energieniveaus können elegant mit Aufsteige- und Absteigeoperatoren bestimmt werden.

Drehimpulse sind quantisiert:





Vorlesung 11:

Roter Faden:

Lösung der SG für das H-Atom

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag



Das Wasserstoffatom

*Elektron in kugelsymmetrischen Coulombfeld des Kerns
Schrödingergl. exakt lösbar.*

Sonst existiert nur numerische Lösung

Aber: Spektren d. H-Atoms zeigen **Feinstruktur** - diese kann mit Schrödingergl. vorerst nicht beschrieben werden.

In relativistischer Theorie jedoch beschreibbar.

Ziel: alle wesentlichen möglichen Phänomene an Hand
Einelektronensystem behandeln.



Atom mit kugelsymmetrischem Potential

Kugelsymmetrisches Potential: $E_{\text{pot}} = f(r)$

Übergang . kartesischen Koordinaten (x,y,z) auf Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ) - siehe Abb.

Es gelten folgende Transformationsgleichungen.

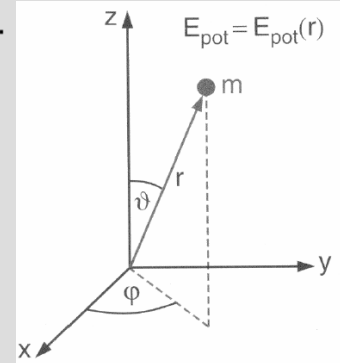
$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi \quad \Rightarrow \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi \quad \Rightarrow \quad \vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

$$z = r \cos \vartheta \quad \Rightarrow \quad \varphi = \arctan(y/x)$$

Differentiation im Δ -Operator $\Rightarrow$

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



Der Drehimpuls

Im kugelsymmetrischen Coulombpotential gibt es nur radiale Kräfte, d.h. keine Drehmomente auf das Elektron im H-Atom! Daher erwarte ich Drehimpulserhaltung im Falle der Kugelsymmetrie und Wellenfkt. sollte Eigenfkt. des Drehimpulsoperators sein. Bei mehreren Elektronen wird Kugelsymmetrie aufgehoben -> kleine Störungen -> können nur numerisch berechnet werden.

Hier nur Einelektronatome.

Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen des Operators $\hat{L}^2$

Drehimpuls ist quantisiert: $|L| = \sqrt{l(l+1)} \cdot h$

l ...Drehimpulsquantenzahl



3-D Schrödingergleichung in Kugelkoor.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + E_{pot}\Psi = E\Psi \quad \text{mit} \quad \Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

Schrödingergleichung in Kugelkoordinaten

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial\Psi}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))\Psi = 0$$

Lösung mit Produktansatz: $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta) \cdot \Phi(\varphi)$

Erwarte als Lösungen:

- 1) Mit ∞ viele Energieniveaus, die nur von r abhängen, d.h. ∞ viele Energieeigenfunktionen, erwarte ich Polynom in r mit ∞ vielen Termen, da die Zustandsfkt. Linearkombinationen der Eigenfkt. sind.
- 2) Da die Energien nur von r abhängen, erwarte ich, dass die Winkelabhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Raum auf der Fläche eines Einheitskugels abgebildet werden kann. Dies ergibt für $\Theta(\vartheta)$ $\Phi(\varphi)$ die berühmte Kugelflächenfkt, die Eigenfkt. des Drehimpulsoperators sind. Da das Elektron eine stehende Welle bildet, erwarten wir für $\Phi(\varphi) = C e^{im\varphi}$.



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Einsetzen in Schrödingergl. in Kugelkoordinaten

$$\frac{\sin^2\vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin\vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) r^2 \sin\vartheta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}$$

Linke Seite hängt nur von r und ϑ ab, rechte nur von φ
Gleichung muß für ALLE Werte von r, ϑ, φ gelten $\Rightarrow$

Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten C_1 sein $\Rightarrow$

Für rechte Seite: $\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -C_1 \cdot \Phi$

Lösungsfunktion: $\Phi = A \cdot e^{\pm i\sqrt{C_1}\varphi}$

Φ muß im ganzen Raum eindeutig sein $\Rightarrow$

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + n \cdot 2\pi) \Rightarrow e^{\pm i\sqrt{C_1} \cdot 2n\pi} = 1 \Rightarrow \sqrt{C_1} = m \text{ mit } m \in \mathbb{Z}$$

Damit ergibt sich für die Lösungsfunktionen $\Phi_m(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi}$

Normierung: $\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \cdot \Phi_m(\varphi) d\varphi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

**m ganzzahlig
 = "magnetische"
 Quantenzahl durch
 Randbedingung in Φ**



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Normierte Funktionen: $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

Funktionen sind **orthogonal** - es gilt: $\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \cdot \Phi_n d\varphi = \delta_{mn}$

$\delta_{mn} = 1$ für $m = n$ sonst Null

Bestimmung der Lösungsfunktion $\Theta(\vartheta)$

Vorgangsweise:

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) r^2 \sin \vartheta = C_1 = m^2 \quad \text{mal} \quad \frac{1}{\sin^2 \vartheta}$$

und umordnen $\rightarrow$ rechts nur Terme in ϑ , links nur solche in r

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) &= \\ = -\frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} &= C_2 \end{aligned}$$



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Vorsicht: m hat hier zwei Bedeutungen

mMasse und $m = \sqrt{C_1}$ - **magnetische Quantenzahl**

Wieder gilt: Linke Seite hängt nur von r ab, rechte nur von ϑ

Gleichung muß für ALLE Werte von r und ϑ gelten $\Rightarrow$

Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten C_2 sein $\Rightarrow$

Erhalten für Funktion $\Theta(\vartheta)$:

$$\frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} = -C_2 \quad m = \text{magn. } \mathbb{Z}$$

$m = 0$ und $\cos \vartheta = \xi \Rightarrow$ **Legendresche Differentialgl.**

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right] + C_2 \Theta = 0$$



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Lösung in Form einer Potenzreihe:

$\Theta = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots$ Reihe darf nur endlich sein, damit Θ auch für $\xi = \pm 1$ d.h. $\Theta = 0$ oder Θ endlich bleibt
Einsetzen - Koeffizientenvergleich (gleiche Pot ξ^k)

$$\text{Rekursionsformel: } a_{k+2} = a_k \cdot \frac{k \cdot (k+1) - C_2}{(k+2) \cdot (k+1)}$$

Reihe hat endliche Zahl an Gliedern - Reihe bricht nach l-ten Glied ab, d.h. $a_l \neq 0$ aber $a_{l+2} = 0 \Rightarrow C_2 = l(l+1)$ mit $l \in \mathbb{N}$

$l = \text{Drehimpuls} \in \mathbb{Z} = \text{ganze Zahl aus Randbedingung von } \Theta$

Reelle Lösungsfunktionen - Legendre Polynome

$$\Theta_l(\xi) = \text{const.} P_l(\cos \vartheta)$$

Wegen Eindeutigkeit d. Aufenthaltswahrscheinlichkeit am gleichen Ort gilt $\Theta(\vartheta) = \pm \Theta(\vartheta + \pi)$



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Für $m \neq 0$ lässt sich $\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \Theta = -C_2$ $m = \text{magn. } \mathbb{Z}$

durch "assozierte Legendrefunktionen" lösen - enthalten m

$$\text{Bestimmungsgl.: } P_l^m(\cos \vartheta) = \text{const.} (1 - \xi^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} (P_l(\xi))$$

Weil $P_l(\xi)$ Potenzreihe bis $\xi^l \Rightarrow$ es muß gelten $|m| \leq l$

Da m positiv aber auch negativ sein kann gilt:

$$-l \leq m \leq +l$$

$$\text{Normierungsbedingung: } \int_0^\pi |P_l^m(\cos \vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = 1$$



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Produktfunktion:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = P_l^m(\cos \vartheta) \cdot \Phi_m(\varphi) \dots \text{Kugelflächenfunktionen}$$

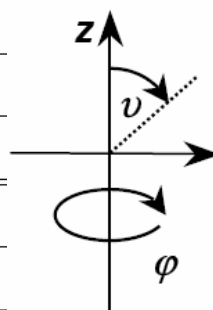
Normierung:
$$\int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 1$$

$|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2 \dots$ **Aufenthaltswahrscheinlichkeit im kugelsymmetrischen Potential - Abhängigkeit in ϑ, φ**



Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2,3$

l	m	$Y_l^m(\vartheta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta$
2	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2 \cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta)$
3	± 3	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$
	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$



Das Absolutquadrat der Kugelflächenfunktionen $|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2$ gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im kugelsymmetrischen Potenzial als Funktion der Winkel ϑ und φ an.



Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2,3$

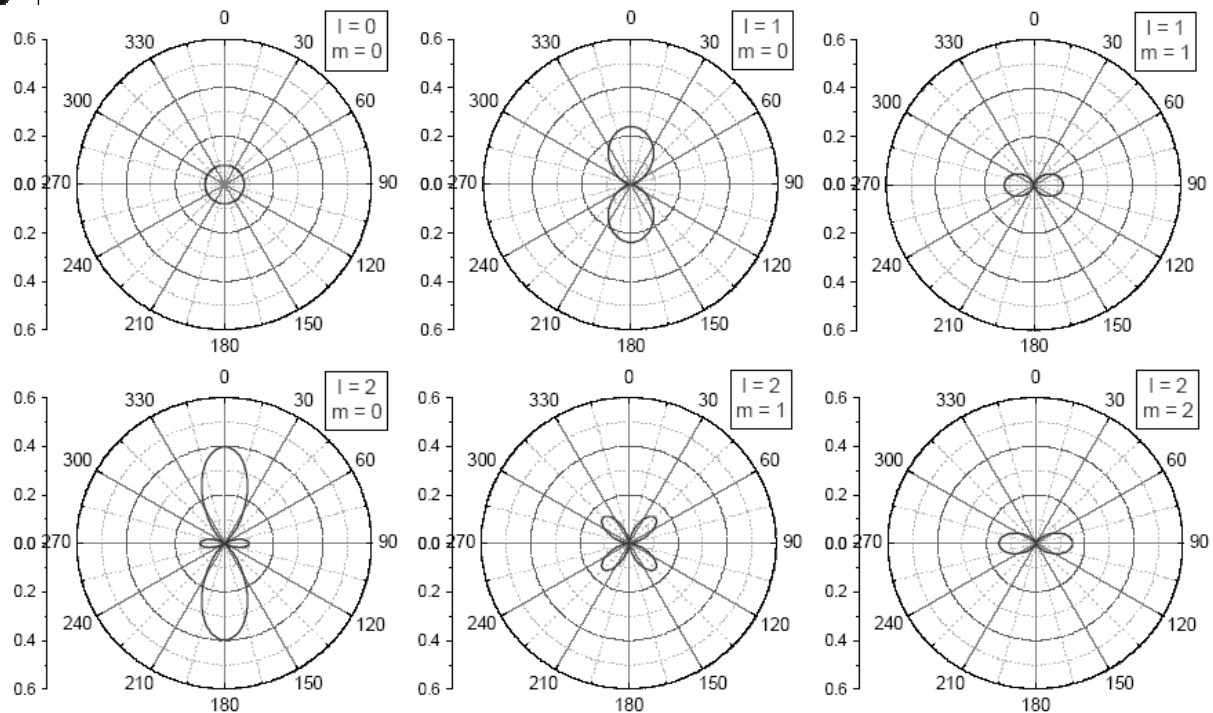


Abbildung 3.7: Polardarstellung des Absolutquadrats der normierten Kugelflächenfunktionen. Die Länge des Vektors vom Ursprung zu den Kurven gibt $|Y_l^m(\cos \vartheta)|^2$ für die verschiedenen Winkel ϑ an. Alle Diagramme sind rotationssymmetrisch um die z -Achse, die hier als vertikale Achse gewählt wurde.



Quadrat der Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2$

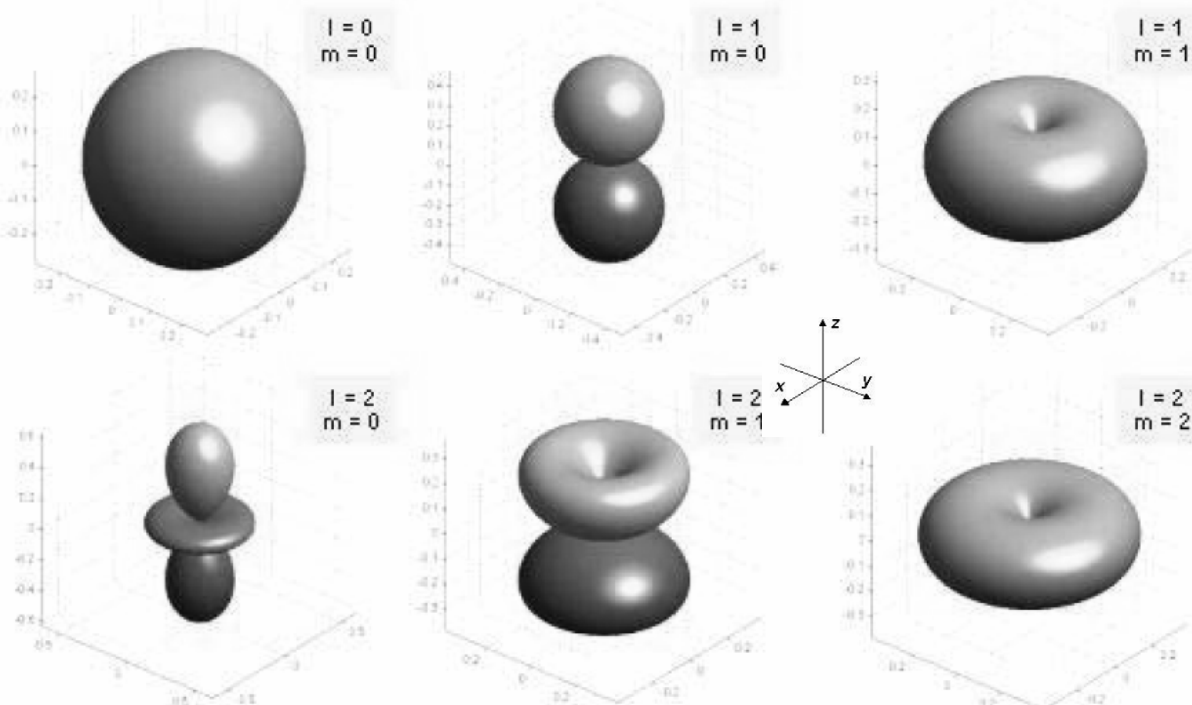


Abbildung 3.8: Dreidimensionale Darstellung der Quadrate der normierten Kugelflächenfunktionen $|Y_l^m|^2$ für $l = 0, 1, 2$ und 3 . Zeichnet man einen Vektor vom Zentrum der betreffenden Figur in eine bestimmte Richtung, so gibt die Länge eines Vektors vom Ursprung zum Schnittpunkt mit der Oberfläche der Figur den Wert von $|Y_l^m|^2$ an.



Quadrat der Kugelflächenfunktionen für $\ell=3$

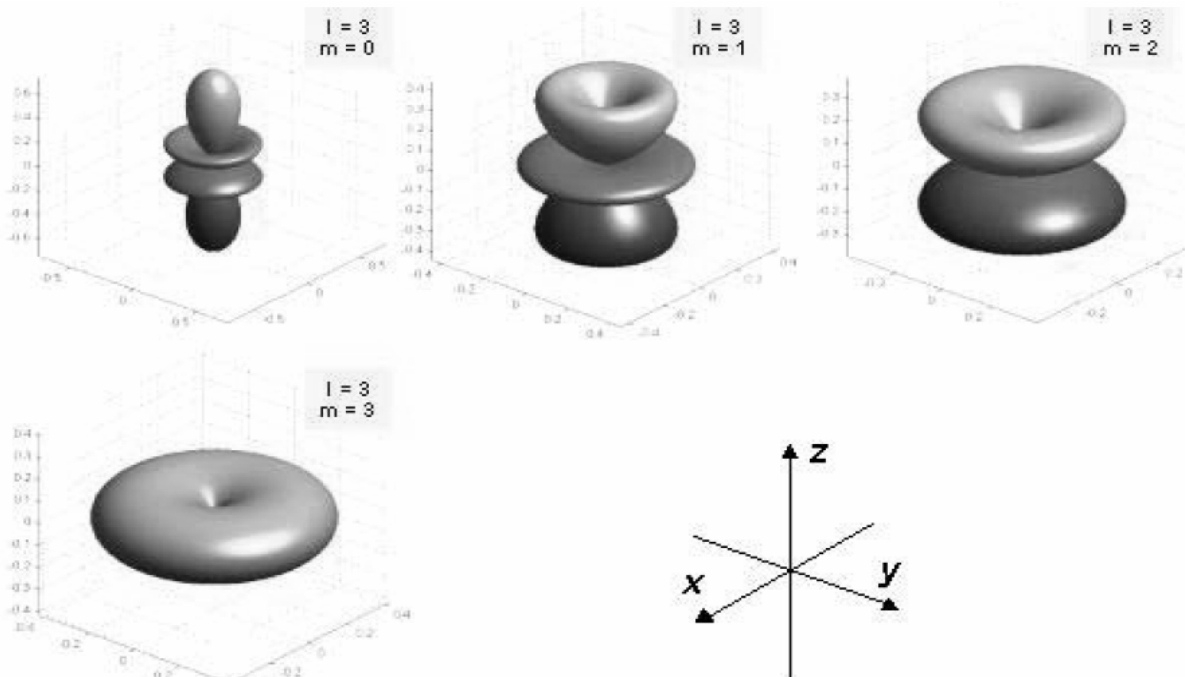


Abbildung 3.8: Dreidimensionale Darstellung der Quadrate der normierten Kugelflächenfunktionen $|Y_l^m|^2$ für $l = 0, 1, 2$ und 3 . Zeichnet man einen Vektor vom Zentrum der betreffenden Figur in eine bestimmte Richtung, so gibt die Länge eines Vektors vom Ursprung zum Schnittpunkt mit der Oberfläche der Figur den Wert von $|Y_l^m|^2$ an.



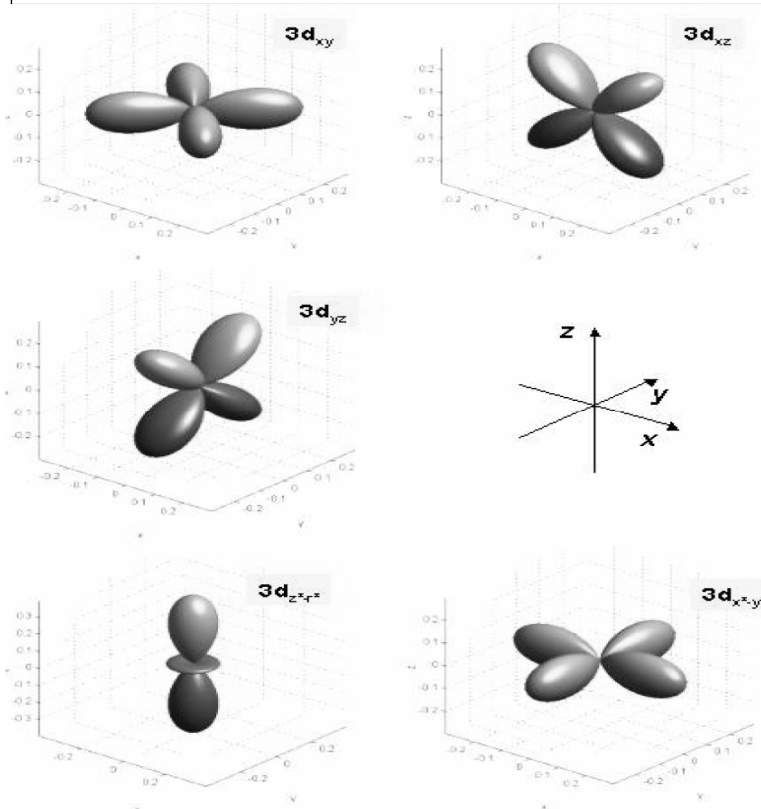
n	l	m	Bezeichnung	Entartungsgrad	$ m $	Winkelfunktion
1	0	0	s	1	0	$s = 1/\sqrt{4\pi}$
2	1	-1, 0, 1	p	3	0 1	$p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$ $p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi$ $p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \sin \varphi$
3	2	-2 bis +2	d	5	0 1 2	$d_{3z^2-r^2} = \sqrt{5/16\pi} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$ $d_{xz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \cos \varphi$ $d_{yz} = \sqrt{15/4\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \sin \varphi$ $d_{x^2-y^2} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \vartheta \cos 2\varphi$ $d_{xy} = \sqrt{15/4\pi} \sin^2 \vartheta \sin 2\varphi$
4	3	-3 bis +3	f	7		
5	4	-4 bis +4	g	9		
6	5	-5 bis +5	h	11		

**n =Hauptquantenzahl aus Rydbergscher Formel
(bestimmt Energie unabh. von l, m , daher Entartung der Energie)**

Tabelle 3.3: Funktionsnamen und Entartungsgrad für Zustände mit verschiedener Drehimpulsquantenzahl l . Ebenso gezeigt ist die mathematische Form der Winkelfunktionen für die s -, p - und d -Zustände in kartesischen Koordinaten.



Die Kugelflächenfunktionen für $\ell=2, n=3$



Zusammenfassung

Wir wollen zum Abschluss dieses Abschnitts einige allgemeinen Aussagen zusammenfassen, die sich bezüglich der Kugelflächenfunktionen, also den Eigenfunktionen des winkelabhängigen Anteils der Schrödinger-Gleichung, machen lassen:

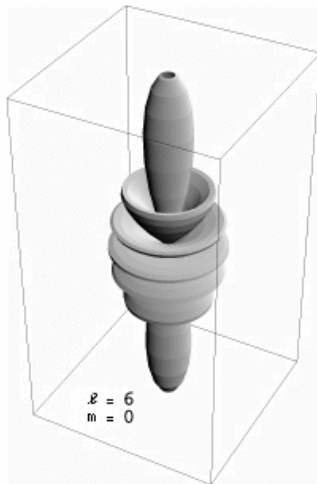
- Die Wellenfunktionen geben die Wahrscheinlichkeitsamplitude für das Auffinden des Elektrons im Einelektronenatom (z.B. Wasserstoffatom) an. Die Kugelflächenfunktionen Y_l^m beinhalten dabei die Information über die Winkelabhängigkeit dieser Amplitude.
- Die Charakterisierung nach Drehimpulsen entspricht einer Multipolentwicklung, wie man sie aus der Elektrodynamik kennt.
- Wie im Falle des freien quantenmechanischen Teilchens ist die Wellenfunktion des Einelektronenatoms intrinsisch komplex. Die komplexe Phase wird durch den Winkel ϕ bestimmt. Dabei wäre es möglich durch Linearkombination von $Y_l^m(\vartheta, \phi)$ und $Y_l^{-m}(\vartheta, \phi)$ die komplexe Phase zu eliminieren. Dies würde aber bedeuten, dass die entsprechende Funktion zwar weiterhin Eigenfunktion von $\hat{L}^2$ aber nicht mehr von $\hat{L}_z$ wäre.¹⁴



Kugelflächenfunktionen

1.7. Spherical harmonics

2: Spherical plot of the absolute value



1: Introduction

- 2: Spherical plot of the absolute value
- 3: Spherical plot of the real part (orbital)
- 4: Map of the complex values
- 5: Color plot on the unit sphere

Topics

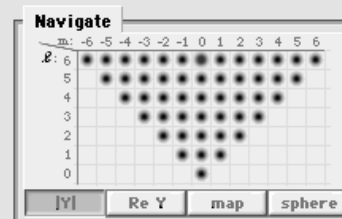
Spherical harmonics

1

(of 2)

Spherical Plot of $|Y_\ell^m(\vartheta, \varphi)|$

A non-negative function $f(\vartheta, \varphi)$ of the angular variables can be visualized by a *spherical plot*. In the direction defined by ϑ and φ we plot a point at a distance $r = f(\vartheta, \varphi)$ from the origin. The set of all these points forms a surface in three-dimensional space.



1.7.2.1

Mai 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

19



Lösung der Radialabhängigkeit der SG

Atomkern: Ladung $+Z.e$, Masse m_2

Elektron: Ladung $-e$, Masse m_1

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 \Psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 \Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi = E \Psi(r_1, r_2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 \Psi \text{ kinetische Energie des Elektrons}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 \Psi \text{ kinetische Energie des Kerns}$$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi \text{ potentielle Energie der Coulombwechselwirkung}$$

Führt man reduzierte Masse $\mu = (m_1 \cdot m_2) / (m_1 + m_2)$ ein $\rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi + E_{pot}(r) \Psi = E \cdot \Psi$$

Kugelsymmetrisches Potential: $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

Funktion $R(r)$ und Energieeigenwerte bestimmen.

Mai 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

20



Lösung der Radialgleichung

Produktansatz: $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

Gleichung f. Radialfunktion:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - E_{\text{pot}}(r)) R(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} R(r)$$

$$\text{Drehimpuls } |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar$$

Mit Coulombpotential ergibt sich

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

$r \rightarrow \infty$ Terme mit $1/r$ und $1/r^2 \rightarrow 0$

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} = -\frac{2\mu}{\hbar^2} E \cdot R(r)$$



Randbedingungen für Radialgleichung:

erwarte Aufenthaltswahrs. maximal für bestimmte Bahnen zwischen r und $r+dr$.

Definiere $W(r) = r R(r)$, so dass $4\pi |W|^2 dr$ die Wahrscheinlichkeit angibt, dass Elektron in Kugelschale zwischen r und $r+dr$ zu finden.

Setzt man $R(r) = W(r)/r$ in Radialgl. ein, dann findet man für $r \Rightarrow \infty$: $W = A e^{ikr} + B e^{-ikr}$ mit $k = (\sqrt{2\mu E})/\hbar$



Lösung der Radialgleichung

Dies ergibt $R(r) = W(r)/r = \frac{A}{r} \cdot e^{ikr} + \frac{B}{r} \cdot e^{-ikr}$

$E > 0$ $\Psi(r, t) = \frac{A_0}{r} e^{i(kr - \omega t)}$ Elektron das Kern verlassen will

Zweite Term - einlaufende Kugelwelle (Stoßprozeß)

Für $E < 0$ gebundene Zustände mit $\kappa = \sqrt{-2\mu E}/\hbar = i \cdot k$

$$R(r \rightarrow \infty) = A \cdot e^{-\kappa r} + B e^{\kappa r}$$

$R(r)$ normierbar; endlich $\rightarrow B = 0$



Lösung der Radialgleichung

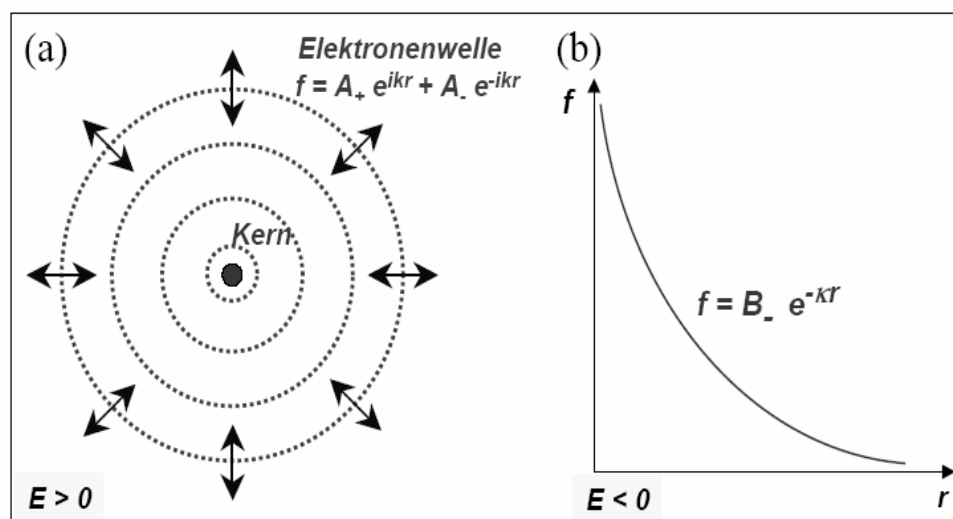


Abbildung 3.12: (a) Ein- und auslaufende Kugelwellen eines Elektrons im kugelsymmetrischen Potenzial mit positiver Gesamtenergie $E > 0$. (b) Exponentiell abklingende Amplitude der Wellenfunktion des Elektrons bei $E < 0$.



Lösung der Radialgleichung

Allgemeine Lösung: $R(r) = u(r) \cdot e^{-\kappa r}$ einsetzen, mit $a = \frac{\mu \cdot Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + 2\left(\frac{1}{r} - \kappa\right) \frac{du}{dr} + \left[\frac{2a-2\kappa}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u = 0$$

Lösung:
Laguerre Polynome

Für $u(r)$ Potenzreihenansatz $\rightarrow a = n \cdot \kappa$

Energieeigenwerte: $E_n = -\frac{a^2 \hbar^2}{2\mu \cdot n^2} = -\frac{\mu \cdot Z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -Ry^* \frac{Z^2}{n^2}$

Rydergkonstante $Ry^* = \frac{\mu \cdot e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$

Identisch mit Energieformel gemäß Bohrmodell!

Quantelung von a aus Randbedingung dass Wellenfkt = 0 im ∞

Anmerkung:

- Gebundene Zustände - gequantelte Zustände
- Aus Summation ergibt sich für Drehimpulsquantenzahl: $l \leq n - 1$



Lösungen der SG für n, l, m

Tabelle 5.1. Die normierten radialen Eigenfunktionen $R(r)$ (Laguerre-Polynome) für ein Elektron im Coulomb-Potential ($N = (Z/na_0)^{3/2}$, $x = Zr/na_0$, $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / \mu e^2$)

n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2Ne^{-x}$
2	0	$2Ne^{-x}(1-x)$
2	1	$\frac{2}{\sqrt{3}} Ne^{-x} x$
3	0	$2Ne^{-x} \left(1 - 2x + \frac{2x^2}{3}\right)$
3	1	$\frac{2}{3} \sqrt{2} Ne^{-x} x(2-x)$
3	2	$\frac{4}{3\sqrt{10}} Ne^{-x} x^2$
4	0	$2Ne^{-x} \left(1 - 3x + 2x^2 - \frac{x^3}{3}\right)$
4	1	$2\sqrt{\frac{5}{3}} Ne^{-x} x \left(1 - x + \frac{x^2}{5}\right)$
4	2	$2\sqrt{\frac{1}{5}} Ne^{-x} x^2 \left(1 - \frac{x}{3}\right)$
4	3	$\frac{2}{3\sqrt{35}} Ne^{-x} x^3$

Tabelle 5.2. Die normierten vollständigen Eigenfunktionen eines Elektrons im Coulombpotential $V(r) = -Z \cdot e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$

n	l	m	Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \cos \vartheta$
2	1	± 1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$
3	1	0	$\frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \cos \vartheta$
3	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{81\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	0	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$
3	2	± 1	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}$
3	2	± 2	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{Z^2 r^2}{a_0^2} e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$



Nomenklatur

Quantenzahlen - Buchstabennomenklatur.

z.B.: Zustand mit $n = 2, l = 1, m = 0 \Rightarrow 2p_\sigma$ - Zustand

$n = 4, l = 3, m = 2 \Rightarrow 4f_\delta$ - Zustand

Energie des Zustands hängt NUR von Hauptquantenzahl ab!

Es gibt daher zu jedem l wegen $-l \leq m \leq +l$ insgesamt $(2l + 1)$ energetisch gleiche Zustände $\rightarrow$ **entartete** Zustände

Wegen $l < n$ gibt es zu jeder Hauptquantenzahl n $k = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$

verschiedene Zustände (n, l, m) mit n^2 verschiedenen Wellenfunktionen $\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) \rightarrow$ verschiedene räumliche Verteilung - z.B.: alle Zustände mit $l = 0$ haben kugelsymmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Diese Zustände haben ALLE selbe Energie $E_n \rightarrow k = n^2$
"Entartungsgrad"



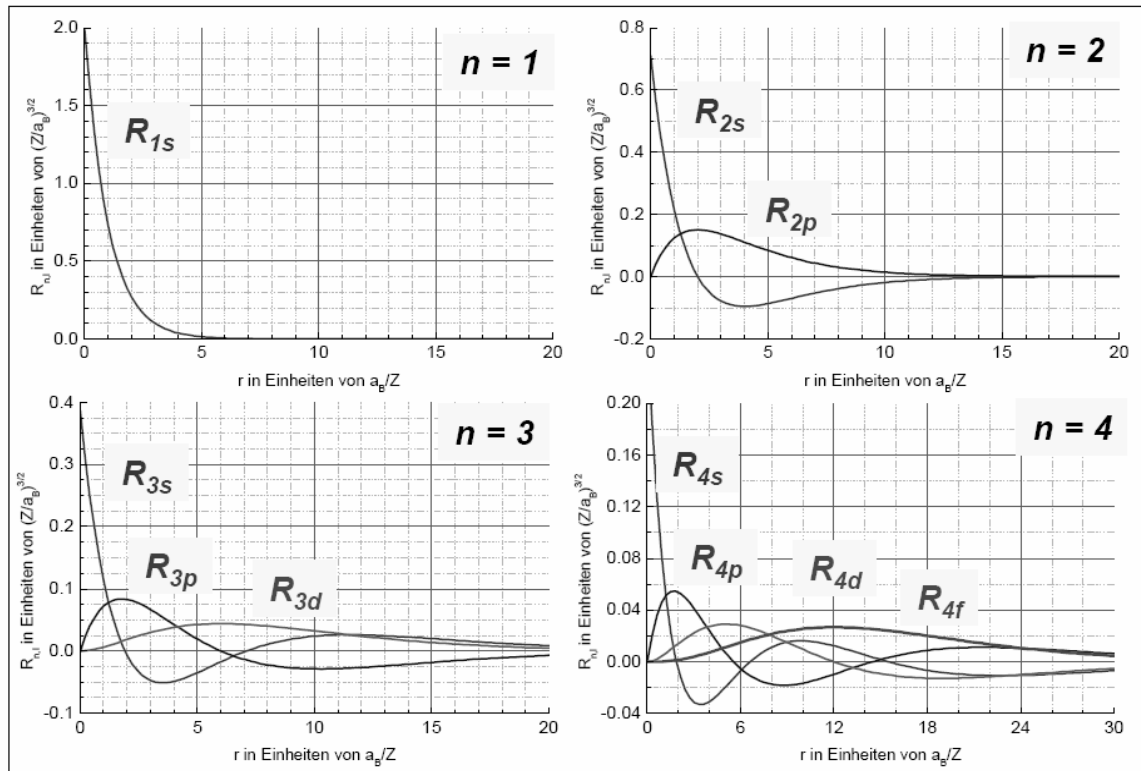
Nomenklatur

Tabelle 5.3. Buchstabenbezeichnung der Zustände (l, m)

l	Zustand	$ m $	Zustand
0	s	0	σ
1	p	1	π
2	d	2	δ
3	f	3	φ
4	g	4	γ



Radialfunktionen



Mai 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

29



Räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit

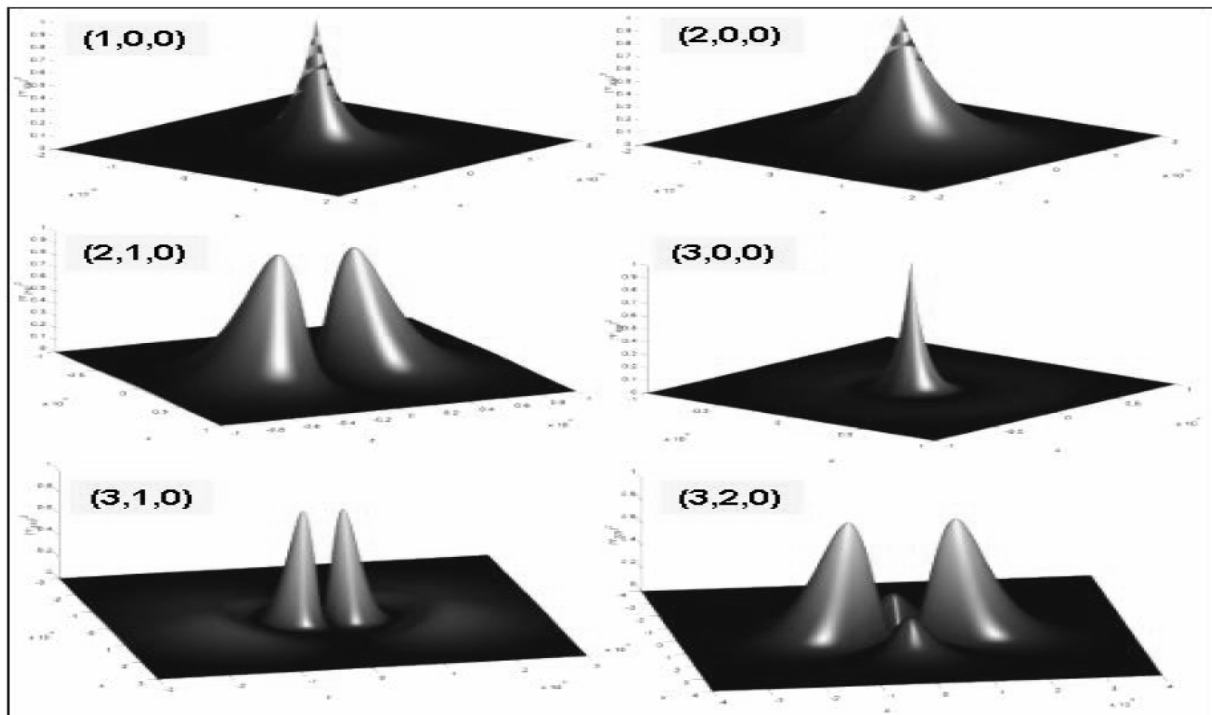


Abbildung 3.15: Schnitt durch die räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einem Ein-elektronenatom für verschiedene Quantenzahlen n, l, m .

Mai 19, 2005

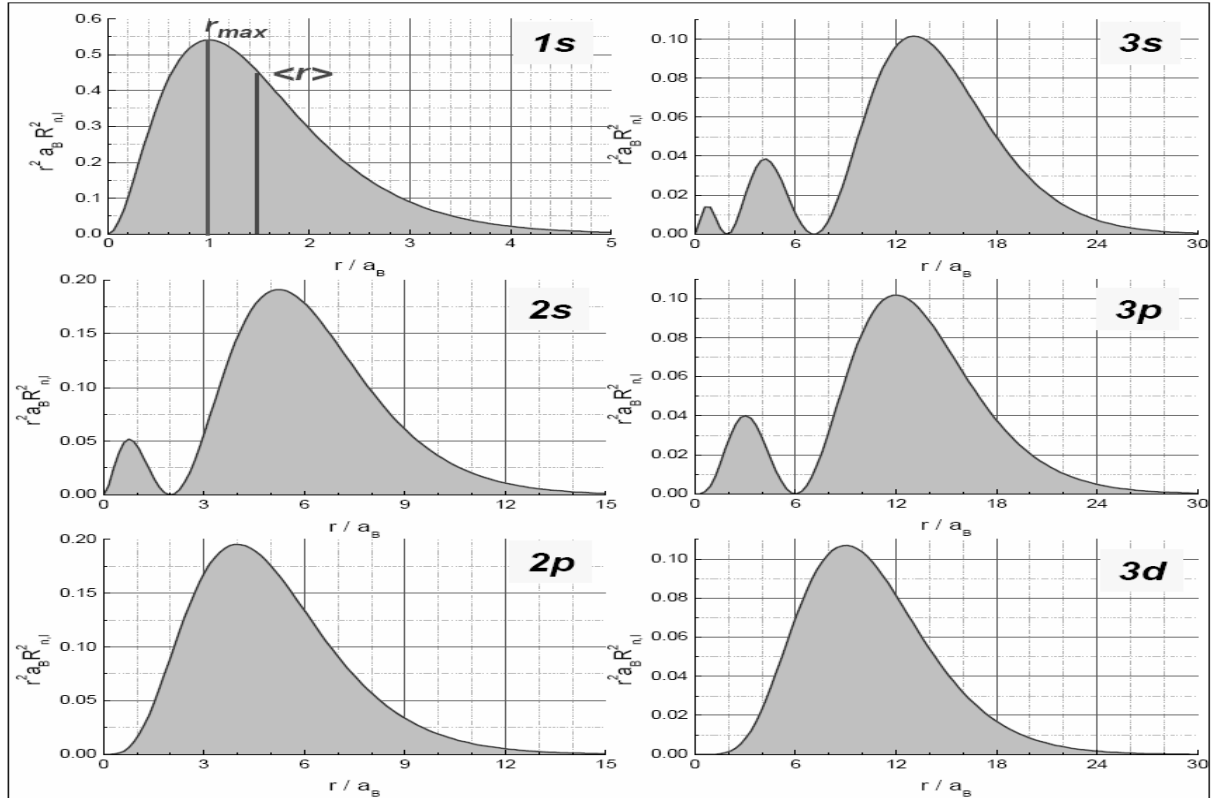
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

30



Radialer Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$W(r)dr = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = r^2 R_{n,l}^2(r) dr$$



Mai 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

31



Vergleich mit Bohrschen Atommodell

Der Erwartungswert $\langle r \rangle = \int_0^\infty r R_{n,l}^2(r) r^2 dr$ für den mittleren Abstand des Elektrons vom Kern ist die quantenmechanische Größe, die dem Bohrschen Radius entspricht. Er ergibt sich für den Grundzustand des Wasserstoffatoms mit der 1s-Wellenfunktion aus Tabelle 3.5 zu

$$\langle r \rangle = \int_{r=0}^{\infty} \frac{r}{\pi a_B^3} 4\pi r^2 e^{-2r/a_B} dr = \frac{3}{2} a_B . \quad (3.3.92)$$

Der quantenmechanische Erwartungswert stimmt also nicht ganz mit dem Bohrschen Radius überein.

Mai 19, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

32



Zum Mitnehmen

Die dreidimensionale SG für das H-Atom lässt sich wegen der Kugelsymmetrie des Potentials in drei eindimensionale Gleichungen der Kugelkoordin. r , θ und φ umformen.

Die Wellenfkt. kann als Produkt $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

geschrieben werden, wobei R vom Potential abhängt und die Kugelflächenfkt. Y_l^m durch den Drehimpuls für alle kugelsymmetrischen Potentiale bestimmt wird.

Die drei unabhängigen Gleichungen führen zu drei Randbedingungen, mit drei Quantenzahlen: n, l, m , wobei die Hauptquantenzahl n die Energie bestimmt, l die Quantelung des gesamten Drehimpulses und m die z -Komponente des Drehimpulses.

Zu jeder Energiewert gehören $k = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ Eigenfunktionen, alle mit der gleichen Energie (n^2 -fach entartet).



Vorlesung 12:

Roter Faden:

Wiederholung H-Atom
Bahn- und Spinmagnetismus

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag



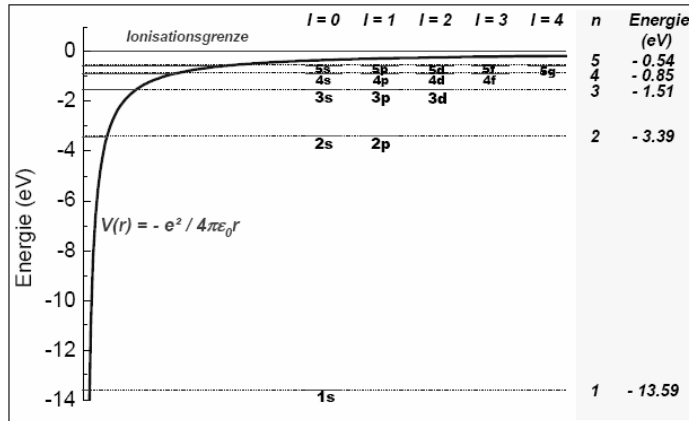
Wiederholung H-Atom

Die Energieniveaus des H-Atoms werden durch 3 Quantenzahlen charakterisiert:

1. Hauptquantenzahl n : $E \propto \frac{1}{n^2}$
2. Drehimpulsquantenzahl l : $l = 0, 1, \dots, n-1$ (wird auch Nebenquantenzahl genannt, da E unabhängig von l ist)
3. Magnetische Quantenzahl: $-l \leq m \leq l$

Bei **Kugelsymmetrie** d.h. $V \propto \frac{1}{r}$, gilt:

$E_{n,l,m}$ unabhängig von l, m , d.h. $E_{n,l,m} = E_{n,l',m'}$ (= entartete Energieniveaus)



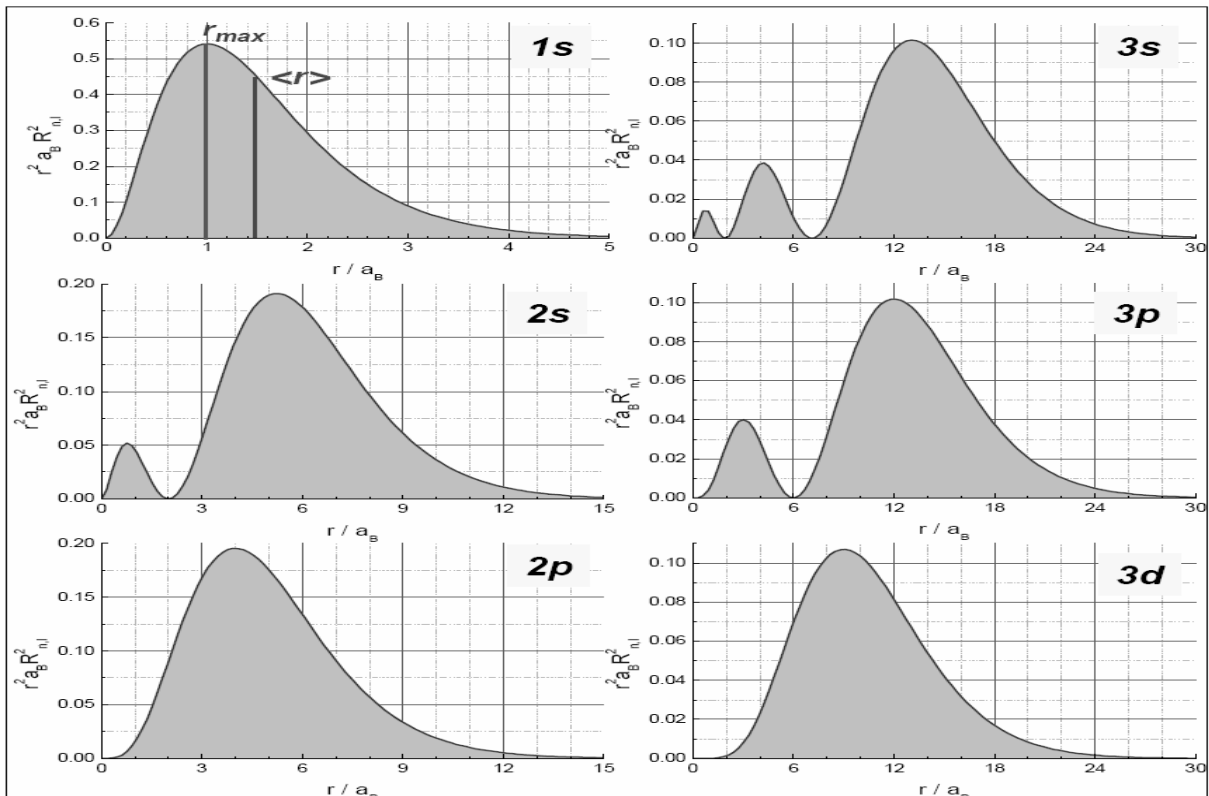
Entartung (Kugelsymmetrie) aufgehoben durch:

externe B,E-Felder
interne B,E-Felder
relativ. Korrekturen
Spinpolarization



Radialer Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$W(r)dr = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = r^2 R_{n,l}^2(r) dr$$





Radialbahnen ($l=0$) und Orbitale mit $l \neq 0$

2.1. Classical Coulomb problem 4: Orbits with the same energy

Classical Coulomb problem – 4

1
(of 1)

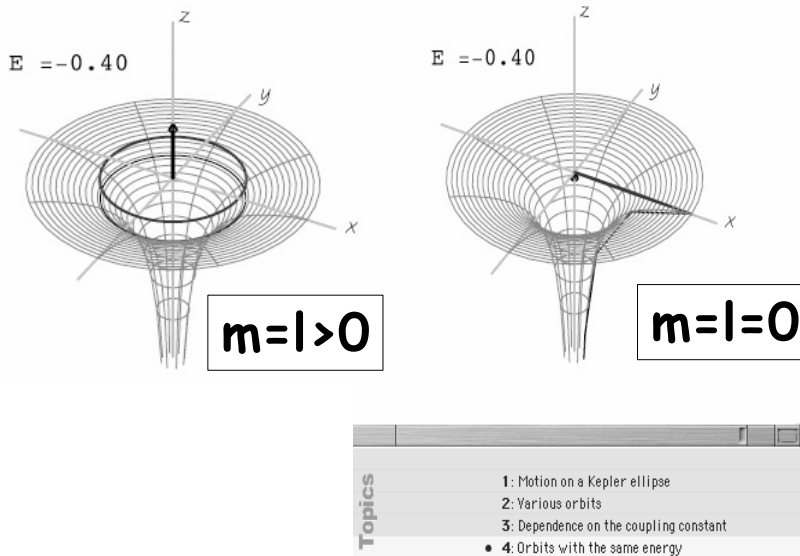
Various orbits with the same energy

Interactive image showing a family of Coulomb orbits. You can adjust the angular momentum. The energy and the direction of the Runge-Lenz vector is fixed.

Theoretical background: This interactive image shows a set of Coulomb orbits with the same total energy. The energy has the negative value $E = -0.4$, corresponding to elliptic orbits. The total energy of the particle consists of the kinetic energy (which is always positive) and the potential energy (which is always negative in the case of an attractive Coulomb field). If you start closer to the center, the particle has a larger negative potential energy which can be compensated by a higher kinetic energy (i.e., by a larger initial momentum).

The shape of the orbit is determined by the distribution of energy between the radial and the angular motion. The orbits similar to a circle have a large amount of rotational energy (large angular momentum) and show almost no radial oscillations. The very excentric orbits put a high amount of energy in the radial oscillations, their motion has a small angular momentum and hence only a small rotational component.

2.1.4.1



Mai 24, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

4



Aufhebung der Entartung bei der Wasserstoff Balmer-Linie H_{α}

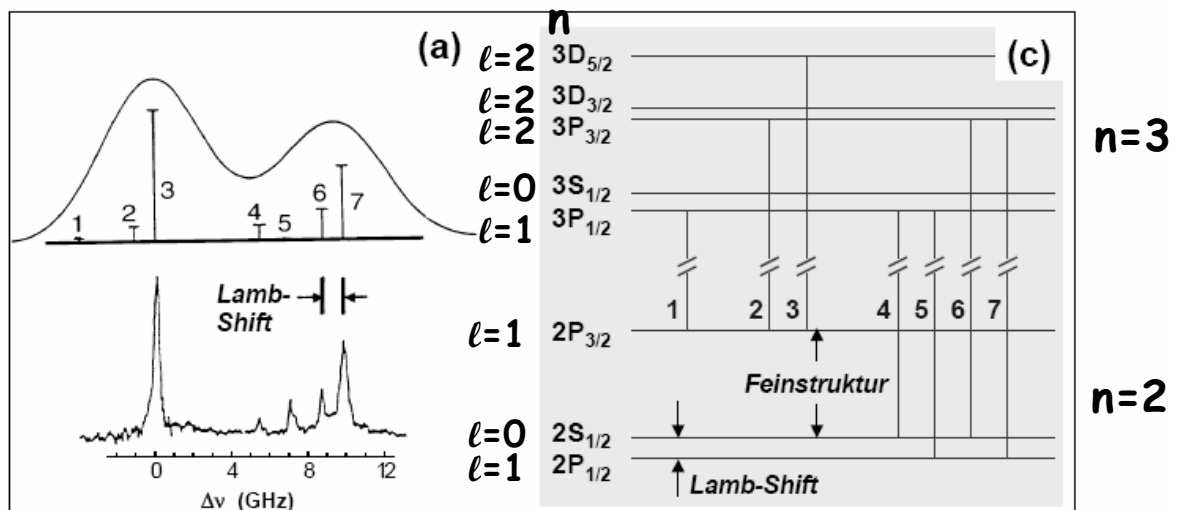


Abbildung 4.1: Feinstruktur der Balmer-Linie H_{α} gemessen mit (a) hochauflösender Spektroskopie und (b) mit höchstauflösender Laser-Spektroskopie. (c) Verfeinertes Termschema des Wasserstoffs. Die erlaubten Übergänge werden durch die Auswahlregeln bestimmt, die wir erst später diskutieren werden.

$n=2$: 4fach Entartung in 3 Niveaus gespalten ohne externe Felder

$n=3$: 9fach Entartung in 5 Niveaus gespalten ohne externe Felder

Mai 24, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

5



Experimentelle Befunde: Aufhebung der Entartung

Da Wasserstoff als Molekül vorliegt, muss man für die Spektroskopie an atomarem Wasserstoff erst die H_2 -Moleküle dissoziieren. Dies kann man entweder durch hohe Temperaturen (1500-2000°C), durch geeignete Katalysatoren oder durch Elektronenstoß in einer Gasentladung erreichen. Für die hochauflösende Spektroskopie verwendet man üblicherweise Gitterspektrometer (siehe Physik III) oder höchstauflösende Laserspektroskopie. Hierbei ist zu beachten, dass für $\lambda < 200 \text{ nm}$ Luft zu absorbieren beginnt und man deshalb das Spektrometer evakuieren muss.

Die hochauflösende Spektrometrie an Wasserstoff zeigt, dass die Emissionslinien des Wasserstoffatoms sich zwar in Serien entsprechend (4.0.1) anordnen lassen, dass es aber signifikante Abweichungen von den Vorhersagen des bisher verwendeten Modells gibt. Insbesondere werden folgende Beobachtungen gemacht:

- Bei Anlegen eines Magnetfeldes spalten die Linien in mehrere Linien auf.
- Die Wellenzahlen $\bar{\nu}_{ik}$ der verschiedenen Übergänge hängen außer von den Hauptquantenzahlen n auch von der Bahndrehimpulsquantenzahl l ab. Die absoluten Zahlenwert von $\bar{\nu}_{ik}$ weichen beim Wasserstoffatom um bis zu 0.2 cm^{-1} von der theoretischen Vorhersage ab.
- Alle Spektrallinien, die von den s -Niveaus ($l = 0$) ausgehen, bestehen aus zwei eng benachbarten Komponenten, die man als *Dubletts* bezeichnet (siehe Abb. 4.1: Dublette 4/5, 6/7). Die Spektrallinien für $l > 0$ bestehen sogar aus mehreren Komponenten.
- Der Grundzustand ($n = 1, l = 0$) zeigt eine sehr feine Aufspaltung, die man als *Hyperfeinstruktur* bezeichnet. Man stellt fest, dass diese Hyperfeinstruktur für ^1_1H und ^2_1H (Deuterium) unterschiedlich ist, also vom Kern abhängt.



Ursachen für Abweichung der Kugelsymmetrie

Interne E-Felder: bei mehreren Elektronen schirmen innere Elektronen die Kernladung ab. Kommt später bei Mehrelektron-Atomen.

$$E_{int} : \quad \Delta E = eU_{int} \approx 10 \text{ eV} \rightarrow E_{int} = \frac{U_{int}}{r} = \frac{10 \text{ V}}{10^{-10} \text{ m}} = 10^{11} \frac{\text{V}}{\text{m}}$$

Im Labor erreichbar : $\simeq 10^8 \frac{\text{V}}{\text{m}}$

Interne B-Felder:

- Bewegung der Elektronen erzeugt Strom und damit B-Feld**
 $\Rightarrow$ **Bahnmagnetismus.**
- Elektronen haben Eigendrehimpuls (SPIN genannt)**
 (klassisch: Drehbewegung, aber punktförmiges Teilchen hat keine Trägheitsmoment und ist auch nicht quantisiert.
 Spin ist reiner Quanteneffekt mit Quantenzahlen analog zum Drehimpuls $\ell = \frac{1}{2} \hbar$)

Aus der relativistischen Elektrodynamik ($\equiv$ Biot – Savart $\times \frac{1}{2}$) folgt :

$$\vec{B}_l = \frac{Ze\mu_0 \vec{l}}{8\pi r^3 m_0} = O(1 \text{ T}) \text{ für } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ Å} \equiv 10^{-10} \text{ m} \quad (2)$$

Im Labor: 20 T erreichbar



Bahnmagnetismus (klassisches Modell)

Elektron auf Kreisbahn mit Frequenz $\nu = \mathbf{v}/2\pi r \rightarrow$ elektr. Strom
 $I = -e \cdot \nu = -e \cdot \mathbf{v}/2\pi r \rightarrow$ magnetisches Moment $\mathbf{p}$ oder μ genannt

$$\mathbf{p}_m = I \cdot \vec{A} = I \cdot \pi r^2 \hat{n} = -e \cdot \mathbf{v}(r/2) \cdot \hat{n} \text{ mit}$$

$$\vec{A} = \pi r^2 \hat{n} \text{ Flächennormale senkrecht zu } \pi r^2$$

$$\text{Bahndrehimpuls des Elektrons: } \vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \cdot r \cdot \mathbf{v} \cdot \hat{n}$$

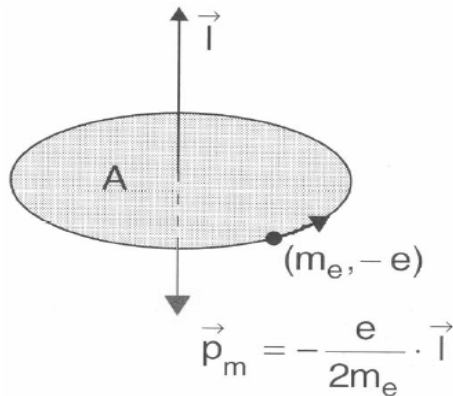


Abb. 5.8. Klassisches Modell für Drehimpuls $\mathbf{l}$ und magnetisches Moment $\mathbf{p}_m$ eines auf einer Kreisbahn umlaufenden Atoms



Normaler Zeeman-Effekt (Atome ohne Elektronenspin)

Bahnmagnetismus $\propto$ Drehimpuls + Quantisierung des Drehimpulses
 $\Rightarrow$ Aufspaltung in diskrete Energieniveaus in äußerem Magnetfeld
 $\Rightarrow$ Zeeman-Effekt

$$\text{Es ergibt sich. } \vec{p}_m = -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l}$$

Magnetische Moment $\vec{p}_m$ proportional zu Bahndrehimpuls $\vec{l}$

In äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ ist die potentielle Energie:

$$E_{pot} = -\vec{p}_m \cdot \vec{B} = +\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l} \cdot \vec{B}$$

B in z -Richtung $\vec{B}(0, 0, B_z = B)$ wegen $l_z = m \cdot h$

$$E_{pot} = \frac{e \cdot h}{2m_e} \cdot m \cdot B$$

$m \dots$ **magnetische Quantenzahl**; $-l \leq m \leq +l$

$$V_{pot} = \int D d\alpha = \int \vec{\mu} \times \vec{B} d\alpha = \int |\mu| |B| \sin \alpha d\alpha \equiv |\mu| |B| \cos \alpha = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$



Normaler Zeeman-Effekt

Proportionalitätsfaktor

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274015 \cdot 10^{-24} \text{ J/T } \textbf{Bohrsches Magneton} (\mathcal{J}\text{T} = \text{Am}^2)$$

Äußeres Magnetfeld B bewirkt zusätzliche Energie eines Zustandes (n,l,m): $\Delta E_m = \mu_B \cdot m \cdot B$

Terme des Wasserstoffatoms im Magnetfeld

$$E_{n,l,m} = E_{\text{Coul}}(n,l) + \mu_B \cdot m \cdot B$$

Entartung der $(2l+1)$ m-Zustände spalten durch Magnetfeld in $(2l+1)$ äquidistante Zeeman-Komponenten auf $\rightarrow \Delta E = \mu_B \cdot B$

Aufspaltung nennt man "normaler Zeeman Effekt"

Experimentelle Beobachtung: Emission oder Absorption von Licht durch Atome in Magnetfeld: Es treten nun Übergänge zwischen atomaren Zuständen mit $\Delta m = m_2 - m_1 = +1$ auf - zusätzliche Linien!



Polarisation beim Zeeman-Effekt

3 Linien beobachtet : $\Delta m_j = 0 \rightarrow \Pi - \text{Uebergänge genannt}$
 $\Delta m_j = \pm 1 \rightarrow \sigma - \text{Uebergänge}$

Licht ist polarisiert : $\left. \begin{array}{ll} E \perp B & \text{fuer } \sigma \\ E \parallel B & \text{fuer } \Pi \end{array} \right\} \text{Uebergänge}$

Lorentz - Erklärung (klassisch): Das Elektron bewegt sich in 3 unabhängigen Richtungen um den Kern.

Dieses kann man beschreiben durch 3 "Ersatz-Elektronen" :

1. schwingt linear entlang B
2. + 3. schwingen entgegengesetzt zirkular zueinander in der Ebene $\perp \vec{B}$.

Ohne Magnetfeld : Zentrifugalkraft = Coulombkraft

$$\rightarrow m\omega_0^2 r = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \rightarrow \omega_0 = \sqrt{\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^2}}$$

Mit Magnetfeld entlang Z: zusätzliche Lorentzkraft für (2) + (3) : $\rightarrow h\omega = h\omega_0 + g_j m_j \mu_B B$

$$E \uparrow \begin{array}{l} \text{---} +g_j m_j \mu_B B \\ \text{---} -g_j m_j \mu_B B \end{array}$$

<http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/zeemanspec.html>



Der Elektronenspin (Eigendrehimpuls)

Experimentelle Befunde (Feinstruktur der Spektren, anormaler Zeeman Effekt, Stern Gerlach Versuch) Zeigen, dass Elektronen:
Masse m_0 Ladung $-e$ weitere charakteristische Eigenschaft besitzen
→ **Elektronenspin** → magnetisches Moment μ_s

Otto Stern²⁴ und Walter Gerlach²⁵ führten 1921 das nach ihnen benannte *Stern-Gerlach-Experiment* durch (vergleiche Physik III). Dieses Experiment zeigte klar, dass Elektronen außer ihrer Ladung $-e$ und ihrer Ruhemasse m_0 noch eine weitere Eigenschaft besitzen müssen, die wir Elektronenspin nennen. Samuel A. Goudsmit (1902-1978) und George E. Uhlenbeck (1900-??) stellten 1925 die Hypothese auf, dass freie Elektronen einen Eigendrehimpuls besitzen, den sie *Elektronenspin* S nannten. Im Stern-Gerlach Experiment wurden nur zwei mögliche Einstellungen der z -Komponente des Spins gefunden. Wir können den Spin freier Elektronen also mit der Spinquantenzahl $s = 1/2$ beschreiben. Etwas lax sagt man meist, dass Elektronen den Spin $1/2$ besitzen.

Es ist nun naheliegend, für den Betrag $|S|$ des Spins und seine Komponente S_z analoge Beziehungen wie für L und L_z anzunehmen (vergleiche (3.3.57) und (3.3.59)):

$$|S| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{3/4} \hbar \quad \hat{S} \times \hat{S} = i\hbar \hat{S} \quad (3.4.1)$$

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (3.4.2)$$



Stern-Gerlach Effekt

Ablenkung von Ag-Atome in inhomogenen Magnetfeld
mit Magnetfeld gab es Aufspaltung der Verteilung der Ag-Atome →
ablenkende Kraft auf Ag-Atome → magnetisches Moment p_m

Kraft auf magnetischen Dipol im inhomogene Magnetfeld

$$\vec{F} = -p_m \cdot \text{grad} \vec{B}$$

Grundzustand Ag-Atom s-Zustand mit $l = 0$ kein magnetisches Bahnmoment möglich!

Goudsmit + Uhlenbeck (1925): Hypothese "**Elektronen besitzen Eigendrehimpuls**" - **Elektronenspin** s - ist mit magnetische Moment μ_s

verknüpft. Nach Drehimpulsregeln gilt:

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

Projektion auf z -Richtung $S_z = m_s \cdot \hbar \Rightarrow$ magnetische Spinmoment

$$\vec{\mu}_s = \gamma \cdot \vec{S}$$

γ ...gyromagnetisches Verhältnis - experimentell bestimmt.



Stern-Gerlach Effekt

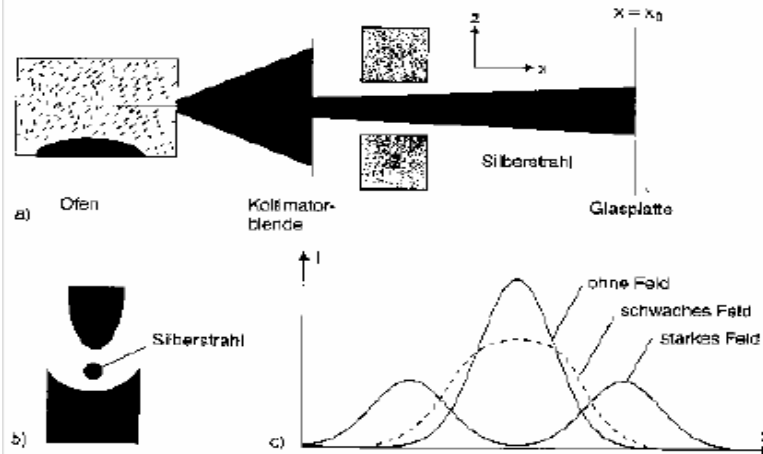


Abb. 5.15a-c. Stern-Gerlach-Versuch. (a) Versuchsaufbau; (b) Schnitt in der y-z-Ebene durch das inhomogene Magnetfeld; (c) Schwärzungsinintensität $I(z)$ auf der Glasplatte mit und ohne Magnetfeld

160

5. Das Wasserstoffatom

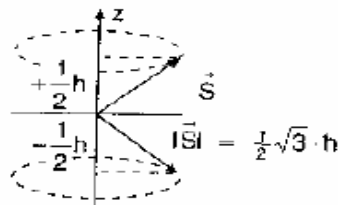


Abb. 5.16. Die beiden möglichen Einstellungen des Elektronenspins bezüglich der Magnetfeldrichtung (z-Richtung)

Mai 24, 2005

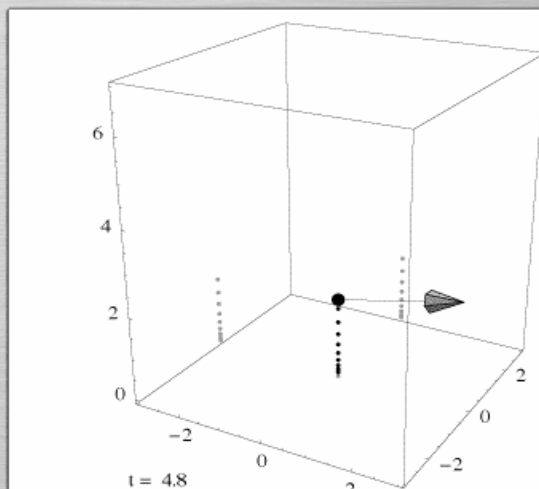
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

14



3.1. Inhomogeneous B-field

1: Neutral particle with magnetic moment



Topics

- 1: Neutral particle with magnetic moment
- 2: Acceleration in direction of field gradient
- 3: Realistic field: Force in two directions
- 4: Realistic field with a large z-component

Inhomogeneous magnetic field

2

(of 5)

Neutral particle with a magnetic moment.

The direction of the force is given by the direction in which the magnetic field increases. The axis of the precession is given by the direction of the magnetic field itself.

In this example, the particle gets uniformly accelerated in the z-direction. The trajectory of the particle is indicated by a series of points (stroboscopic images showing the particle's position after equal time steps). For better visibility, we also show the projections ("shadows") of the points on the bounding box. The magnetic field causes a constant acceleration in the vertical z-direction. The force is given by the gradient of the scalar product

$$\mu \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x})$$

at the position of the particle.

Here it is assumed that the vectorfield $\mathbf{B}$ points in the vertical direction, $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$. The function B_z is positive, depends only on the z-coordinate, and increases in the vertical direction. Hence the force is

$$\mathbf{F} = \nabla \mu \cdot \mathbf{B} = \mu_z \nabla B_z.$$

The uniform acceleration results from the choice $B_z = z + 1$, that is, $\nabla B_z = (0, 0, 1)$.

3.1.1.2

Mai 24, 2005

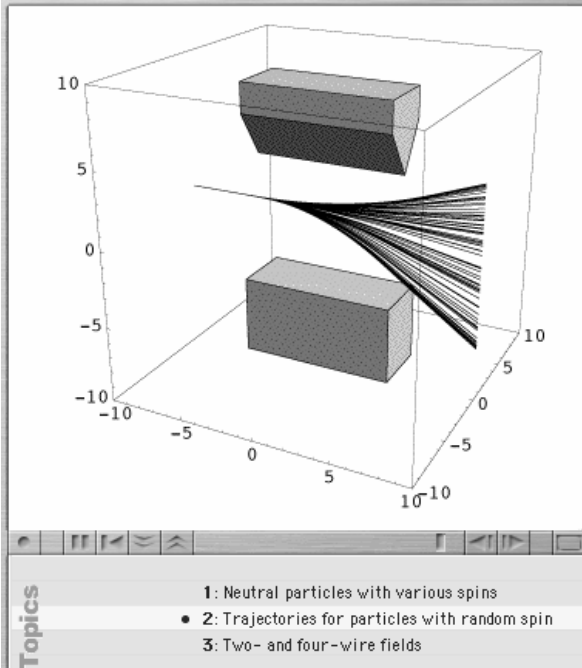
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

15



3.4. Stern-Gerlach - classical

2: Trajectories for particles with random spin



Classical Stern-Gerlach experiment – 2 1

(of 1)

Magnetic moments in various directions

The movie shows the paths through a Stern-Gerlach apparatus of an ensemble of classical particles with random directions of the magnetic moment.

Theoretical background: A collection of classical particles with randomly chosen directions of the magnetic moment are sent through the Stern-Gerlach apparatus described in CD 3.4.1. The inhomogeneity of the field applies a force depending on the direction of the magnetic moment. The magnetic field is designed in such a way that inside the apparatus the force only acts in the vertical direction. Thus the particles are deflected vertically from their initially straight path. With μ_z also the deflecting force is randomly distributed around 0.

The experiment was first carried out with a beam of silver atoms generated in a hot furnace. It can be expected that particles emerging from a furnace have randomly distributed magnetic moments. According to the classical model, this beam would become broader in the z -direction when sent through a Stern-Gerlach apparatus. Actually, the beam splits just into two components. This indicates that the component μ_z of the magnetic moment μ can actually assume only two values.

3.4.2.1

Mai 24, 2005

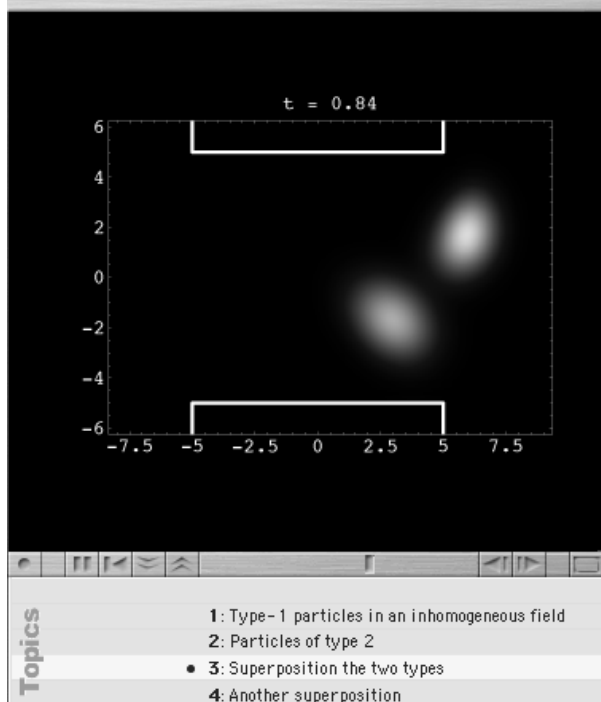
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

16



3.5. Stern-Gerlach experiment

3: Superposition of the two types



Wave packets in a Stern-Gerlach device 3

(of 4)

account, we write the state of a particle as a column vector,

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ (for type 1), and } \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \text{ (for type 2).}$$

Then a state of type 1, having only an upper component, is automatically orthogonal to a state of type 2, for which the upper component is zero.

According to the superposition principle, a superposition of two states is again a possible state of the system. Hence the states of type 1 and the states of type 2 can be superimposed. The result is a wave packet that splits into exactly two parts when it passes a Stern-Gerlach device. It can be described by the formula

$$\begin{pmatrix} a\psi_1 \\ b\psi_2 \end{pmatrix}.$$

The first component describes the behavior of a particle with positive μ_z , the second component describes the behavior of a particle with negative μ_z . CD 3.5.3 shows a superposition, where both parts have equal size. For CD 3.5.4 the part of type 1 is larger. In any case, the two parts individually behave like the wave packets in the movies CD 3.5.1 and CD 3.5.2.

3.5.1-4.3

Mai 24, 2005

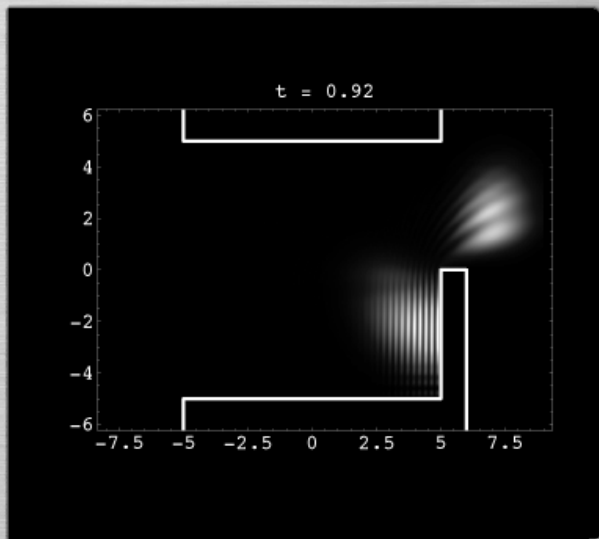
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



3.7. Stern-Gerlach filter

1: Preparing a spin-up wave packet



Topics

- 1: Preparing a spin-up wave packet
- 2: Preparing a spin-down wave packet

The Stern-Gerlach filtering device

1

(of 2)

Preparing a wave packet with spin-up/down.

A simple modification of the Stern-Gerlach experiment works as a state preparation procedure. By blocking the "wrong" path in the apparatus we can prepare a wave packet with spin-up or spin-down.

Description: Here the Stern-Gerlach experiment has been modified. One of the two possible "paths" of wave packets through the apparatus is blocked by an impenetrable obstacle. Only a wave packet with spin-up can pass the apparatus in [CD 3.7.1](#) in an essentially unperturbed way. A wave packet with spin-down is deflected downward and runs into the obstacle. (Similarly, a wave packet must have spin-down in order to fly through the apparatus in [CD 3.7.2](#).) If the initial state is a superposition of spin-up and -down, the wave packet will split into two parts. Only the part with the "right" spin emerges from the apparatus, the other part is reflected. No matter what the initial state is, we can be sure that whenever something emerges from the apparatus, it must have the corresponding spin direction.

3.7.1-2.1



Aus experimenteller Beobachtung der Aufspaltung der Ag-Atome in zwei Teilstrahlen folgt: es gibt nur zwei Spineinstellungen.

Es muß daher wegen $-s \leq m_s \leq +s$ und $\Delta m_s = \pm 1$ gelten

$$s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2$$

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot \hbar$$

Elektronen sind Teilchen mit Spin 1/2!!!

Gehorchen Fermistatistik!



Zusammenfassung aus Stern-Gerlach-Exp. an vielen Atomen

1. Es gibt eine Richtungsquantelung; die Atome haben nur diskrete Möglichkeiten, den Drehimpuls relativ zu einem Magnetfeld B einzustellen und behalten diese Einstellung im freien Raum bei (wie bei einem Kreisel).
2. Die Messwerte für atomare magnetische Momente sind wie folgt :

$$|\mu_Z| = m\mu_B, \quad -s \leq m_s \leq s \quad \text{für} \quad \text{Spinmagnetismus}$$

$$-l \leq m_L \leq l \quad \text{für} \quad \text{Bahnmagnetismus}$$
3. Für alle Atome, die als äußerstes Elektron ein s-Elektron haben, findet man die gleiche Aufspaltung in NUR 2 Strahlen.
 $\Rightarrow$ mechanische und magnetische Momente aller inneren Elektronen heben sich gegenseitig auf.
4. Ein s-Elektron hat den Bahndrehimpuls $\vec{l} = 0 \rightarrow \vec{\mu}_l = 0 \rightarrow$ nur Spinmagnetismus.



Vorlesung 13:

Roter Faden:

Spin-Bahn-Kopplung
 Vektormodell der Drehimpulse
 Relativistische Korrekturen
 Lambshift

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
 Springer-Verlag



Aufhebung der Entartung bei der Wasserstoff Balmer-Linie H_α

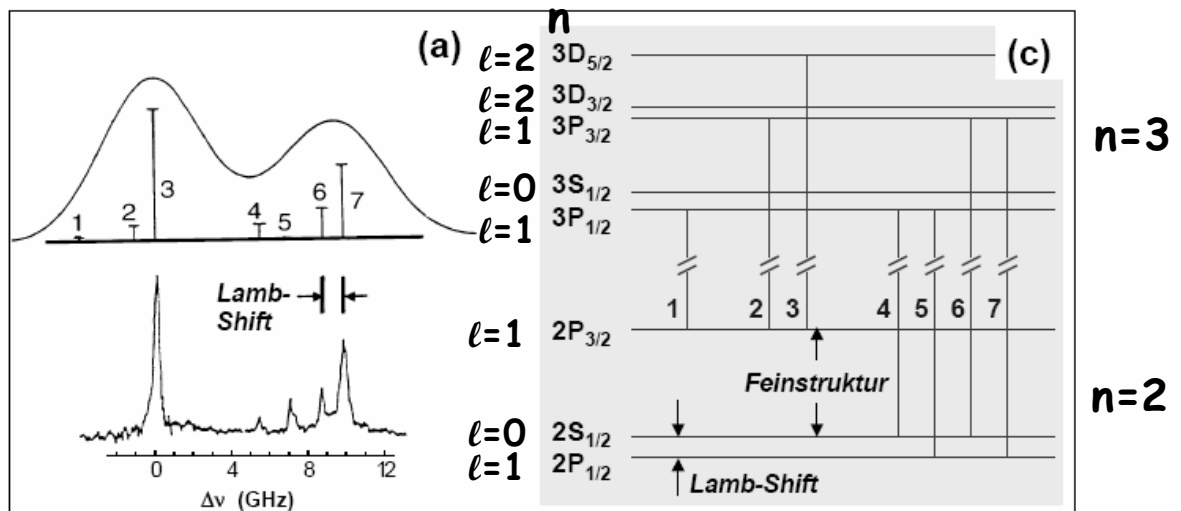


Abbildung 4.1: Feinstruktur der Balmer-Linie H_α gemessen mit (a) hochauflösender Spektroskopie und (b) mit höchstauflösender Laser-Spektroskopie. (c) Verfeinertes Termschema des Wasserstoffs. Die erlaubten Übergänge werden durch die Auswahlregeln bestimmt, die wir erst später diskutieren werden.

$n=2$: 4-fach Entartung in 3 Niveaus gespalten ohne externe Felder

$n=3$: 9-fach Entartung in 5 Niveaus gespalten ohne externe Felder



Magnetisches Moment

Das Drehmoment auf eine Leiterschleife durch die Lorentz-Kraft ist:

$$T = 2a \frac{b}{2} \sin \alpha I a b B$$

Mit dem Flächenvektor A :

$$\vec{T} = I \vec{A} \times \vec{B}$$

Analog zum elektrischen Dipol ist das magnetische Moment

$$\vec{p}_m = I \vec{A}$$

Also ist das Drehmoment

$$\vec{T} = \vec{p}_m \times \vec{B}$$

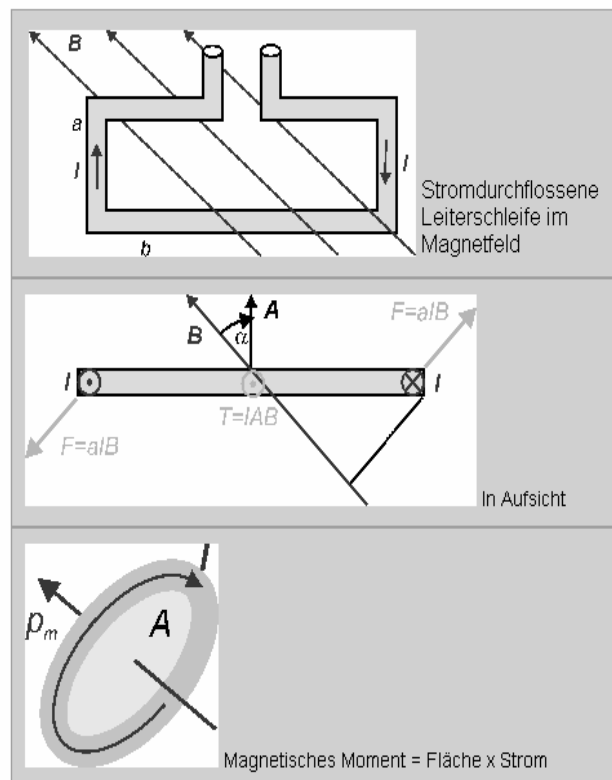
Magnetische Momente richten sich parallel zum Magnetfeld aus, das dadurch verstärkt wird.

Im inhomogenen Feld wirkt die Kraft (vgl. $\leftarrow$)

$$\vec{F} = (\vec{p}_m \cdot \nabla) \vec{B}$$

Eine Verkipfung bedeutet potentielle Energie

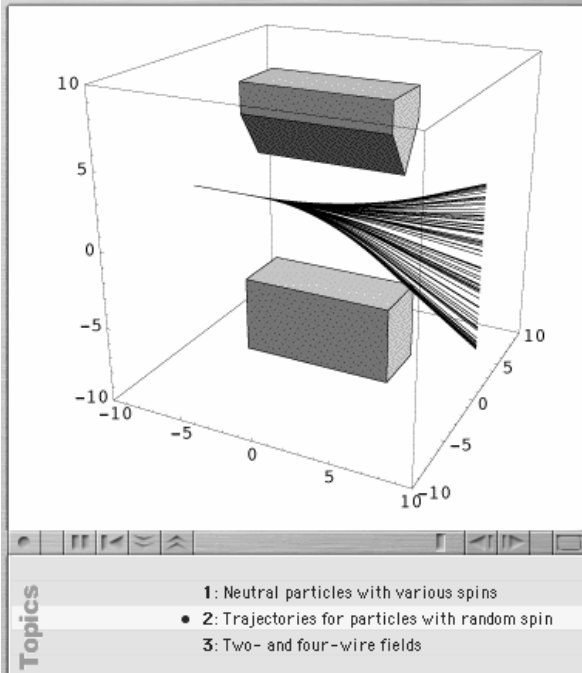
$$E_{\text{pot}} = -\vec{p}_m \cdot \vec{B}$$





3.4. Stern-Gerlach - classical

2: Trajectories for particles with random spin



Classical Stern-Gerlach experiment – 2 1

(of 1)

Magnetic moments in various directions

The movie shows the paths through a Stern-Gerlach apparatus of an ensemble of classical particles with random directions of the magnetic moment.

Theoretical background: A collection of classical particles with randomly chosen directions of the magnetic moment are sent through the Stern-Gerlach apparatus described in CD 3.4.1. The inhomogeneity of the field applies a force depending on the direction of the magnetic moment. The magnetic field is designed in such a way that inside the apparatus the force only acts in the vertical direction. Thus the particles are deflected vertically from their initially straight path. With μ_z also the deflecting force is randomly distributed around 0.

The experiment was first carried out with a beam of silver atoms generated in a hot furnace. It can be expected that particles emerging from a furnace have randomly distributed magnetic moments. According to the classical model, this beam would become broader in the z -direction when sent through a Stern-Gerlach apparatus. Actually, the beam splits just into two components. This indicates that the component μ_z of the magnetic moment μ can actually assume only two values.

3.4.2.1

Mai 31, 2005

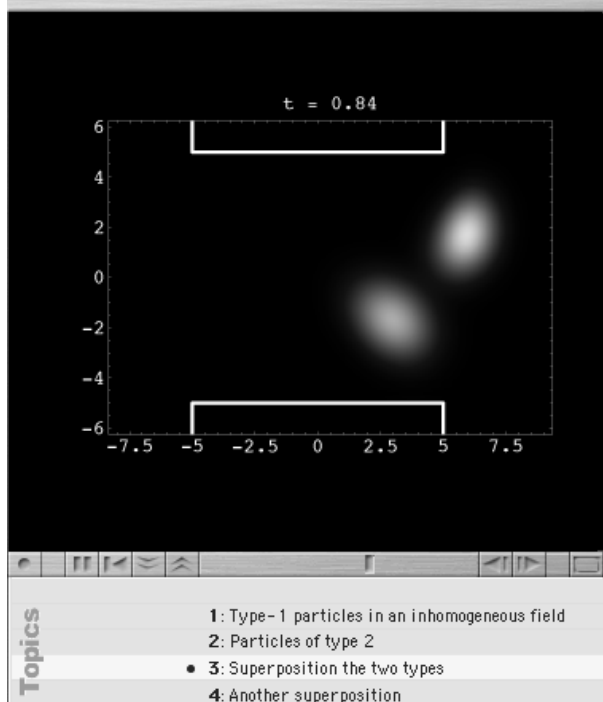
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

4



3.5. Stern-Gerlach experiment

3: Superposition of the two types



Wave packets in a Stern-Gerlach device 3

(of 4)

account, we write the state of a particle as a column vector,

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ (for type 1), and } \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \text{ (for type 2).}$$

Then a state of type 1, having only an upper component, is automatically orthogonal to a state of type 2, for which the upper component is zero.

According to the superposition principle, a superposition of two states is again a possible state of the system. Hence the states of type 1 and the states of type 2 can be superimposed. The result is a wave packet that splits into exactly two parts when it passes a Stern-Gerlach device. It can be described by the formula

$$\begin{pmatrix} a\psi_1 \\ b\psi_2 \end{pmatrix}.$$

The first component describes the behavior of a particle with positive μ_z , the second component describes the behavior of a particle with negative μ_z . CD 3.5.3 shows a superposition, where both parts have equal size. For CD 3.5.4 the part of type 1 is larger. In any case, the two parts individually behave like the wave packets in the movies CD 3.5.1 and CD 3.5.2.

3.5.1-4.3

Mai 31, 2005

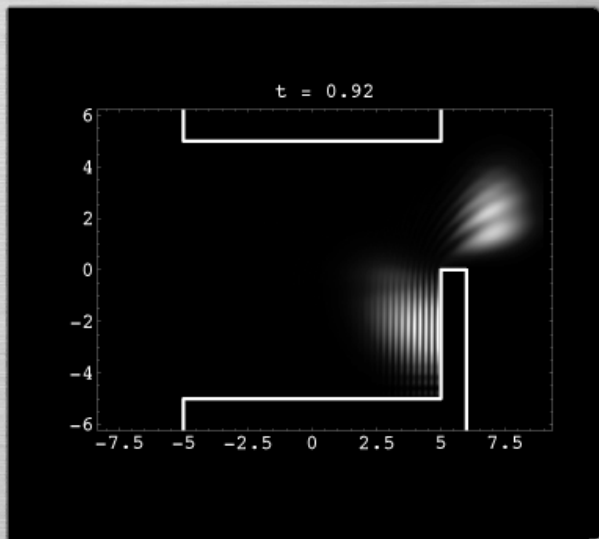
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

5



3.7. Stern-Gerlach filter

1: Preparing a spin-up wave packet



Topics

- 1: Preparing a spin-up wave packet
- 2: Preparing a spin-down wave packet

The Stern-Gerlach filtering device

1

(of 2)

Preparing a wave packet with spin-up/down.

A simple modification of the Stern-Gerlach experiment works as a state preparation procedure. By blocking the "wrong" path in the apparatus we can prepare a wave packet with spin-up or spin-down.

Description: Here the Stern-Gerlach experiment has been modified. One of the two possible "paths" of wave packets through the apparatus is blocked by an impenetrable obstacle. Only a wave packet with spin-up can pass the apparatus in [CD 3.7.1](#) in an essentially unperturbed way. A wave packet with spin-down is deflected downward and runs into the obstacle. (Similarly, a wave packet must have spin-down in order to fly through the apparatus in [CD 3.7.2](#).) If the initial state is a superposition of spin-up and -down, the wave packet will split into two parts. Only the part with the "right" spin emerges from the apparatus, the other part is reflected. No matter what the initial state is, we can be sure that whenever something emerges from the apparatus, it must have the corresponding spin direction.

3.7.1-2.1



Aus experimenteller Beobachtung der Aufspaltung der Ag-Atome in zwei Teilstrahlen folgt: es gibt nur zwei Spineinstellungen.

Es muß daher wegen $-s \leq m_s \leq +s$ und $\Delta m_s = \pm 1$ gelten

$$s = 1/2 \Rightarrow m_s = \pm 1/2$$

$$|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{1}{2} \sqrt{3} \cdot \hbar$$

Elektronen sind Teilchen mit Spin 1/2!!!

Gehorchen Fermistatistik!



Zusammenfassung Spin des Elektrons

Eigenschaften des Elektrons:

- Spinquantenzahl $s=1/2$
- innerer Drehimpuls (Spin) $S = (s(s+1))^{1/2}$
- magnetische Spinquantenzahl $m_s = \pm 1/2$

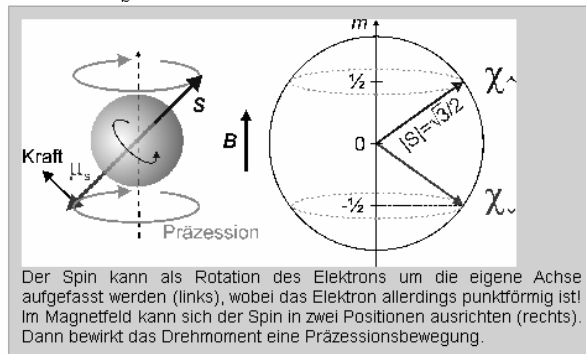
Magnetisches Moment des Elektrons

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \vec{S} = -g_s \mu_B \vec{S} / \hbar$$

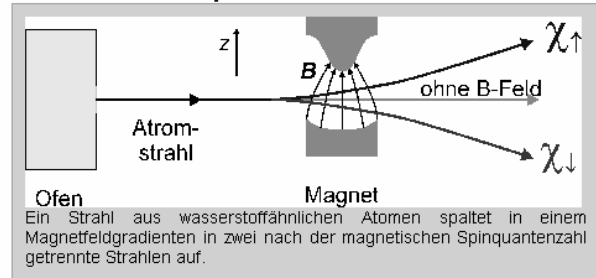
mit dem G-Faktor $g_s = 2.0024$

Die Wellenfunktion des Elektrons im H-Atom wird um den Spinanteil χ ergänzt, die nur 2 Werte annimmt

$$\psi_{nlm m_s} = R_{nl} Y_l^m \chi_{m_s}$$



Stern-Gerlach-Experiment



Erklärung

auf magnetisches Moment wirkt die Kraft

$$F_z = -\mu_z \frac{dB}{dz} = g_s \frac{e m_s \hbar}{m_e} \frac{dB}{dz}$$

dies führt zur Ablenkung des Strahls in Abhängigkeit von der magnetischen Spinquantenzahl.

Im Magnetfeld erzeugt das magnetische Moment ein Drehmoment, das wie beim Kreisel zu einer Präzessionsbewegung mit der Larmor-Frequenz führt:

$$\omega_L = \frac{\vec{p}_m \times \vec{B}}{L_z} = \frac{p_m B}{L} = \frac{\mu_s B}{S} = \frac{2g_s}{\hbar} B$$



Zusammenfassung aus Stern-Gerlach-Exp. an vielen Atomen

1. Es gibt eine Richtungsquantelung; die Atome haben nur diskrete Möglichkeiten, den Drehimpuls relativ zu einem Magnetfeld B einzustellen und behalten diese Einstellung im freien Raum bei (wie bei einem Kreisel).

2. Die Messwerte für atomare magnetische Momente sind wie folgt :

$$|\mu_z| = m \mu_B, \quad -s \leq m_s \leq s \quad \text{für Spinmagnetismus}$$

$$-l \leq m_l \leq l \quad \text{für Bahnmagnetismus}$$

3. Für alle Atome, die als äußerstes Elektron ein s -Elektron haben, findet man die gleiche Aufspaltung in NUR 2 Strahlen.
 $\Rightarrow$ mechanische und magnetische Momente aller inneren Elektronen heben sich gegenseitig auf.

4. Ein s -Elektron hat den Bahndrehimpuls $\vec{l} = 0 \rightarrow \vec{\mu}_l = 0 \rightarrow$ nur Spinmagnetismus.

Verhältnis magnetisches Moment zu mechanischen Drehimpuls ist für Spin doppelt so groß als für Bahndrehimpuls!

Man schreibt analog zu $\vec{\mu}_l = (\mu_B / \hbar) \cdot \vec{l}$

$$\vec{\mu}_s = -g_s (\mu_B / \hbar) \cdot \vec{S}$$

$g_s \approx 2$ "Lande-Faktor"

$g_s=2$ kann nur aus relat. Dirac Wellengleichung hergeleitet werden. Exp. Bestätigung durch Einstein-de Haas-Effekt (kommt später)



Spin-Bahn-Kopplung V_{LS}

$\vec{\mu}_l$ und $\vec{\mu}_s$ beeinflussen einander $\Rightarrow$ Feinstruktur der Spektrallinien durch Spin-Bahn oder $\vec{L} - \vec{S}$ -Kopplung.

$\vec{\mu}_l$ erzeugt ein B-Feld B_l am Ort des Elektrons. Die Potentielle Energie lautet hierbei : $V_{l,s} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l$ (1)

$$V_{pot} = \int D d\alpha = \int \vec{\mu} \times \vec{B} d\alpha = \int |\mu| |B| \sin \alpha d\alpha \equiv |\mu| |B| \cos \alpha = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Aus der relativistischen Elektrodynamik ($\equiv$ Biot - Savart $\times \frac{1}{2}$) folgt :

$$\vec{B}_l = \frac{Ze\mu_0 \vec{l}}{8\pi r^3 m_0} = O(1T) \text{ für } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ Å} \equiv 10^{-10}m \text{ (2)}$$

(2) in (1) :

$$V_{l,s} = \frac{a}{\hbar^2} |l| |s| \cos(\vec{l}, \vec{s}) \approx 10^{-4} eV \text{ für } Z = 1 \text{ und } r = 1 \text{ Å (3)}$$

$$a \equiv \frac{Ze^2 \mu_0 \hbar^2}{8\pi r^3 m_0^2}$$

Wie groß ist $|l| |s| \cos(\vec{l}, \vec{s})$?



Satz von Biot-Savart

Dient zur Berechnung des Magnetfeldes einer beliebigen Stromverteilung.

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{j} \times (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV'$$

Bei praktischen Anwendungen zerlegt man Spulen in dünne Drähte über die man integriert.

Mit $dV = dA dl$ und $I = Aj$ folgt daraus das

Gesetz von Biot-Savart

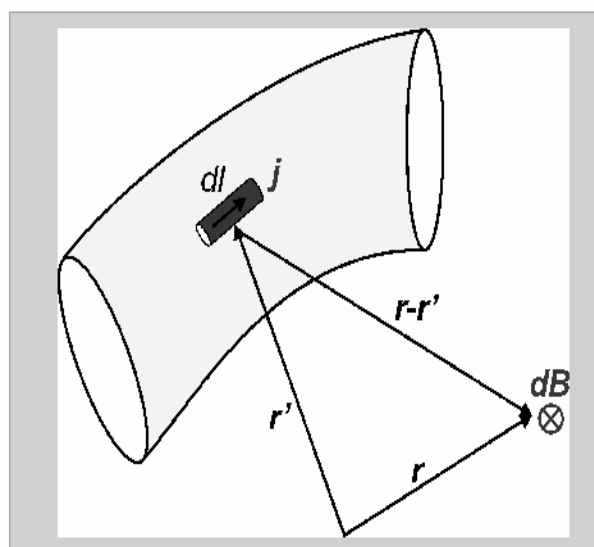
$$\vec{B} = -\frac{\mu_0 I}{4\pi} \int \frac{(\vec{r} - \vec{r}') \times d\vec{l}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}$$

Äquivalent ist die Berechnung des Vektorpotentials

$$\text{rot} \vec{A} = \vec{B} \quad \text{div} \vec{A} = 0$$

Oder differentiell

$$\nabla \times \nabla \times \vec{A} = \Delta \vec{A} = \mu_0 \vec{j}$$



Das Magnetfeld folgt aus dem Vektorpotential über

$$\vec{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{j}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV'$$



Vektormodell der Spin-Bahn-Kopplung

VEKTORMODELL : $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ (zuerst für ein Elektron)

Mathe : $a^2 = b^2 + c^2 + 2bc \cos \alpha$ ergibt mit
$$\begin{cases} a^2 = j(j+1)\hbar^2 \\ b^2 = l(l+1)\hbar^2 \\ c^2 = s(s+1)\hbar^2 \end{cases}$$

$\Rightarrow \frac{l|s|}{\hbar^2} \cos \alpha = \frac{a^2 - b^2 - c^2}{2} \rightarrow \underline{aus (3)} :$

$$V_{l,s} = \frac{a}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

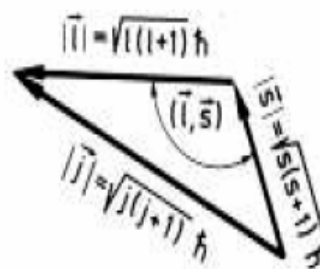
Bisher hat man so gerechnet, als ob sich das Elektron auf festen Bahnen bewegt. In der Quantenmechanik geht man davon aus, dass es keine festen Bahnen gibt, daher ersetzt man $\frac{1}{r^3}$ durch den Mittelwert

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \int \frac{|\Psi|^2}{r^3} dV \rightarrow a \propto \frac{Z}{n^3} \propto \frac{Z^4}{n^3}$$

Die $\vec{L} - \vec{S}$ Kopplung ist wichtig für große Z und kleine n.

Bei mehreren Elektronen :
$$\begin{aligned} \vec{L} &= \sum \vec{l}_i \\ \vec{S} &= \sum \vec{s}_i \\ \vec{J} &= \vec{L} + \vec{S} \end{aligned}$$

Beispiel: Die berühmten Natrium D-Linien werden durch eine $\vec{L} - \vec{S}$ Kopplung in Dublett-Niveaus gespalten.



Zusammenfassung Bohrscher Atommodell

Elektron bew. sich auf Kreisbahnen um Kern.

Radien gequantelt - nehmen quadratisch mit Quantenzahl n zu.

$$r_n = \frac{n^2}{Z} a_0 = \frac{n^2 \hbar^2 \epsilon_0}{\pi \mu Z e^2}$$

Radien verkehrt prop zu Kernladung Z.e

Vorsicht:

Drehimpuls im Bohrschen Modell schlicht FALSCH, weil Elektron sich nicht auf "Bahnen" bewegt, sondern die AW sich aus SG ergibt

Zu Quantenbahn charakterisiert durch Quantenzahl n - def. negative Gesamtenergie

$$E = -Ry^* \cdot \frac{Z^2}{n^2} \text{ bzw. } E_{pot} = 2E \text{ und } E_{kin} = -E$$

Als Energienullpunkt gewählt Ionisierungsgrenze ($n \rightarrow \infty$), ($r \rightarrow \infty$)

Absorption von Licht mit Frequenz ν mit $h\nu = E_k - E_i$ von E_i in E_k bei Emission von E_k in E_i .



Vektormodell für $J=L+S$

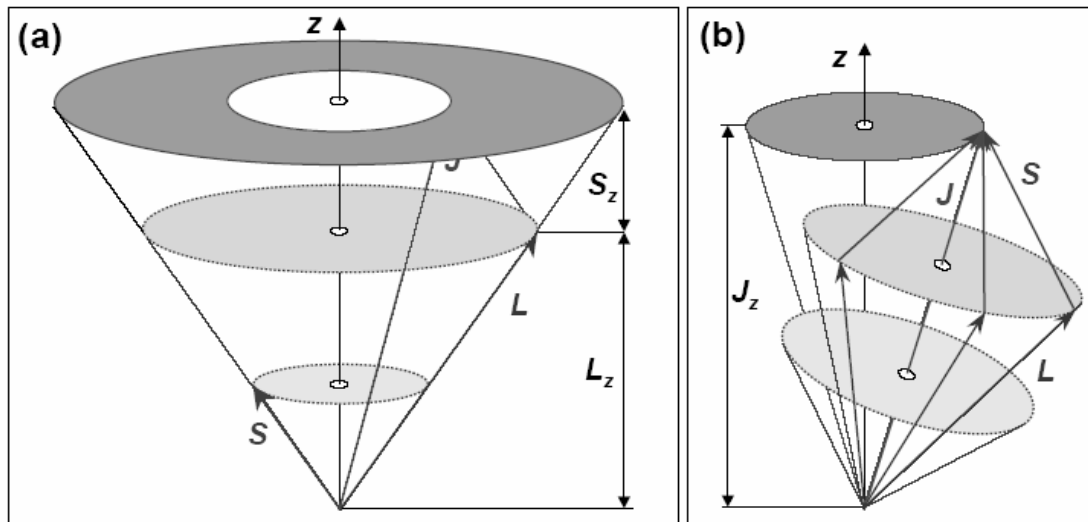


Abbildung 4.3: Vektormodell der Kopplung des Bahndrehimpulses $\mathbf{L}$ und des Spins $\mathbf{S}$ zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$. In (a) ist der Zustand charakterisiert durch die Quantenzahlen (m, l, s, m_s) und ist damit Eigenzustand zu den Operatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{L}_z$ und $\hat{S}_z$. Im Vektormodell kommt dies dadurch zum Ausdruck, dass sowohl $\mathbf{L}$ als auch $\mathbf{S}$ um die z -Achse präzedieren. J^2 ist damit nicht definiert, wohl aber J_z , d.h. der Gesamtdrehimpuls besitzt eine feste Projektion auf die z -Achse. In (b) präzedieren sowohl $\mathbf{L}$ als auch $\mathbf{S}$ um die Richtung des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J}$. Damit ist weder die Projektion von $\mathbf{L}$ noch von $\mathbf{S}$ auf die z -Achse fest, d.h. m und m_s sind keine guten Quantenzahlen mehr. Hingegen ist die Projektion von $\mathbf{J}$ auf die z -Achse fest. Der Zustand kann also durch die Quantenzahlen (j, m_j, l, s) charakterisiert werden.



Aufspaltung der Energieniveaus durch Spin-Bahn-Kopplung

Berechnung der Aufspaltung für $s = \frac{1}{2}$, $L = 1 \Rightarrow$

$$J = \frac{3}{2} : V_{L,S} = \frac{a}{2} \left[\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - 1(1+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] = \frac{a}{2}$$

$$J = \frac{1}{2} : V_{L,S} = \frac{a}{2} \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - 1(1+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] = -a$$

Summenregel: mittlere Spaltung der LS-Kopplung = 0

oder $\sum (2j+1) \times V_{L,S} = 0$

Hier: $4 \times a/2 + 2 \times (-a) = 0$



QZ sind $|n, j, m_j, s, l\rangle$ statt $|n, l, m_l, m_s\rangle$

$$E_{n,l,s} = E_n + \Delta E_{LS} = E_n + \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3} \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(r) + \Gamma(r) (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})$$

Es gilt nun die Eigenfunktionen von $\hat{H}$ zu finden. Mit dem Kopplungsterm sind die Funktionen $\Gamma(r) = \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_e^2 r^3}$ $|n, l, m_l, m_s\rangle$ sicherlich keine Eigenfunktionen von $\hat{H}$, da $[\hat{S}_z, \hat{H}] = \Gamma(r) [\hat{S}_z, (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})] \neq 0$.

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{H}] &= \Gamma(r) [\hat{L}_z, (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}})] \\ &= \Gamma(r) [\hat{L}_z, (\hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z)] \\ &= i\hbar \Gamma(r) \{\hat{L}_y \hat{S}_x - \hat{L}_x \hat{S}_y\} \neq 0 \end{aligned}$$

Durch die Kopplung von $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ zu $\mathbf{J}$ sind aber die Projektionen von $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ auf die z -Achse nicht mehr fest und somit L_z und S_z keine Erhaltungsgrößen mehr. Im freien Atom verlieren also $\mathbf{S}$ und $\mathbf{L}$ ihre Bedeutung, da sie um $\mathbf{J}$ präzedieren und somit nicht mehr stationär sind. Das Drehimpulsverhalten wird durch $\mathbf{J}$ mit seinen Quantenzahlen j und m_j bestimmt.

Die Werte l und s behalten dagegen ihre Gültigkeit als gute Quantenzahlen bei, da $[\hat{L}^2, \hat{H}] = [\hat{S}^2, \hat{H}] = 0$

$$[\hat{J}^2, \hat{H}] = [\hat{L}^2, \hat{H}] + 2[(\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}), \hat{H}] + [\hat{S}^2, \hat{H}] = 0 \quad [\hat{J}_z, \hat{H}] = 0$$

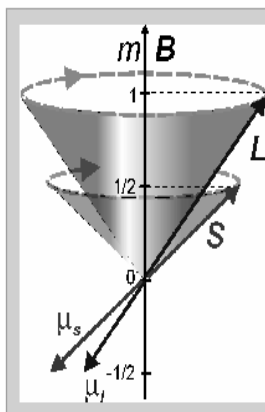
Damit ergibt sich ein neuer Satz von Quantenzahlen n, j, m_j, s, l (Quantenzahlen bei Spin-Bahn-Kopplung)



Paschen-Back-Effekt

Bei sehr starken Magnetfeldern wird die LS-Kopplung überwunden.

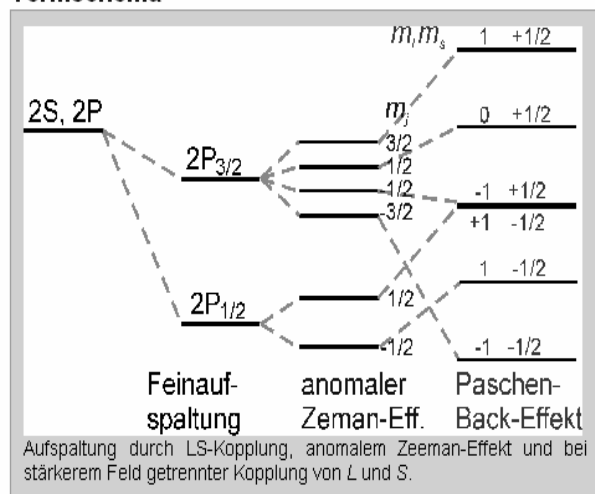
$\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ koppeln dann unabhängig voneinander an das externe Magnetfeld.



Dies führt zu der Energieaufspaltung

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

Termschema





Relativistische Korrekturen

Elektronen bewegen sich "relativistisch" um Kern.

Nicht relativistische Energieformel: $E = p^2/2m + E_{pot}$

Relativistischer Energiesatz: $E = c \cdot \sqrt{m_0^2 c^2 + p^2} - m_0 c^2 + E_{pot}$

Reihenentwicklung: $\sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} = 1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_0^4 c^4} + \dots$

Es ergibt sich: $E = \left(\frac{p^2}{2m_0} + E_{pot} \right) - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + \dots = E_{nr} - \Delta E_r$

Für $E_{kin} \ll m_0 c^2 \Rightarrow \frac{p^2}{2m_0^2 c^2} \ll 1$

Erwartungswert der relativistischen Energiekorrektur mit
 $p = -i\hbar \nabla$:

$$\Delta E_r = \frac{\hbar^4}{8m_0^3 c^2} \int \Psi_{n,l,m}^* \nabla^4 \Psi_{n,l,m} d\tau$$



Relativistische Korrekturen

Energieverschiebung $\Delta E_r = \frac{E_{nr} Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+1/2} \right)$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = 7,297353 \cdot 10^{-3} \approx \frac{1}{137}$$

"Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante"

Beschreibt auch Stärke der elektromagnetischen Wechselwirkung.

Gesamtenergie eines Zustands (n,l):

$$E_{n,l} = -Ry \frac{Z^2}{n^2} \left[1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+1/2} \right) \right]$$

Relativistische Korrektur hängt von n und l ab.

Sie ist am größten für den Grundzustand $n = 1 \quad l = 0$

Relativistische Korrektur hebt Entartung der Zustände (n,l) auf.

n=1, l=0 d.h. radiale Bahnen, relat. Massenzunahme am größten



Feinstrukturkonstante entspricht v/c für erste Bahn im Bohrschen Atommodell

Kräfte

Aus
$$\frac{\mu \cdot v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$$

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \mu v^2}$$

Stehende Welle

$$2\pi \cdot r = n \cdot \lambda_D$$

de Broglie

$$mv = h/\lambda = h/2\pi r \Rightarrow$$

$$v/c = \hbar/mrc = e^2/4\pi\epsilon_0 \hbar c = \alpha$$



Nomenklatur

Abkürzung zur vollständigen Bezeichnung eines Atomzustandes

$(n, l, m) \rightarrow \text{Termsymbol}$

$$n^{2s+1}X_j$$

X steht für S($l = 0$), P($l = 1$), D($l = 2$), F($l = 3$) und G($l = 4$)

linkere obere Index: **Multiplizität** ($2s + 1$)

gibt für $l \neq 0$ Zahl der Feinstrukturkomponenten

System mit nur einem Elektron: $s = 1/2$ $2s+1=2$

Rechte untere Index: Quantenzahl j mit $j = l + s$



Zusammenfassung der Feinstruktur

1. für s-Terme gilt : $\vec{l} = 0 \rightarrow \vec{j} = \vec{s} \rightarrow V_{L,S} = 0$
2. Niveaus mit größeren QZ j sind energetisch höher
3. $V_{L,S} \propto Z^4 \rightarrow$ daher ist $V_{L,S}$ sehr klein beim Wasserstoff $\Delta E \approx 0,33^{-1} \text{ cm} \approx$
(mit $E = \bar{\nu} h c, \bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = \text{Wellenzahl}$) $\approx 4,10^{-5} \text{ eV}$ bei H_{α} , $1 \text{ eV} = 8066 \text{ cm}^{-1}$
4. Bei Alkali-Atomen ist $V_{L,S}$ jedoch sichtbar :
 $\Delta E = 17,2^{-1} \text{ cm} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ eV} = 6 \text{ \AA}$ bei Na-D-Linien

Da die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms exakt bestimmt ist, ist eine exakte Berechnung der Feinstruktur erlaubt.

$$E_{n,l,j} = E_{n,l} + E_{rel.} + E_{l,s}$$

Vollständige Berechnung von Dirac:

$$E_{FS} = -\frac{E_n \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) Z^2$$

$$\left[\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \right]$$

Dies entspricht der Sommerfeldschen Berechnung von $E_{rel.}$, wenn man l durch j ersetzt.

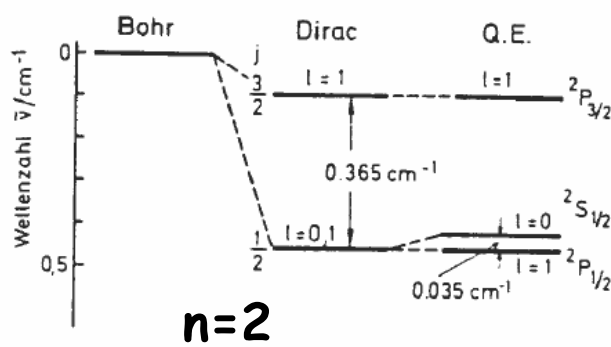
Bemerkenswert:

$$\begin{aligned} E_{rel} &= \text{abh. von } l \\ E_{l,s} &= \text{abh. von } j, l, s \\ E_{FS}^{Dirac} &= \text{abh. von } j \end{aligned}$$



Energieniveaus in Wasserstoff nach Dirac

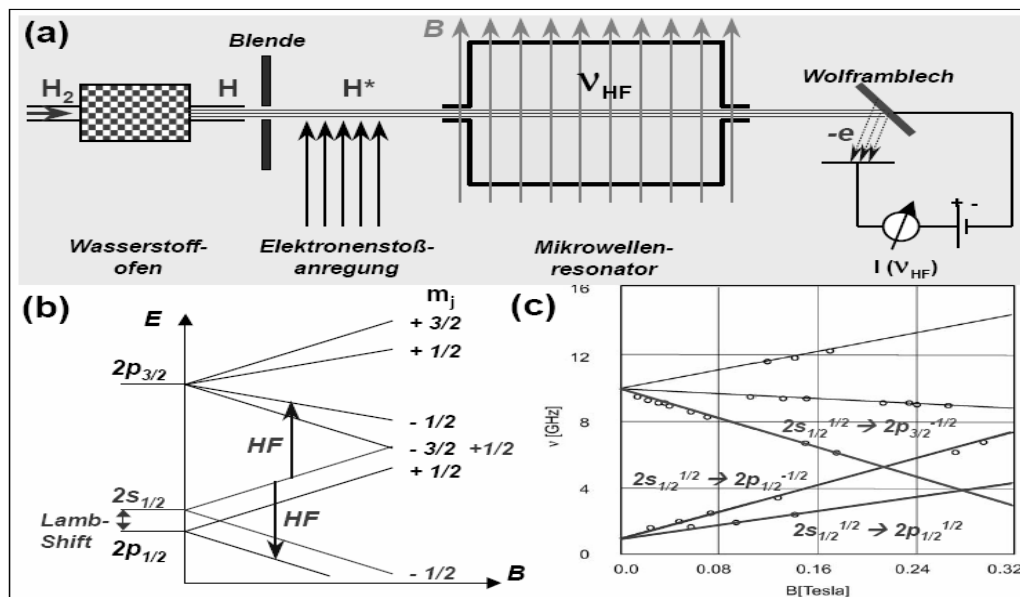
n	l	j	$2S+1 L_J$	
1	0	1/2	$1^2 S_{1/2}$	
2	0	1/2	$2^2 S_{1/2}$	} entartet
2	1	1/2	$2^2 P_{1/2}$	
2	1	3/2	$2^2 P_{3/2}$	
3	0	1/2	$3^2 S_{1/2}$	} entartet
3	1	1/2	$3^2 P_{1/2}$	
3	1	3/2	$3^2 P_{3/2}$	} entartet
3	2	3/2	$3^2 D_{3/2}$	
3	2	5/2	$3^2 D_{5/2}$	



Problem: bei Wasserstoff Aufspaltung von $2S_{\frac{1}{2}}$ and $2P_{\frac{1}{2}}$
(entdeckt von Lamb und Retherford) Erklärung: Vakuumpol.



Lamb-Retherford-Experiment



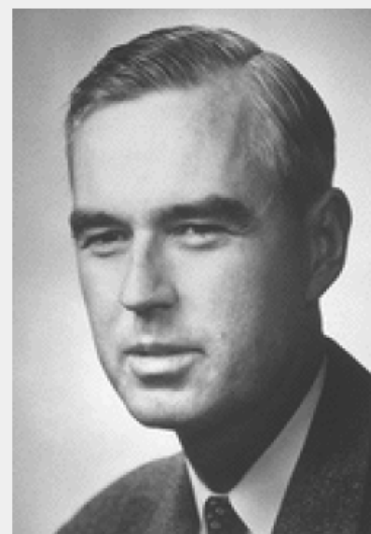
Willis Eugene Lamb (geb. 1913), Nobelpreis für Physik 1955:

Willis Eugene Lamb wurde am 12. Juli 1913 in Los Angeles geboren.

Er begann 1930 sein Studium an der University of California at Berkeley und erhielt dort 1934 den Bachelor of Science in Chemie. Im Jahr 1938 erhielt er an der gleichen Universität seinen Dokortitel. Seine Doktorarbeit über die Analyse der elektromagnetischen Eigenschaften von Kernsystemen wurde von J.R. Oppenheimer betreut.

Nach seiner Doktorarbeit ging er an die Columbia University und wurde dort 1945 Assistant Professor, 1947 Associate Professor und 1948 schließlich Full Professor. Von 1943 bis 1951 war er auch mit dem Columbia Radiation Laboratory assoziiert, wo er seine mit dem Nobelpreis ausgezeichneten Arbeiten machte. 1951 ging er an die Stanford University als Professor für Physik. Von 1953-1954 war er Morris Loeb Lecturer an der Harvard University. Von 1956 bis 1962 war er Fellow of New College and Wykeham Professor of Physics an der University of Oxford, England. 1962 wurde er Henry Ford II Professor of Physics an der Yale University, New Haven, Conn.

Im Jahr 1953 erhielt er den Rumford Premium der American Academy of Arts and Sciences. Die University of Pennsylvania verlieh ihm einen Ehrendoktor im Jahr 1954. Er erhielt ferner 1955 den Research Corporation Award. Er ist Mitglied in einer Zahl von National Academy of Sciences und Fellow der American Physical Society.





H-Atom mit L.S-Kopplung+ rel. Korr.

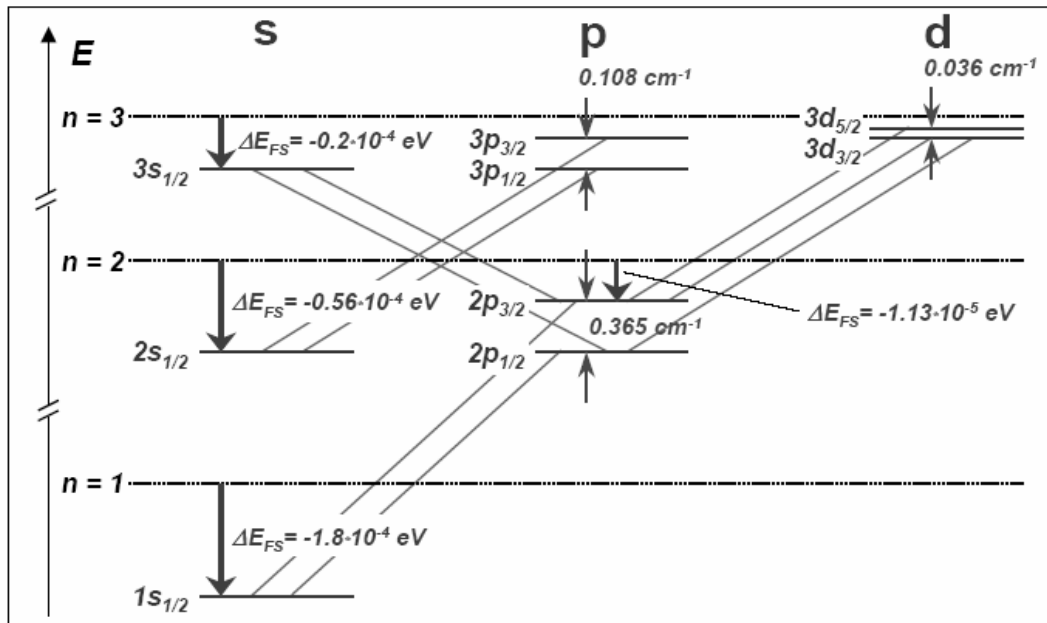


Abbildung 4.4: Termschema des Wasserstoffatoms bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der relativistischen Massenzunahme. Die gestrichelten Linien geben die Lage der Energieniveaus E_n ohne die Korrekturterme an.



Lamb-shift durch Vakuumpolarisation

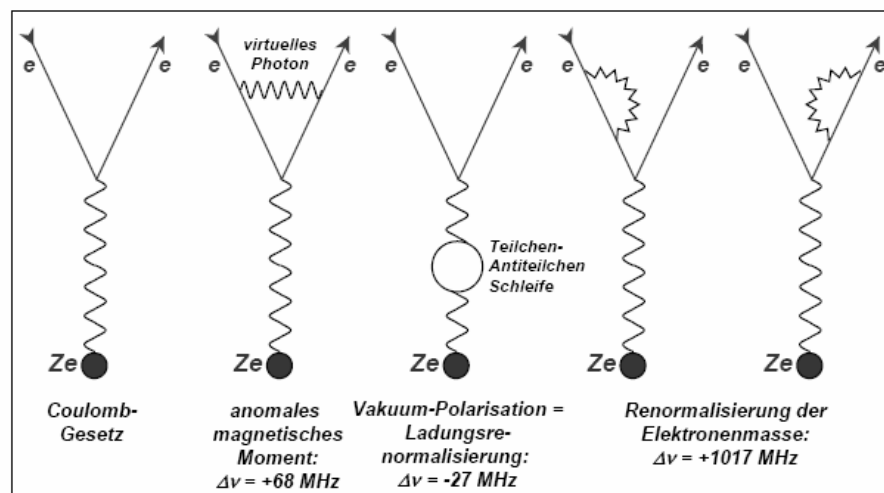


Abbildung 4.5: Feynman-Diagramme, die zur Streuung eines Elektrons an einer statischen Ladung beitragen. Das linke Diagramm entspricht dem uns vertrauten Coulomb-Gesetz. Die weiteren Diagramme sind von der Ordnung α^2 und ziehen eine Renormalisierung des magnetischen Moments, der Ladung und der Masse nach sich. Die Frequenzangaben zu den Diagrammen beziehen sich auf den jeweiligen Beitrag zur Verschiebung des $2s_{1/2}$ - gegenüber dem $2p_{1/2}$ -Niveau. Die Lamb-Verschiebung kann experimentell auf 0.1 MHz genau vermessen werden. Dies erlaubt es, die Beiträge der einzelnen Diagramme getrennt zu verifizieren. Dabei werden Diagramme höherer als der gezeigten Ordnung (2-Schleifen-Beiträge) von Bedeutung. Die eigentliche Grenze bei der theoretischen Vorhersage des Termschemas stellt der nicht exakt behandelbare Einfluss der Protonenstruktur auf die Elektronenfrequenzen dar.



Lambshift durch Vakuumpolarisation

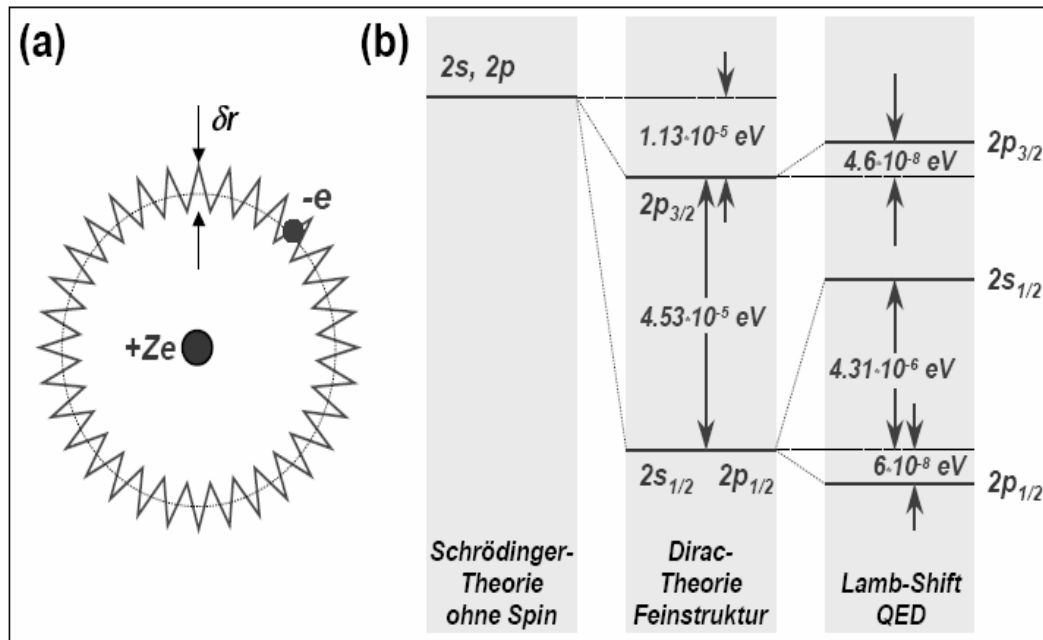


Abbildung 4.6: (a) Zur Veranschaulichung der Zitterbewegung eines Elektrons aufgrund der Emission und Absorption von virtuellen Photonen. (b) Feinstruktur und Lamb-Verschiebung beim Wasserstoffniveau mit $n = 2$.



Zum Mitnehmen

Stern-Gerlach Exp. zeigt Quantisierung der Drehimpulse

Elektronen besitzen halbzahligen Spin mit g -Faktor = 2, d.h. Eigendrehimpuls ist zweimal so effektiv als Bahndrehimpuls um magnetisches Moment zu erzeugen (klassisch nicht erklärbar, folgt jedoch aus relativ. Wellen-Gleichung für Fermionen (DIRAC-Gleichung))

Feinstruktur der Spektrallinien im Wasserstoff durch:

**Spin-Bahn-Kopplung
relativistische Korrekturen
Vakuumpolarisation (Lambshift)**



Vorlesung 14:

Roter Faden:

Wiederholung

Lambshift

Hyperfeinstruktur

Einstein-de Haas-Effekt

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch:

<http://www.uni-stuttgart.de/ipf/lehre/online-skript/>

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

1



Aufhebung der Entartung bei der Wasserstoff Balmer-Linie H_α

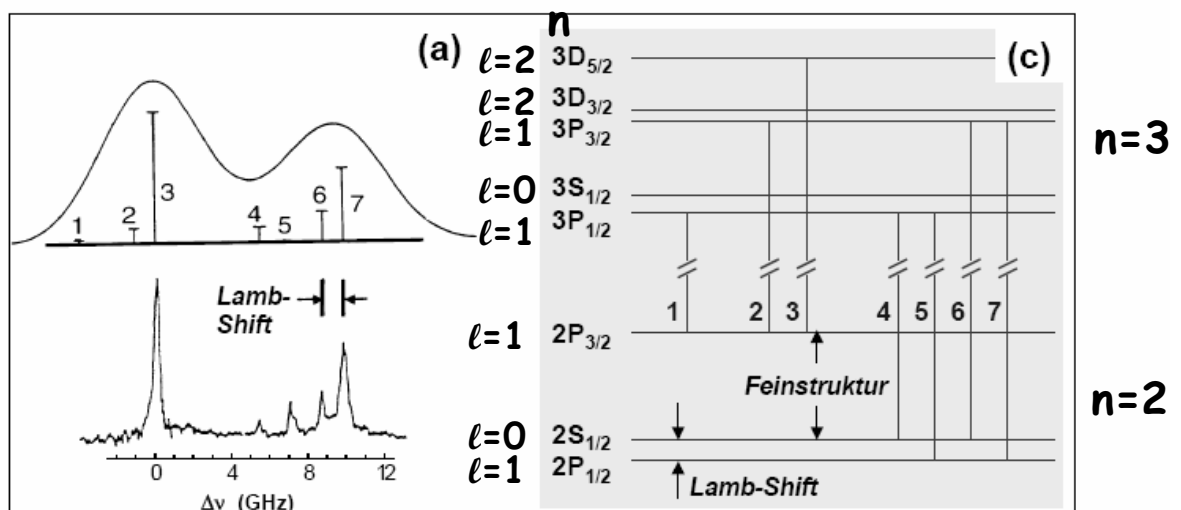


Abbildung 4.1: Feinstruktur der Balmer-Linie H_α gemessen mit (a) hochauflösender Spektroskopie und (b) mit höchstauflösender Laser-Spektroskopie. (c) Verfeinertes Termschema des Wasserstoffs. Die erlaubten Übergänge werden durch die Auswahlregeln bestimmt, die wir erst später diskutieren werden.

$n=2$: 4-fach Entartung in 3 Niveaus gespalten ohne externe Felder

$n=3$: 9-fach Entartung in 5 Niveaus gespalten ohne externe Felder

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



Zusammenfassung Spin des Elektrons

Eigenschaften des Elektrons:

- Spinquantenzahl $s=1/2$
- innerer Drehimpuls (Spin) $S = (s(s+1))^{1/2}$
- magnetische Spinquantenzahl $m_s = \pm 1/2$

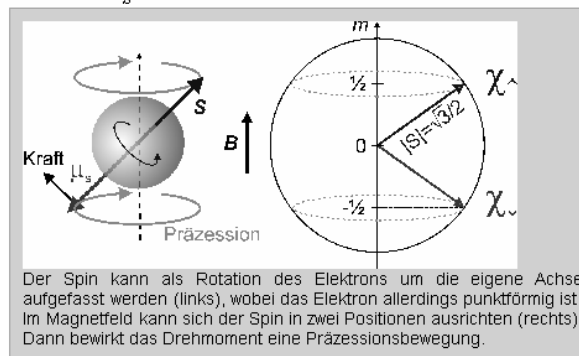
Magnetisches Moment des Elektrons

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \vec{S} = -g_s \mu_B \vec{S} / \hbar$$

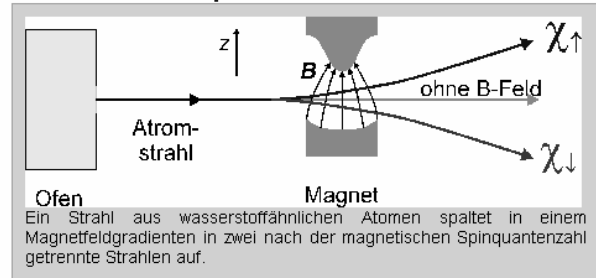
mit dem G-Faktor $g_s = 2.0024$

Die Wellenfunktion des Elektrons im H-Atom wird um den Spinanteil χ ergänzt, die nur 2 Werte annimmt

$$\psi_{nlm m_s} = R_{nl} Y_l^m \chi_{m_s}$$



Stern-Gerlach-Experiment



Erklärung

auf magnetisches Moment wirkt die Kraft

$$F_z = -\mu_z \frac{dB}{dz} = g_s \frac{e m_s \hbar}{m_e} \frac{dB}{dz}$$

dies führt zur Ablenkung des Strahls in Abhängigkeit von der magnetischen Spinquantenzahl.

Im Magnetfeld erzeugt das magnetische Moment ein Drehmoment, das wie beim Kreisel zu einer Präzessionsbewegung mit der Larmor-Frequenz führt:

$$\omega_L = \frac{\vec{p}_m \times \vec{B}}{L_z} = \frac{p_m B}{L} = \frac{\mu_s B}{S} = \frac{2g_s}{\hbar} B$$

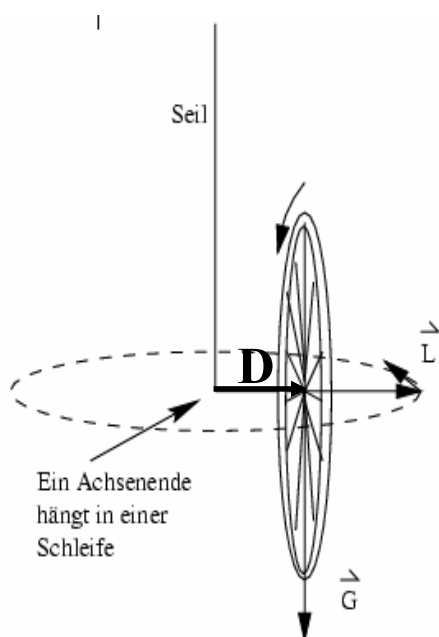
Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

3



Präzessionsversuch



Beobachtung: drehendes Rad fällt nicht, sondern dreht sich in horizontaler Ebene.

Erklärung: Drehimpuls $\underline{L}$ hat Tendenz sich Drehmoment $\underline{M}$ parallel zu richten (wie Impuls $\underline{p}$ parallel $\underline{F}$).

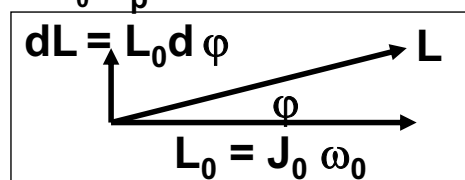
Gewichtskraft übt Drehmoment in horizontaler Richtung aus und $M = mgD = dL/dt$ schiebt

$\underline{L}_0 = J_0 \underline{\omega}_0$ in die horizontale Richtung!
Diese Bewegung nennt man Präzession.

Präzessionsfrequenz aus

$$M = dL/dt = L_0 d\phi/dt = L_0 \omega_p \text{ oder}$$

$$\omega_p = M/L_0 = M/J_0 \omega_0$$



Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

4



Zusammenfassung Spin-Bahn-Kopplung

Gesamtdrehimpuls des Elektrons setzt sich aus Spin- und Bahnanteil vektoriell zusammen:

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

Es gelten die quantenmechanischen Eigenschaften:

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2$$

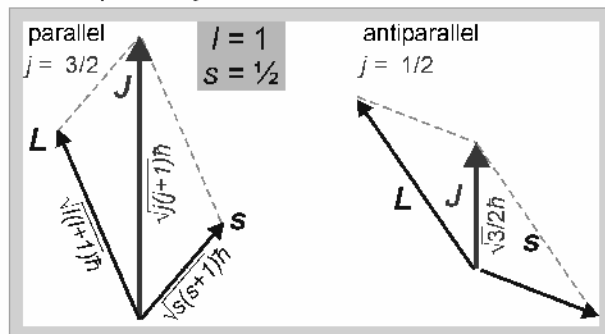
$$J_z = m_j \hbar$$

$$-j \leq m_j \leq j$$

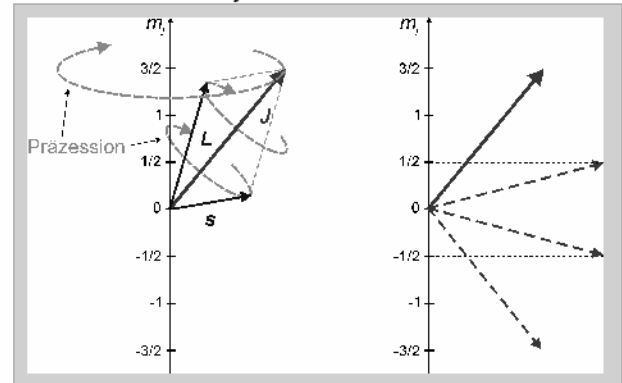
Beim H-Atom kann die Gesamtspinquantenzahl je nach Kopplung zwei Werte annehmen:

▸ parallel: $j = l + 1/2$

▸ antiparallel: $j = l - 1/2$



Die Zustände sind $2j+1$ -fach entartet.



Gleichzeitig scharf gemessen können werden:

- Bahndrehimpuls $L^2 = l(l+1)\hbar^2$
- Gesamtdrehimpuls $J^2 = j(j+1)\hbar^2$
- Projektion des Gesamtdrehimpulses $J_z = m_j \hbar$

Nicht scharf messbar sind die

- Projektion des Bahndrehimpulses m_l
- Projektion des Spins m_s

Für Übergänge muss gelten: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$, $\Delta m_j = 0, \pm 1$. $\Delta j = 0$ (Spin-flip) ist unwahrscheinlicher.

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

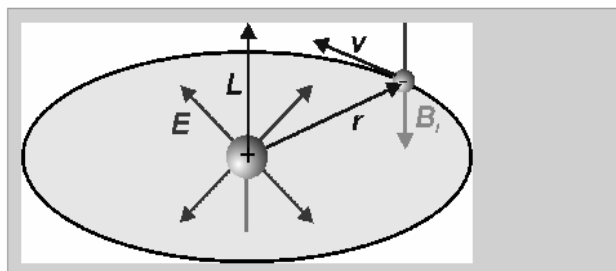
5



Energieverschiebung durch Spin-Bahn-Kopplung

Bohr-Atommodell: Im E -Feld des Kerns bewegtes Elektron sieht B -Feld: $\vec{B}_l$

$$\vec{B}_l = \frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 c^2} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3}$$



Quantenmechanische Rechnung ergibt zusätzlichen Thomas-Faktor 1/2. Mit Coulomb-Feld:

$$\vec{B}_l = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0 e}{4\pi m_e r^3} \vec{L}$$

Es folgt die LS-Wechselwirkungsenergie E_{ls}

$$E_{ls} = -\mu_s B_l = \frac{\mu_0 e}{8\pi m_e^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

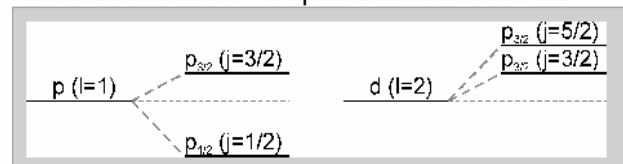
Mit $J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$ und

$$\langle r^{-3} \rangle = \int r^{-3} |\psi|^2 d^3r$$

folgt eine Niveaushiftung um

$$E_{ls} \sim \frac{Z^4 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

Alle Niveaus außer $l = 0$ spalten in Doubletten auf



Bei LS-Kopplung wird Zustand durch die Quantenzahlen $n l m_j$ beschrieben. m_l und m_s sind unbestimmt.

Spektroskopische Nomenklatur: $n^{2s+1} l_j$

- $3^2 d_{5/2}$ ($n=3, s=1/2, l=2, j=5/2$)
- $1^2 s_{1/2}$ ($n=1, s=1/2, l=0, j=1/2$)

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

6



H-Atom mit L.S.-Kopplung+ rel. Korr.

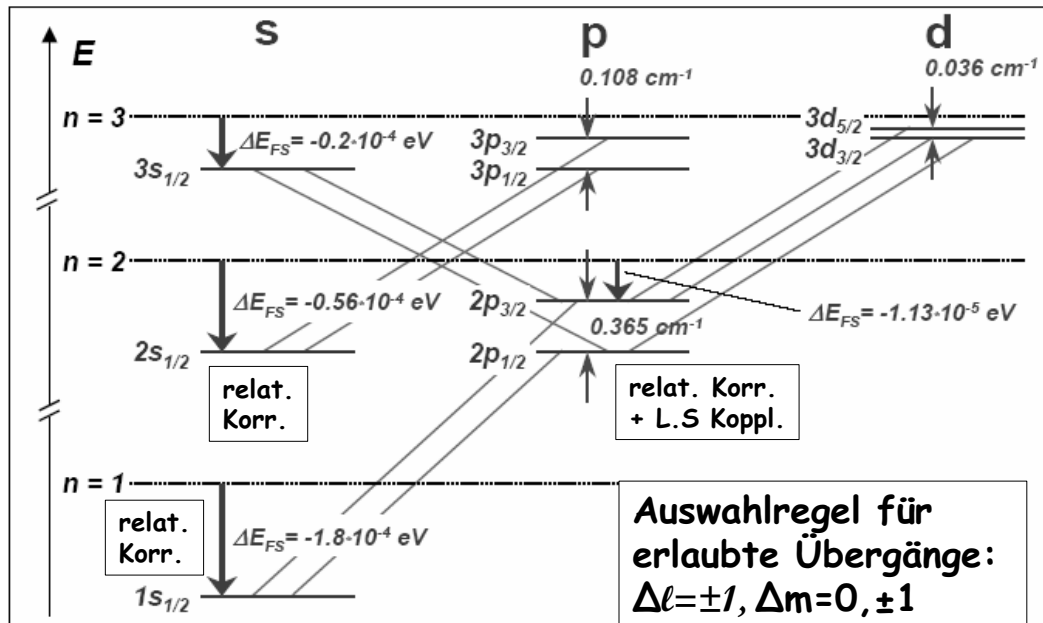


Abbildung 4.4: Termschema des Wasserstoffatoms bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der relativistischen Massenzunahme. Die gestrichelten Linien geben die Lage der Energieniveaus E_n ohne die Korrekturterme an.



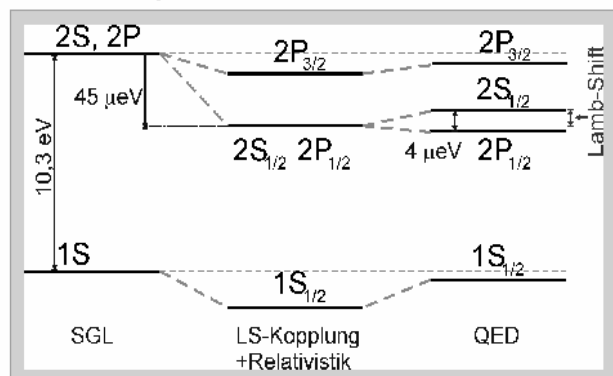
Relativ. Korrekturen und Lambshift

Weitere Korrekturen sind Folge der relativistischen Massezunahme. Aus der relativistischen quantenmechanischen Dirac-Gleichung folgt für die Feinstrukturaufspaltung

$$E_{nj} = E_n \left(1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right) \right)$$

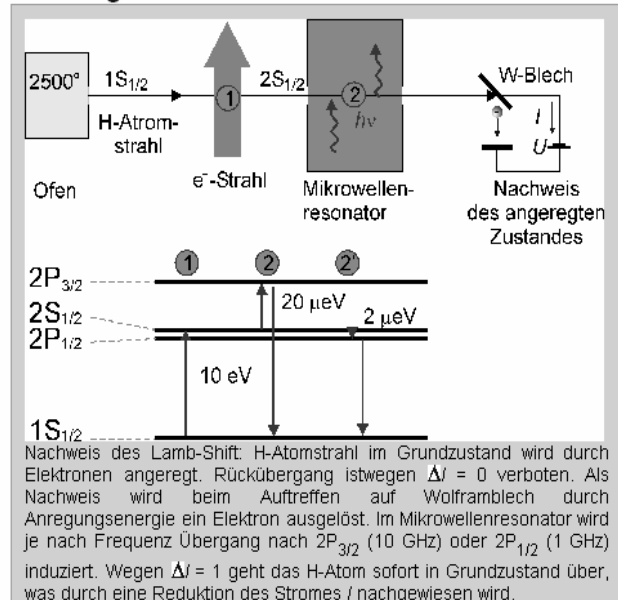
mit der Sommerfeld-Feinstrukturkonstanten

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$



Weitere Korrekturen aus der Quantenelektrodynamik (QED): Elektron emittiert und absorbiert im Vakuum ständig Photonen und hat so für kurze Zeit eine veränderte kinetische Energie ($\Delta E \Delta t \geq \hbar$).

Messung der Lamb-Shift 1950





Auswahlregeln für erlaubte Übergänge

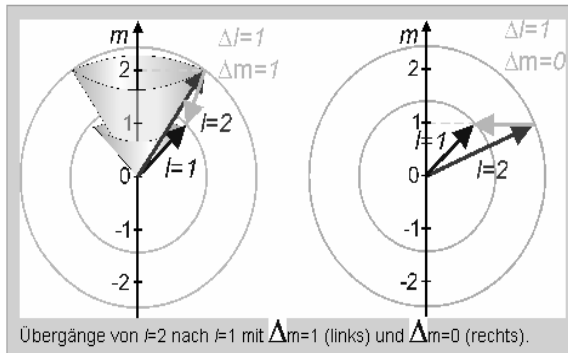
Spektroskopische Nomenklatur

l	0	1	2	3	4	5
Symbol	s	p	d	f	g	h
Entartung	1	3	5	7	9	11

Zu jedem Wert des Drehimpulses gibt es $2l+1$ Zustände gleicher Energie: Die Zustände sind $2l+1$ -fach entartet.

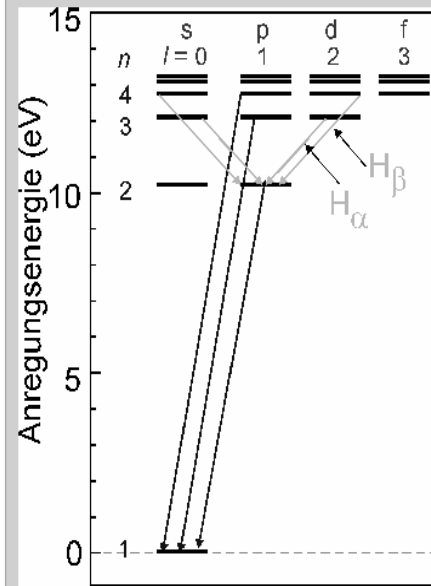
Übergänge unterliegen den Auswahlregeln

- ▷ $\Delta l = \pm 1$
- ▷ $\Delta m = 0, \pm 1$



Das Termschema des Wasserstoffatoms mit diskreten Energieeigenwerten:

$$E_n = - \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$



Lamb-Retherford-Experiment

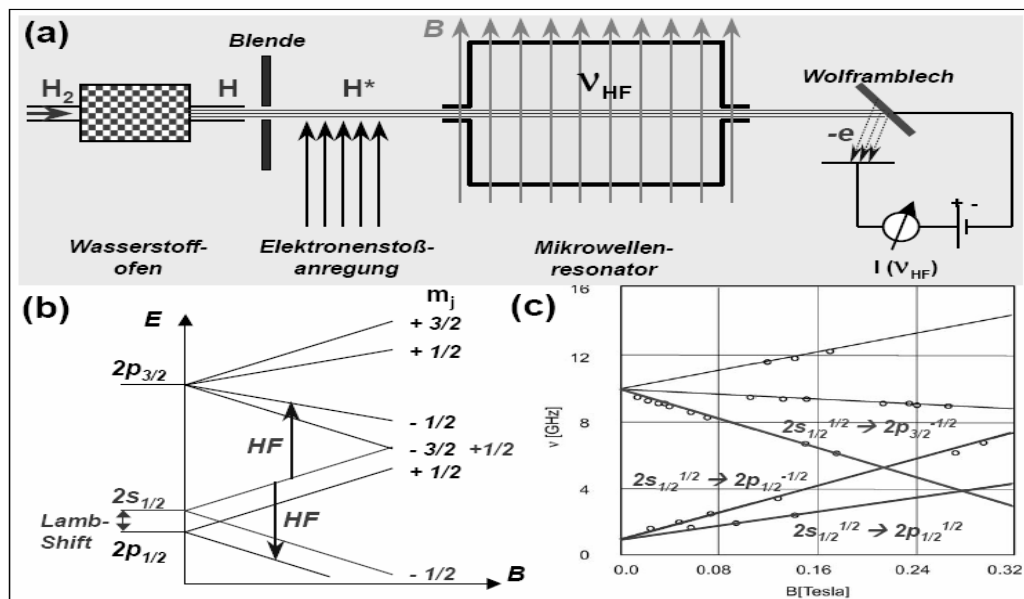


Abbildung 4.7: (a) Lamb-Retherford-Experiment. (b) Zeeman-Aufspaltung der $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$ Niveaus und ihre Ausnutzung zur Messung der Lamb-Shift. (c) Originaldaten von Lamb und Retherford (Phys. Rev. 79, 549 (1950)) zur Bestimmung der Niveaueverschiebung als Funktion des Magnetfelds im $2s/2p$ -System des Wasserstoffs. Die Punkte stellen die Messdaten dar, durchgezogene Linien entsprechen theoretischen Vorhersagen der Dirac-Theorie, wobei die Lamb-Verschiebung zusätzlich berücksichtigt wird. Man stellt fest, dass sich die Linien schon bei relativ schwachen Magnetfeldern kreuzen. Eine klare Trennung von Spin-Bahn-Kopplung und Zeeman-Effekt (siehe Abschnitt 4.6 und 4.7) ist nicht mehr möglich.



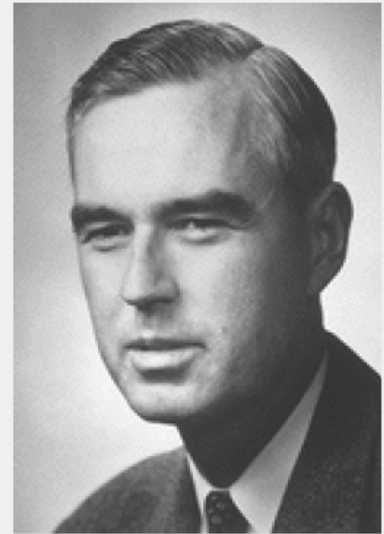
Willis Eugene Lamb (geb. 1913), Nobelpreis für Physik 1955:

Willis Eugene Lamb wurde am 12. Juli 1913 in Los Angeles geboren.

Er begann 1930 sein Studium an der University of California at Berkeley und erhielt dort 1934 den Bachelor of Science in Chemie. Im Jahr 1938 erhielt er an der gleichen Universität seinen Dokortitel. Seine Doktorarbeit über die Analyse der elektromagnetischen Eigenschaften von Kernsystemen wurde von J.R. Oppenheimer betreut.

Nach seiner Doktorarbeit ging er an die Columbia University und wurde dort 1945 Assistant Professor, 1947 Associate Professor und 1948 schließlich Full Professor. Von 1943 bis 1951 war er auch mit dem Columbia Radiation Laboratory assoziiert, wo er seine mit dem Nobelpreis ausgezeichneten Arbeiten machte. 1951 ging er an die Stanford University als Professor für Physik. Von 1953-1954 war er Morris Loeb Lecturer an der Harvard University. Von 1956 bis 1962 war er Fellow of New College and Wykeham Professor of Physics an der University of Oxford, England. 1962 wurde er Henry Ford II Professor of Physics an der Yale University, New Haven, Conn.

Im Jahr 1953 erhielt er den Rumford Premium der American Academy of Arts and Sciences. Die University of Pennsylvania verlieh ihm einen Ehrendoktor im Jahr 1954. Er erhielt ferner 1955 den Research Corporation Award. Er ist Mitglied in einer Zahl von National Academy of Sciences und Fellow der American Physical Society.



Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



Lamb-shift durch Vakuumpolarisation

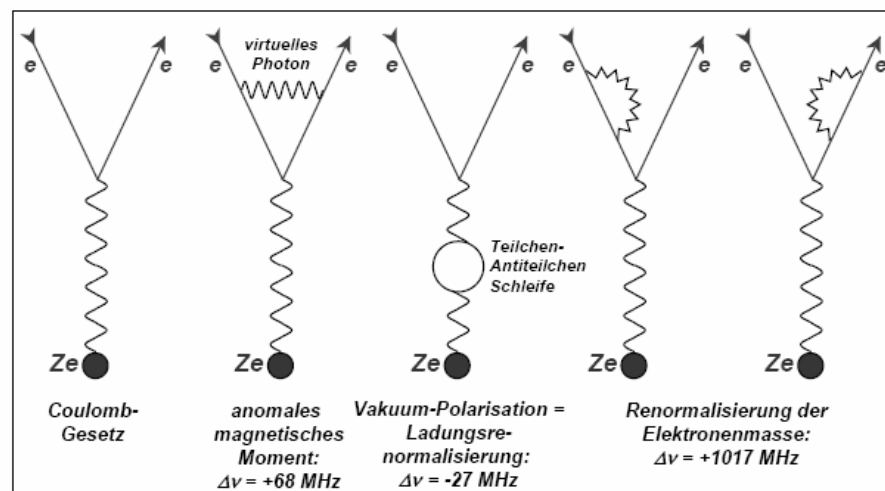


Abbildung 4.5: Feynman-Diagramme, die zur Streuung eines Elektrons an einer statischen Ladung beitragen. Das linke Diagramm entspricht dem uns vertrauten Coulomb-Gesetz. Die weiteren Diagramme sind von der Ordnung α^2 und ziehen eine Renormalisierung des magnetischen Moments, der Ladung und der Masse nach sich. Die Frequenzangaben zu den Diagrammen beziehen sich auf den jeweiligen Beitrag zur Verschiebung des $2s_{1/2}$ - gegenüber dem $2p_{1/2}$ -Niveau. Die Lamb-Verschiebung kann experimentell auf 0.1 MHz genau vermessen werden. Dies erlaubt es, die Beiträge der einzelnen Diagramme getrennt zu verifizieren. Dabei werden Diagramme höherer als der gezeigten Ordnung (2-Schleifen-Beiträge) von Bedeutung. Die eigentliche Grenze bei der theoretischen Vorhersage des Termschemas stellt der nicht exakt behandelbare Einfluss der Protonenstruktur auf die Elektronenfrequenzen dar.

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Lambshift durch Vakuumpolarisation

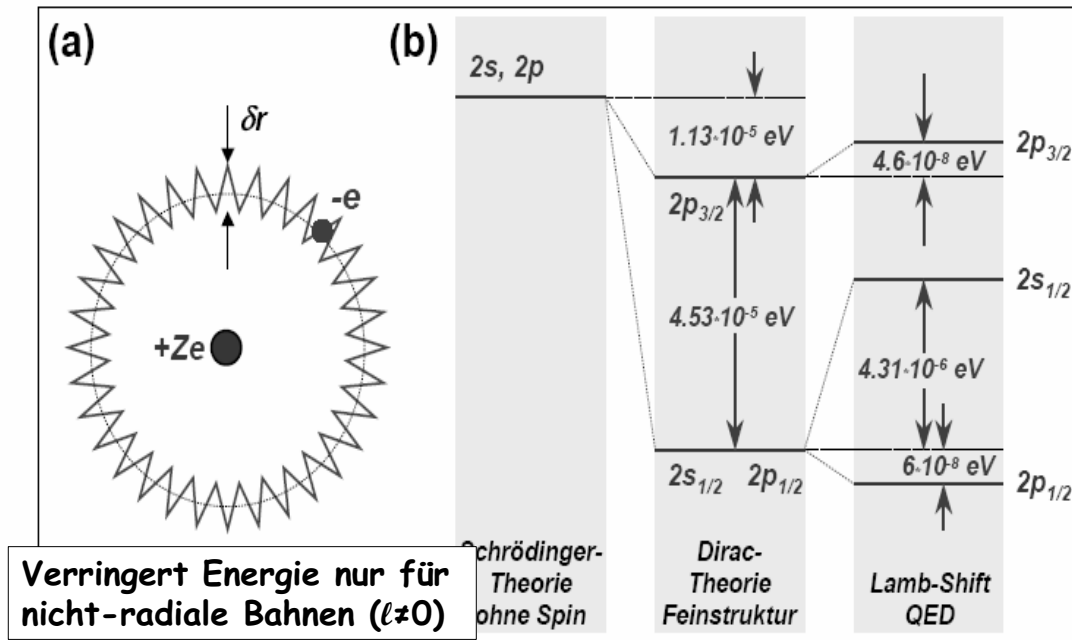


Abbildung 4.6: (a) Zur Veranschaulichung der Zitterbewegung eines Elektrons aufgrund der Emission und Absorption von virtuellen Photonen. (b) Feinstruktur und Lamb-Verschiebung beim Wasserstoffniveau mit $n = 2$.

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

13



Aufhebung der Entartung bei der Wasserstoff Balmer-Linie H_α

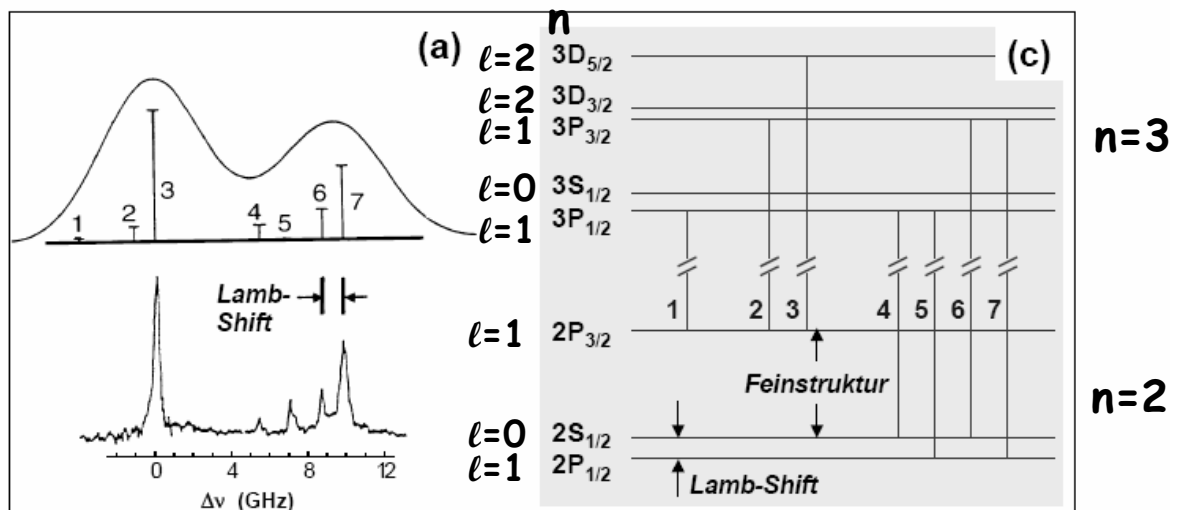


Abbildung 4.1: Feinstruktur der Balmer-Linie H_α gemessen mit (a) hochauflösender Spektroskopie und (b) mit höchstauflösender Laser-Spektroskopie. (c) Verfeinertes Termschema des Wasserstoffs. Die erlaubten Übergänge werden durch die Auswahlregeln bestimmt, die wir erst später diskutieren werden.

$n=2$: 4-fach Entartung in 3 Niveaus gespalten ohne externe Felder

$n=3$: 9-fach Entartung in 5 Niveaus gespalten ohne externe Felder

Juni 2, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

14



Hyperfeinstruktur

Jetzt 3 magnetische Momente:
Bahnmagn., Elektronspin, Kernspin

Bei extremer Auflösung ist jede Feinstrukturkomponente aufgespalten.

Grund: Ausrichtung des Kernspins I im Magnetfeld der Elektronen.

$$|\vec{I}| = \sqrt{I(I+1)}\hbar$$

Gesamtdrehimpuls des Atoms

$$|\vec{F}| = |\vec{I} + \vec{J}| = \sqrt{F(F+1)}\hbar$$

mit $F=j+l, j+l-1 \dots j-l$

Damit ist ein magnetisches Kernmoment verbunden:

$$\mu_I = g_I \mu_K I$$

mit dem Kernmagneton

$$\mu_K = \frac{e}{2m_p} \hbar = \frac{m_e}{m_p} \mu_B = 5,0510^{-27} \text{ J/T}$$

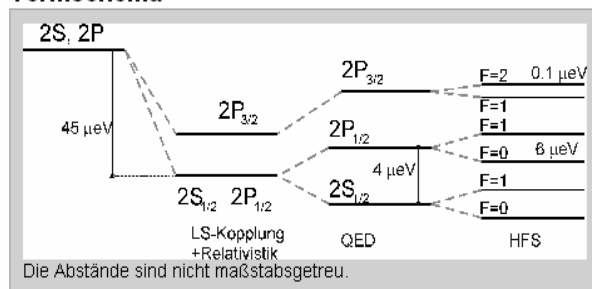
Die aus der Wechselwirkung mit dem inneren Magnetfeld resultierende Energieaufspaltung ist:

$$\Delta E \sim g_K \mu_K \frac{F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)}{\sqrt{j(j+1)}}$$

Beispiele für das Kernmagneton:

Kern	I	g_I
Proton	1/2	5,58
Neutron	1/2	-3,82
Kern	1	0,86
α -Teilchen	0	-

Termschema



Hyperfeinstruktur

Wir müssen jetzt die Wechselwirkung des Gesamtdrehimpulses J des Hüllenelektrons mit dem Kernspin I betrachten. Diese Wechselwirkung besteht aus zwei Beiträgen, die zur Aufspaltung und Verschiebung der Energieniveaus der Elektronenhülle führt:

- Die Wechselwirkung des magnetischen Kernmoments mit dem durch das Elektron am Kernort erzeugten Magnetfeld (Zeeman-Effekt des Kernmomentes im atomaren Magnetfeld).
- Die Wechselwirkung des elektronischen magnetischen Moments mit dem vom Kernmoment erzeugten Magnetfeld.

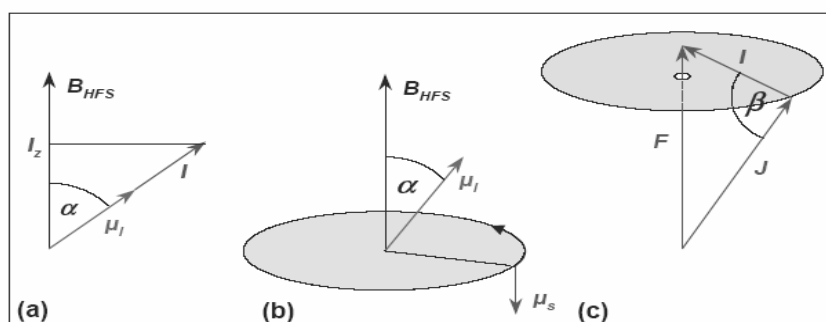


Abbildung 4.9: Zur Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Kernmoment μ_I und dem Magnetfeld B_{HFS} , das (a) durch die Bahnbewegung des Elektrons und (b) durch das magnetische Spinnmoment μ_S des Elektrons am Kernort erzeugt wird. (c) Kopplung des Gesamtdrehimpulses J des Elektrons und des Kernspins I zum raumfesten Gesamtdrehimpuls des Atoms $F = J + S$.



Kernmoment im Magnetfeld der Elektrons

Das Kernmoment μ_i hat in dem vom Elektron mit Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ am Kernort erzeugten Hyperfeinfield $\mathbf{B}_{\text{HFS}}$ (siehe Abb. 4.9) die Zusatzenergie

$$\Delta E_{\text{HFS}} = -\mu_i \cdot \mathbf{B}_{\text{HFS}} = -|\mu_i| |\mathbf{B}_{\text{HFS}}| \cos(\angle(\mathbf{J}, \mathbf{I})) . \quad (4.5.5)$$

Man führt nun, wie bei der Kopplung von $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ zu $\mathbf{J}$, den Gesamtdrehimpuls von Kern und Elektronenhülle als Vektorsumme

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{J} + \mathbf{I} & |\mathbf{F}| &= \sqrt{f(f+1)} \hbar & f &= j \pm i \\ & & F_z &= m_f \hbar & m_f &= -f, -(f-1), \dots, (f-1), f \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

Mit $|\mu_i| = g_i \mu_K \sqrt{i(i+1)}$ beträgt die Hyperfeinenergie des Wasserstoffatoms dann

$$\begin{aligned} \cos(\angle(\mathbf{J}, \mathbf{I})) &= \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{I}}{|\mathbf{J}| |\mathbf{I}|} & \text{Cosinussatz: } \mathbf{F}^2 &= \mathbf{J}^2 + \mathbf{I}^2 + 2\mathbf{J} \cdot \mathbf{I} \\ &= \frac{1}{2} \frac{f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)}{\sqrt{j(j+1)} \sqrt{i(i+1)}} & \Delta E_{\text{HFS}} &= \frac{A}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \\ & & A &= \frac{g_i \mu_K B_{\text{HFS}}}{\sqrt{j(j+1)}} \end{aligned}$$



Hyperfeinstruktur

Für das Wasserstoffatom im Grundzustand ist $i = 1/2$ und $j = 1/2$ und damit $f = 0$ oder $f = 1$. Damit erhält man die Hyperfeinaufspaltung (siehe Abb. 4.10)

$$\begin{aligned} E_{\text{HFS}}(f=0) &= E_{1,0,1/2} - \frac{3A}{4} \\ E_{\text{HFS}}(f=1) &= E_{1,0,1/2} + \frac{A}{4} \end{aligned}$$

$$E_{\text{HFS}} = E_{n,l,j} + \frac{A}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)]$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{J} + \mathbf{I} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad (\text{Ortho-Wasserstoff}) \\ \mathbf{F} &= \mathbf{J} + \mathbf{I} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad (\text{Para-Wasserstoff}) \end{aligned} \quad (4.5.15)$$

Das Hyperfeinfield $\mathbf{B}_{\text{HFS}}$ am Ort $\mathbf{r} = 0$ des Kerns hängt außer vom Drehimpuls $\mathbf{J}$ des Elektrons von seiner räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit ab. Diese wird durch das Absolutquadrat der Wellenfunktion $|\Psi_{n,l}|^2$ bestimmt. Für s -Zustände erhält man

$$A = \frac{2}{3} \mu_0 g_l \mu_B g_I \mu_K |\Psi_n(r=0)|^2.$$

Der Grundzustand $1s_{1/2}$ des Wasserstoffatoms spaltet in die Terme $f = 0$ und $f = 1$ auf. In einem kleinen Magnetfeld (das Magnetfeld muss so klein sein, dass die Kopplung von $\mathbf{J}$ und $\mathbf{I}$ zu $\mathbf{F}$ erhalten bleibt: anomaler Zeeman-Effekt, siehe Abschnitt 4.6) bleibt der $f = 0$ Zustand ungestört, da nur $m_f = 0$ erlaubt ist, während der $f = 1$ Zustand eine Zeeman-Aufspaltung in drei Terme zeigt ($m_f = 0, \pm 1$). Man spricht daher vom *Singulett*- ($f = 0$) oder *Parawasserstoff* und *Triplet*- ($f = 1$) oder *Orthowasserstoff*.



Hyperfeinstruktur, 21cm Linie des Wasserstoffs

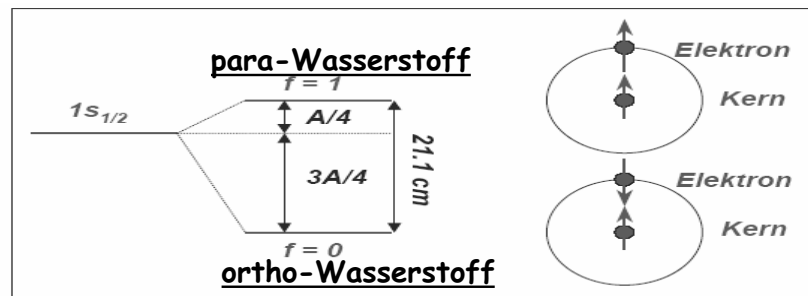


Abbildung 4.10: Hyperfeinstrukturaufspaltung des Grundzustandes im Wasserstoffatom. Beim Übergang zwischen dem Triplett- und dem Singulett-Zustand wird Strahlung der Frequenz $\nu_H = 1.42$ GHz bzw. der Wellenlänge $\lambda_H = 21.1$ cm ausgesandt, die im Mikrowellenbereich liegt. Beim Ausenden der Strahlung muss der Spin des Elektron gekippt werden, man spricht deshalb von einem Spin-Flip-Übergang. Gemäß den allgemeinen Auswahlregeln für Dipolstrahlung, auf die wir später noch zu sprechen kommen, sind Spin-Flip-Übergänge verboten. Das heißt, die Übergangswahrscheinlichkeit bei Strahlungsemission ist nur über höhere Momente möglich und daher sehr klein. Im Labor kann man deshalb diesen Übergang kaum beobachten, da die Abregung eher durch Stoß stattfindet. Da aber im Weltraum im interstellaren Gas große Mengen an atomarem Wasserstoff vorliegen, wird trotzdem die 21 cm Linie in genügender Intensität ausgesendet, um sie auf der Erde mit empfindlichen Antennen beobachten zu können.¹³ Die Untersuchung der 21 cm Linie spielt in der *Radioastronomie* eine wichtige Rolle, weil ihre Untersuchung Auskunft über die Dichteverteilung, Geschwindigkeiten und Temperatur von Wasserstoffatomen im Universum gibt.



Vollständiges Termschema des H-Atoms

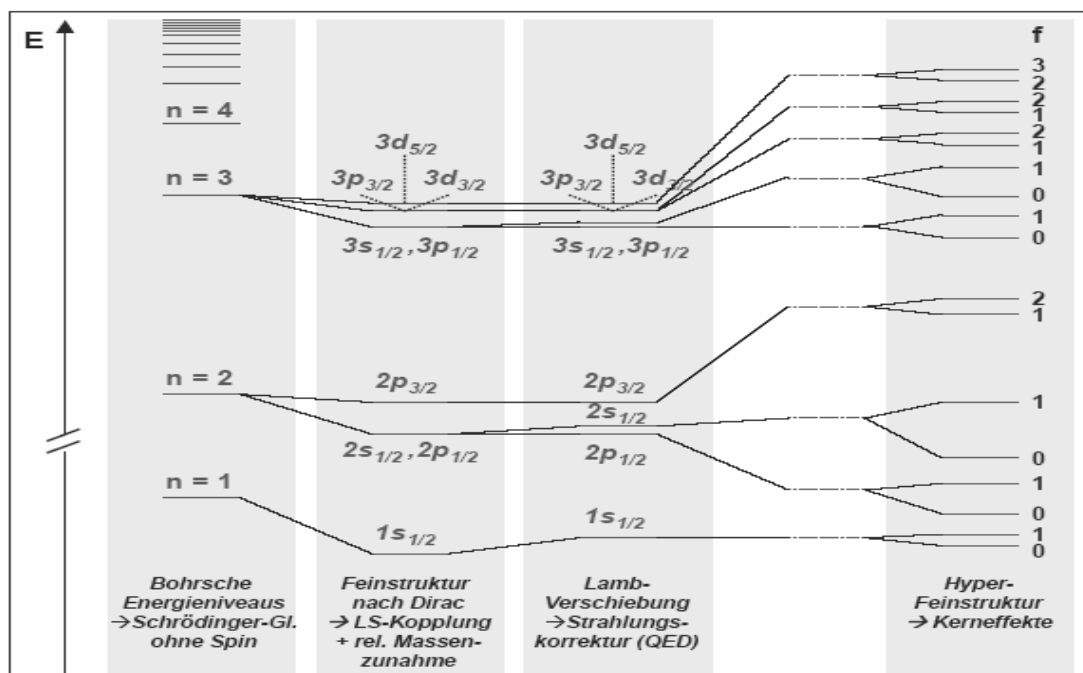


Abbildung 4.19: Vollständiges Termschema des Wasserstoffatoms mit allen bisher bekannten Wechselwirkungen. Die Fein- und Hyperfeinstruktur, sowie die Lamb-Shift sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht maßstabsgerecht gezeichnet.



Magnetisierung

In Materie induzierte Wirbelströme erzeugen ein magnetisches Moment:

$$P_m = IA = jldA$$

Daraus definieren wir die Magnetisierung

$$J = \frac{P_m}{V} = jd \quad [\text{A/m}]$$

Wie in einer Spule entsteht daraus das Feld

$$\vec{B}_m = \mu_0 \frac{jdl}{l} = \mu_0 \vec{J}$$

Das Gesamtfeld innerhalb Materie ist also

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_m = \vec{B}_0 + \mu_0 \vec{J}$$

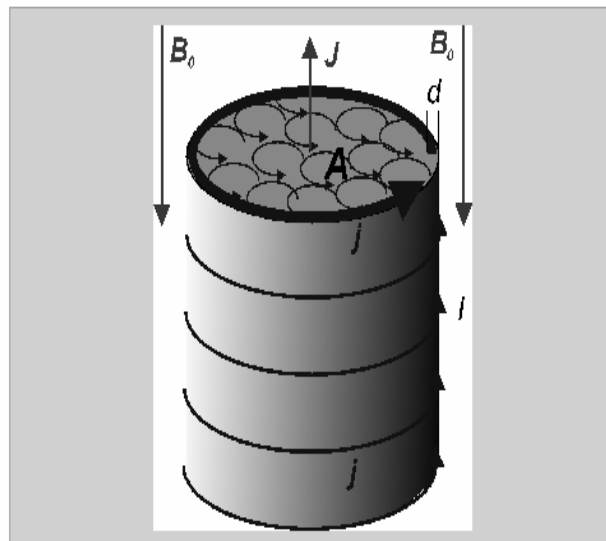
Für Stoffe mit der Eigenschaft

$$\vec{J} = \frac{\chi}{\mu_0} \vec{B}_0$$

Gilt:

$$\vec{B} = (1 + \chi) \vec{B}_0 = \mu \vec{B}_0$$

Wirbelströme heben sich im Innern auf. Effektiv fließt ein Oberflächenstrom in einer Schichtdicke d .



Materialeigenschaften:

► Suszeptibilität: χ [-]

► Permeabilität: $\mu_r = 1 + \chi$ [-]



Diamagnetismus und Paramagnetismus

Diamagnetismus liegt vor wenn:

- $\chi < 0$
- $\mu_r < 1$
- $|\chi| \ll 1$

Das äußere Feld wird geschwächt: $B < B_0$

Wegen

$$\vec{F} = (\vec{p}_m \nabla) \vec{B} = V \frac{\chi}{\mu_0} (\vec{B}_0 \nabla) \vec{B}_0 < 0$$

werden diamagnetische Stoffe von einem Feldgradienten abgestoßen.

Entsteht durch:

- Induktion von Wirbelströmen (klingt wegen elektrischem Widerstand ab).
- Induktion von Strömen in gebundenen Elektronen

$$\chi = -\frac{1}{2} \mu_0 n Z \frac{e^2}{m} \langle r^2 \rangle$$

Atom mit Radius r , Ladungszahl Z , Elektronenmasse m und Dichte n .

Paramagnetismus liegt vor wenn:

- $\chi > 0$
- $\mu_r > 1$
- $|\chi| \ll 1$

Das äußere Feld wird gestärkt: $B > B_0$

Hier ist

$$\vec{F} = V \frac{\chi}{\mu_0} (\vec{B}_0 \nabla) \vec{B}_0 > 0$$

Paramagnetische Stoffe werden von Feldgradienten angezogen.

Entsteht durch:

- Ausrichtung von atomaren permanenten Dipolen



Einstein-de Haas-Effekt

Bestimmung des Verhältnis magnetisches Momet des Elektrons zu Elektronenspin

Experiment: Eisenzylinder (Masse m , Radius R) hängt in longitudinalen B-Feld,

B hoch genug - Eisenzylinder in Sättigung $M = N \cdot \mu_s$; d.h. alle Spins der N freien Elektronen stehen antiparallel zur Feldrichtung

Feld wird umgepolt $\rightarrow$ magnetischen Spinmomente klappen ebenfalls um - Änderung der Magnetisierung: $\Delta M = 2M = 2N \cdot \mu_{sz}$ (durch Hilfsspule)

M-messen $\rightarrow N \cdot \mu_{sz}$ bestimmen

Änderung des mechanischen Drehimpulses aller Elektronen muß durch entgegengesetzten Drehimpuls $-\vec{L}$ des Zylinders kompensiert werden.

$$\Delta L = 2N|\hbar s| = N\hbar = -I\omega$$

Gesamtdrehimpuls des Systems muß erhalten bleiben.



Einstein-de Haas-Effekt

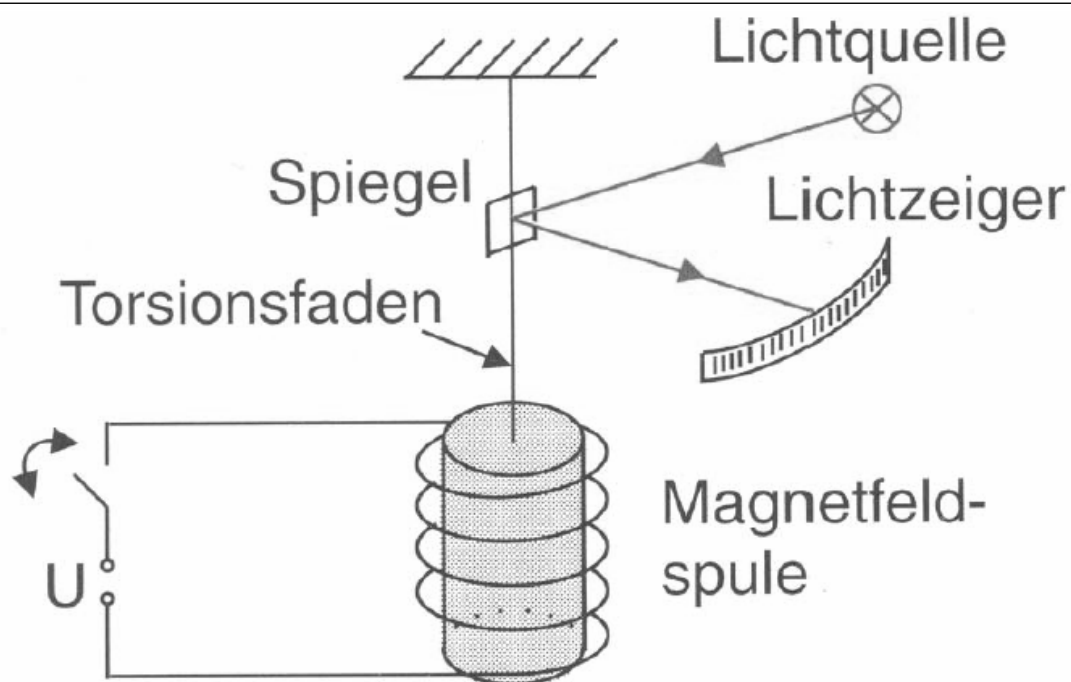


Abb. 5.17. Einstein-de Haas-Effekt



Einstein-de Haas-Effekt

Drehimpuls (Zylinder): $I \cdot \omega = -N\hbar$

$I = \frac{1}{2}mR^2$...mechanisches Trägheitsmoment

Vorgang führt zu Torsion - Winkel φ wird gemessen

Bestimmung des gyromagnetischen Verhältnisses.

$$\frac{\Delta M}{\Delta L} = \frac{\mu_{sz}}{s_z} = \gamma_s$$

Für Bahndrehimpuls des Elektrons gilt: $\gamma_l = \frac{|\vec{\mu}_e|}{|\vec{l}|} = \frac{e}{2m_e} = \mu_B/\hbar$

Einstein-de-Haas Versuch: $\gamma_s \approx \frac{e}{m_e} = 2\gamma_l$

Verhältnis magnetisches Moment zu mechanischen Drehimpuls ist für Spin doppelt so groß als für Bahndrehimpuls!

Man schreibt analog zu $\vec{\mu}_l = (\mu_B/\hbar) \cdot \vec{l}$

$$\vec{\mu}_s = -g_s(\mu_B/\hbar) \cdot \vec{s}$$

$g_s \approx 2$ "Lande-Faktor"



Zum Mitnehmen

Feinstruktur der Spektrallinien im Wasserstoff durch:

Spin-Bahn-Kopplung

relativistische Korrekturen

Vakuumpolarisation (Lambshift)

Hyperfineinstruktur

**Spin hat g-Faktor = 2 (Einstein-de Haas-Effekt),
d.h. Eigendrehimpuls ist zweimal so effektiv als
Bahndrehimpuls um magnetisches Moment zu erzeugen
(klassisch nicht erklärbar, folgt jedoch aus relativ.
Wellen-Gleichung für Fermionen (DIRAC-Gleichung))**



Vorlesung 15:

Roter Faden:

**g-2 Bestimmung
Anomaler Zeeman-Effekt
LandéFaktor**

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

**Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag**

Juni 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

1



Einstein-de Haas-Effekt

Drehimpuls (Zylinder): $I \cdot \omega = -N\hbar$

$I = \frac{1}{2}mR^2$...mechanisches Trägheitsmoment

Vorgang führt zu Torsion - Winkel φ wird gemessen

Bestimmung des gyromagnetischen Verhältnisses.

$$\frac{\Delta M}{\Delta L} = \frac{\mu_{sz}}{s_z} = \gamma_s$$

Für Bahndrehimpuls des Elektrons gilt: $\gamma_l = \frac{|\vec{\mu}_e|}{|\vec{l}|} = \frac{e}{2m_e} = \mu_B/\hbar$

Einstein-de-Haas Versuch: $\gamma_s \approx \frac{e}{m_e} = 2\gamma_l$

*Verhältnis magnetisches Moment zu mechanischen Drehimpuls
ist für Spin doppelt so groß als für Bahndrehimpuls!*

Man schreibt analog zu $\vec{\mu}_l = (\mu_B/\hbar) \cdot \vec{l}$

$$\vec{\mu}_s = -g_s(\mu_B/\hbar) \cdot \vec{s}$$

$g_s \approx 2$ "Lande-Faktor"

Einheiten:

$$\mu_B = e\hbar/2m_e = 9.3 \times 10^{-24} \text{ J/T} = 5.8 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

Juni 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



Zusammenfassung Spin

Eigenschaften des Elektrons:

- Spinquantenzahl $s=1/2$
- innerer Drehimpuls (Spin) $S = (s(s+1))^{1/2}$
- magnetische Spinquantenzahl $m_s = \pm 1/2$

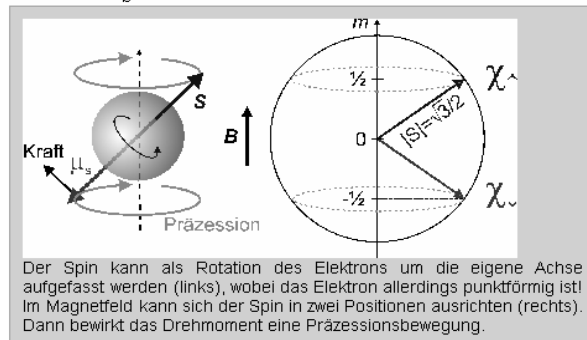
Magnetisches Moment des Elektrons

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m_e} \vec{S} = -g_s \mu_B \vec{S} / \hbar$$

mit dem G-Faktor $g_s = 2.0024$

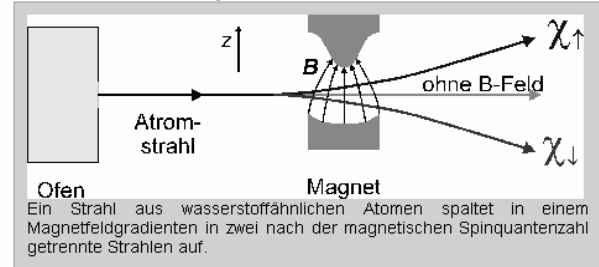
Die Wellenfunktion des Elektrons im H-Atom wird um den Spinanteil χ ergänzt, die nur 2 Werte annimmt

$$\psi_{nlm m_s} = R_{nl} Y_l^m \chi_{m_s}$$



Spin

Stern-Gerlach-Experiment



Erklärung

auf magnetisches Moment wirkt die Kraft

$$F_z = -\mu_z \frac{dB}{dz} = g_s \frac{e m_s \hbar}{m_e} \frac{dB}{dz}$$

dies führt zur Ablenkung des Strahls in Abhängigkeit von der magnetischen Spinquantenzahl.

Im Magnetfeld erzeugt das magnetische Moment ein Drehmoment, das wie beim Kreisel zu einer Präzessionsbewegung mit der Larmor-Frequenz führt:

$$\omega_L = \frac{\vec{p}_m \times \vec{B}}{L_z} = \frac{p_m B}{L} = \frac{\mu_s B}{S} = 2\mu_B B / \hbar$$

**Bahnfreq. in B-Feld: $mv^2/r = evB$
oder $\omega = v/r = eB/m = 2\mu_B B / \hbar$**



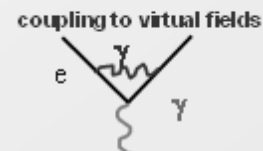
Was ist g-2?

- The gyromagnetic ratio, g , relates spin angular momentum to the particle's magnetic moment

$$\vec{\mu}_S = g \left(\frac{e}{2m} \right) \vec{S}$$

- Dirac theory: point-like, spin-1/2 particles have $g = 2$, but ...

- » proton } $g \gg 2$
- » hyperons }
- » electron } g almost equal to 2
- » muon }



- The muon *anomalous* magnetic moment is

$$a_\mu = \frac{(g-2)_\mu}{2} \approx \frac{\alpha}{2\pi} \approx \frac{1}{800}$$

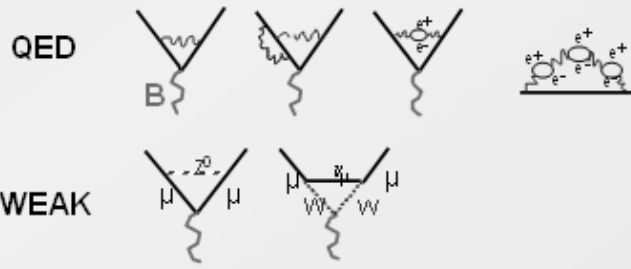


Wodurch entsteht g-2?

$$a_{\mu}^{\text{NEW}} = (a_{\mu}^{\text{exp}} - a_{\mu}^{\text{theory}})$$

QED + WEAK + HADRONIC

Standard Model g-2



not (too) controversial

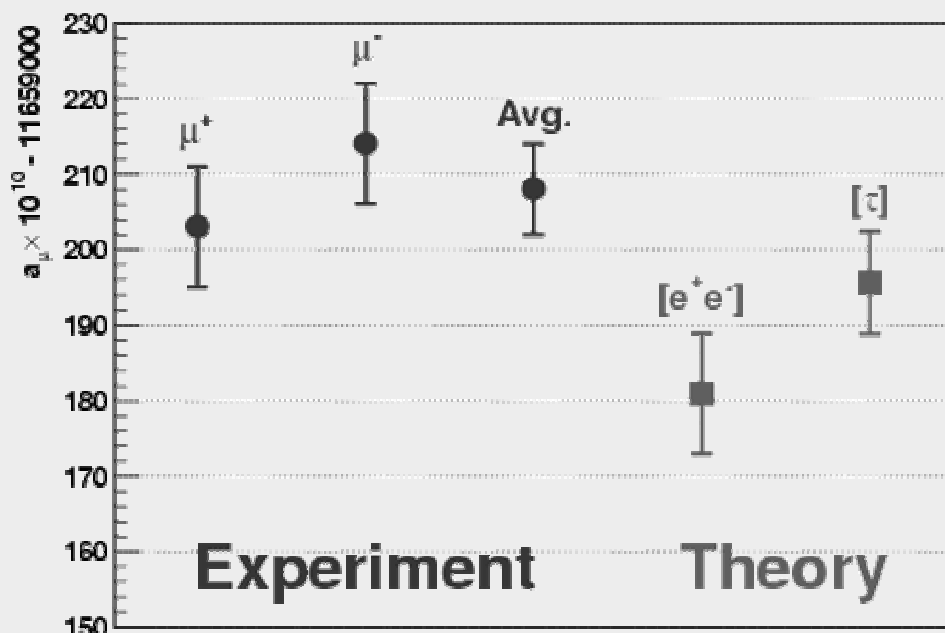
Mögliche Abweichungen vom SM, wenn neue schwere Teilchen im Vakuum kurzfristig erzeugt werden.
(Erlaubt nach Heisenberg)

-> Präzisionsmessungen ermöglichen ein Fenster zur neuen Physik!



The (g-2) value of the negative muon was announced January 8 2006

$$a_{\mu}^{\text{exp}} (\text{BNL 01}) = 11\,659\,214 (8)(3) \times 10^{-10} (0.7 \text{ ppm})$$





Messung von $g-2$.

at rest

$$\omega_s = \frac{g}{2} \frac{eB}{m} = \omega_L$$

in flight

$$\omega_s = \left[1 + \gamma \left(\frac{g-2}{2} \right) \right] \frac{eB}{m\gamma}$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m\gamma}$$

$$\Delta\omega = \omega_a = \left(\frac{g-2}{2} \right) \frac{eB}{m}$$

INDEPENDENT of γ !

Juni 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

7



Messung von $g-2$.

$\mu^+ \rightarrow \nu_e + \bar{\nu}_\mu + e^+$

• In the COM: $\frac{dN}{dE d\Omega} = n(E) [1 + A(E) \cos \theta]$

• High energy positrons in the LAB frame are emitted at forward angles in the CM frame

• We observe

$$N(t) = N e^{-t/\gamma\tau} [1 + A \cos \omega_a t]$$

Juni 7, 2005

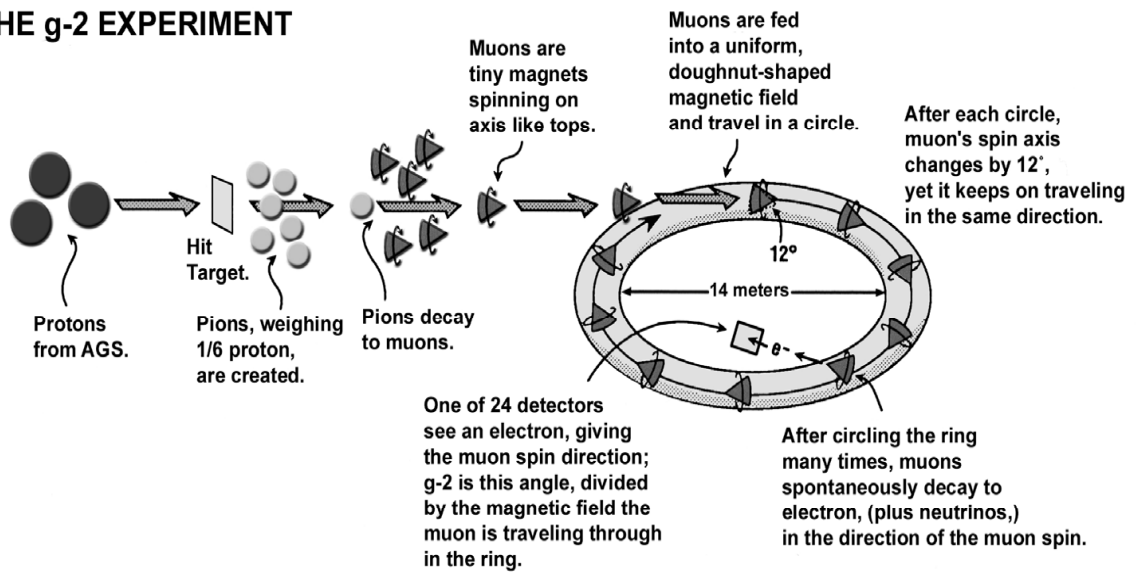
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

8



Messung von $g-2$.

LIFE OF A MUON: THE $g-2$ EXPERIMENT



Juni 7, 2005

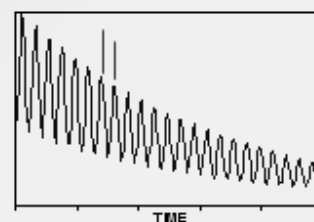
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Die Beobachtung

(1) Precession frequency



(2) Muon distribution



(3) Magnetic field map



$$(g-2) \propto \frac{(1)}{\langle \int (2)(3) \rangle}$$

D. Hertzog / Illinois

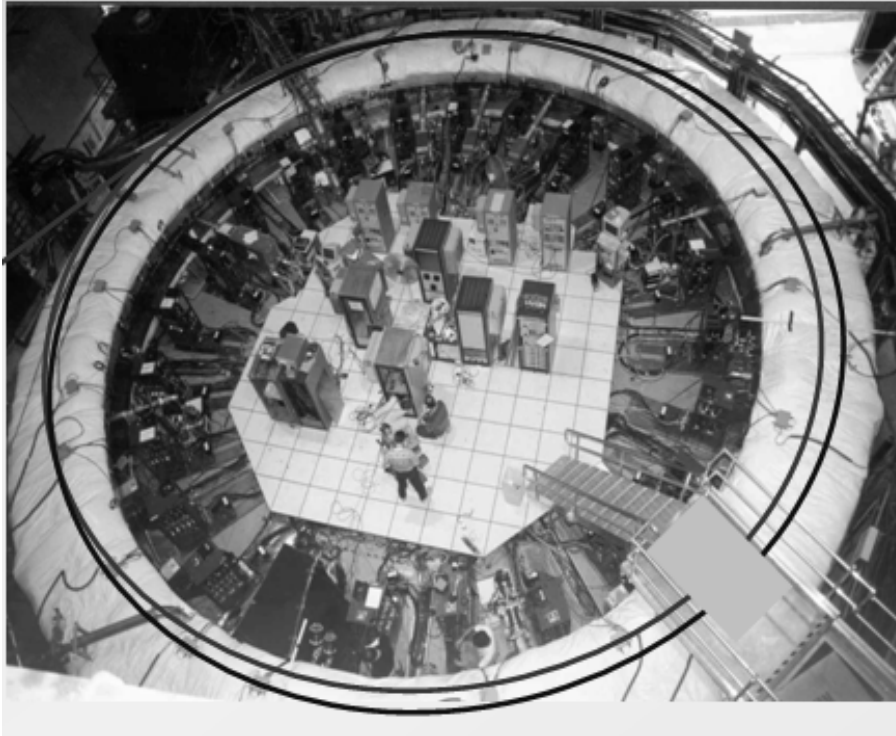
Juni 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

10



Der Myon-Speicherring



Radius 7112 mm
Aperture 90 mm
Field 1.45 T
 P_μ 3.094 GeV/c

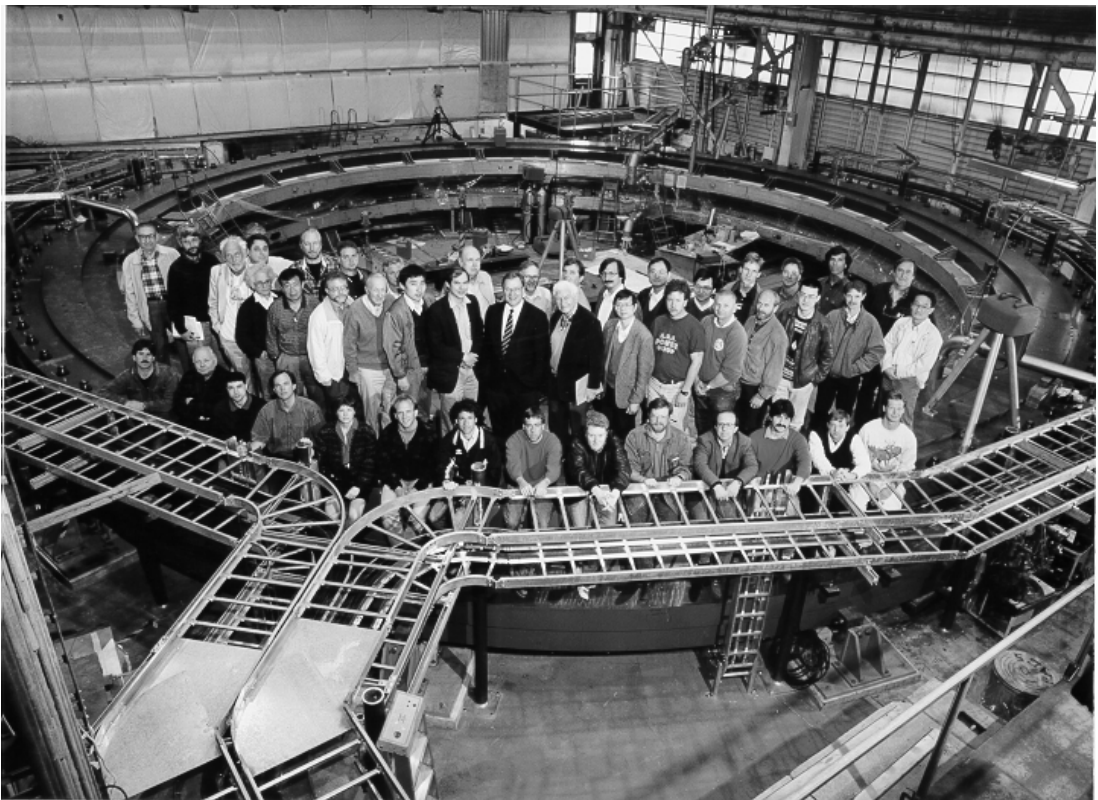
Juni 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



Der Myon-Speicherring



Juni 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Normaler Zeeman-Effekt: nur Bahnmagnetismus

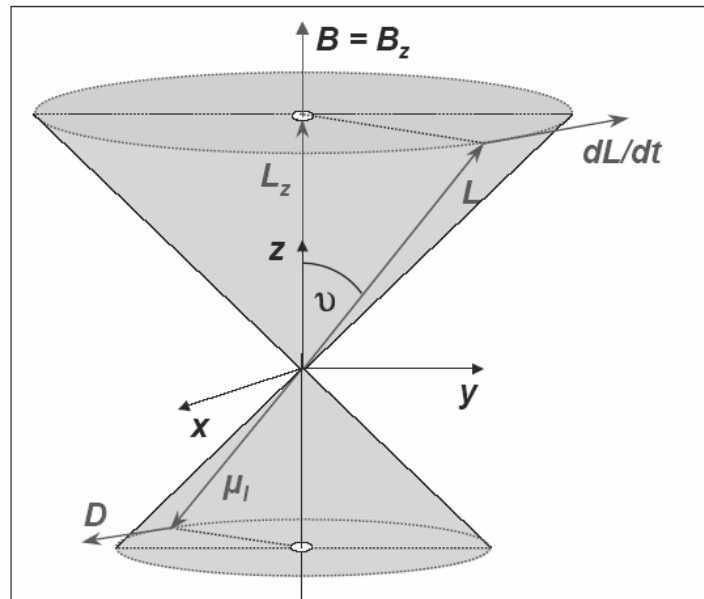


Abbildung 4.13: Zur Veranschaulichung des Zeeman-Effekts: Klassische Präzession von Drehimpuls $\mathbf{L}$ und magnetischem Moment μ_l um die Feldrichtung. Im Gegensatz zu einem klassischen Drehimpuls darf die z -Komponente des quantenmechanischen Drehimpulses allerdings nur diskrete Werte $L_z = m\hbar$ annehmen.



Wiederholung Zeeman-Effekt (ohne Spin)

Beobachtung von Zeeman 1896

Spektrallinien von Atomen im Magnetfeld:

- ▶ Spalten in 3 Linien auf (Triplets)
- ▶ Linienabstand wächst mit B
- ▶ Linienabstand ist für alle Atome gleich

Elektron auf Kreisbahn: magnetisches Moment $\vec{\mu}_m$

$$\vec{\mu}_m = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Dadurch ändert sich potentielle Energie im Hamilton-Operator um ΔE

$$E_B = -\vec{\mu}_m \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} BL_z$$

Die Energieentartung der Zustände ist aufgehoben:

$$E_{nm} = E_n + \frac{eB}{2m_e} \hbar m = E_n + \mu_B B m$$

Mit dem Bohr-Magneton

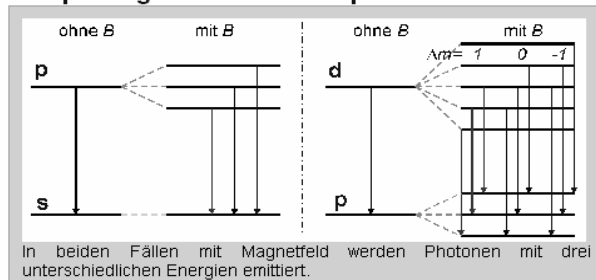
$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,2732 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}}$$

Die Zeeman-Aufspaltung ist

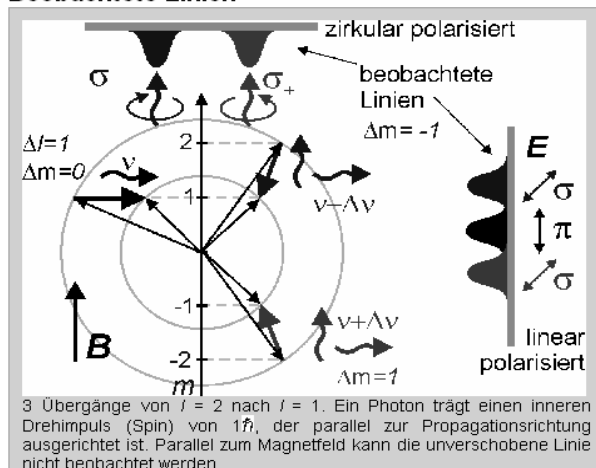
$$\Delta E = E_{n,m+1} - E_{n,m} = \mu_B B$$

E ist minimal, wenn $\vec{p}_m$ parallel zu $\vec{B}$ ist. Dann ist $\vec{L}$ antiparallel zu $\vec{B}$ und es ist $m = -l$.

Aufspaltung von Linien in Triplets



Beobachtete Linien





Pieter Zeeman

Pieter Zeeman (1865 - 1943), Nobelpreis für Physik 1902:

Pieter Zeeman wurde am 25. Mai 1865 in Zonnemaire geboren. Er war seit 1900 Professor in Amsterdam. Auf Anregung von Lorentz entdeckte er 1896 den magnetooptischen Effekt der Aufspaltung von Spektrallinien (bei Natrium, und später bei Zink und Cadmium) in mehrere eng benachbarte Linien, welche Michael Faraday vergeblich gesucht hatte. Mit einem Spektralapparat großer Auflösung entdeckte er, dass die Größe des Linienabstandes proportional der magnetischen Feldstärke ist. Dieser später nach ihm benannte Zeeman-Effekt wurde zur Erforschung der Feinstruktur der Atome herangezogen. Hendrik Lorentz fand eine klassische Erklärung dieses Effektes, nach der jede Spektrallinie eines Atoms in drei Komponenten aufspalten sollte. Dieses Lorentz-Triplett bezeichnete man als normalen Zeeman Effekt. Das Aufspalten von Atomen in kompliziertere Strukturen wurde aus historischen Gründen als anomaler Zeeman-Effekt bezeichnet. 1902 erhielten Lorentz und Zeemann für ihre Entdeckung den Nobelpreis für Physik.

Pieter Zeeman verstarb am 9. Oktober 1943 in Amsterdam.



<http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/zeemanspec.html>



Der anomale Zeeman-Effekt (mit Spin) (= Normalfall!)

Gesamt magnetisches Moment aus Spin und Bahnanteil:

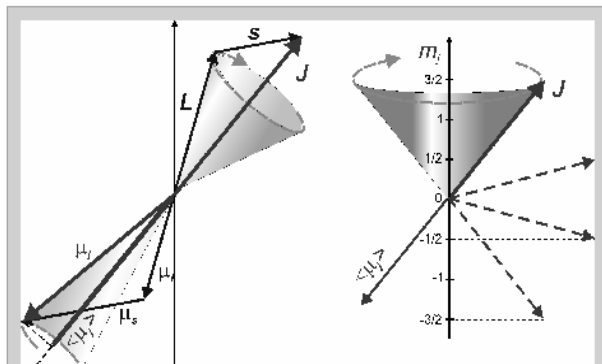
$$\vec{\mu}_j = -\frac{e}{2m_e}(\vec{L} + g_s\vec{S})$$

Wegen Präzession um $\vec{J}$ ist nur die Projektion relevant

$$\langle \vec{\mu}_j \rangle = \frac{\vec{\mu}_j \cdot \vec{J}}{J} = g_j \mu_B J / \hbar$$

mit dem Landé-Faktor

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$



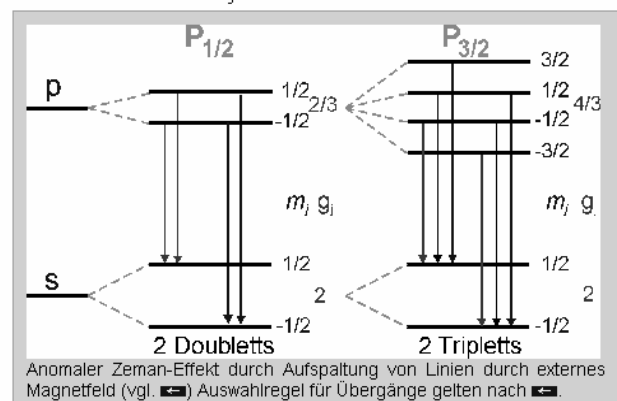
Linienaufspaltung im Magnetfeld analog zu $\vec{\mu}_j$

$$E_{m_j} = -\langle \vec{\mu}_j \rangle \cdot \vec{B} = \mu_B g_j m_j B$$

wegen g hängt die Aufspaltung von j ab.

Beispiele:

- ▶ $s=0, j=l \Rightarrow g_j=1$
- ▶ $l=0, j=s \Rightarrow g_j=2$
- ▶ $l=1, j=1/2 \Rightarrow g_j=2/3$
- ▶ $l=1, j=3/2 \Rightarrow g_j=4/3$





Vektormodell und Präzession im B-Feld

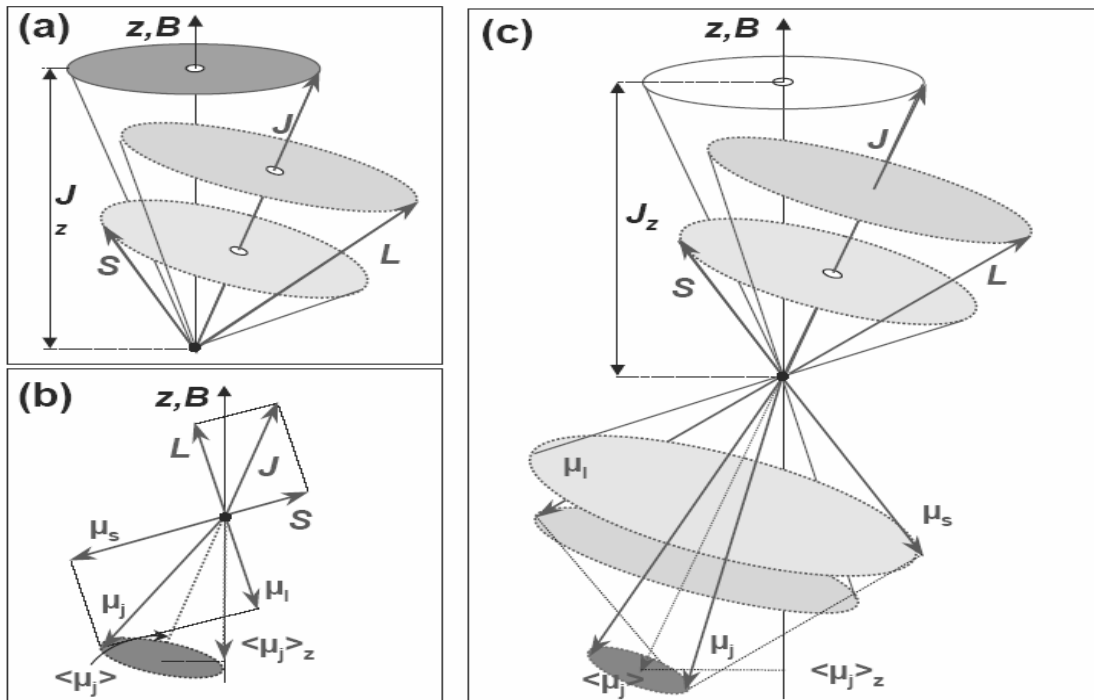


Abbildung 4.15: (a) Präzession von $\mathbf{J}$ um die z -Achse in einem äußeren Magnetfeld. (b) Vektorielle Zusammensetzung des Drehimpulses und des von ihm erzeugten magnetischen Moments. (c) Präzession aller magnetischen Momente und Drehimpulse um die Magnetfeldrichtung.



Berechnung des LandéFaktors

$$\begin{aligned}\langle \mu_j \rangle &= \frac{\mu_j \cdot \mathbf{J}}{|\mathbf{J}|} \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar} \left(g_l \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{J}}{|\mathbf{J}|} + g_s \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}}{|\mathbf{J}|} \right) \\ \langle \mu_j \rangle &= -\mu_B \frac{3j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2\sqrt{j(j+1)}} \\ &= g_j \mu_B \sqrt{j(j+1)} \\ &= g_j \mu_B \frac{|\mathbf{J}|}{\hbar}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{L} \cdot \mathbf{J} &= \frac{1}{2} [\mathbf{J}^2 + \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2] \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)] \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} &= \frac{1}{2} \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)]\end{aligned}$$

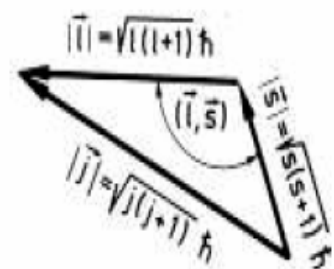
aus

VEKTORMODELL : $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ (zuerst für ein Elektron)

$$\text{Mathe : } a^2 = b^2 + c^2 - 2bc \cos \alpha \text{ ergibt mit } \begin{cases} a^2 = j(j+1)\hbar^2 \\ b^2 = s(s+1)\hbar^2 \\ c^2 = l(l+1)\hbar^2 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{|l||s|}{\hbar^2} \cos \alpha = \frac{a^2 - b^2 - c^2}{2} \rightarrow \text{aus (3) :}$$

$$V_{l,s} = \frac{a}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$





Aufspaltung beim anomalen Zeeman-Effekt

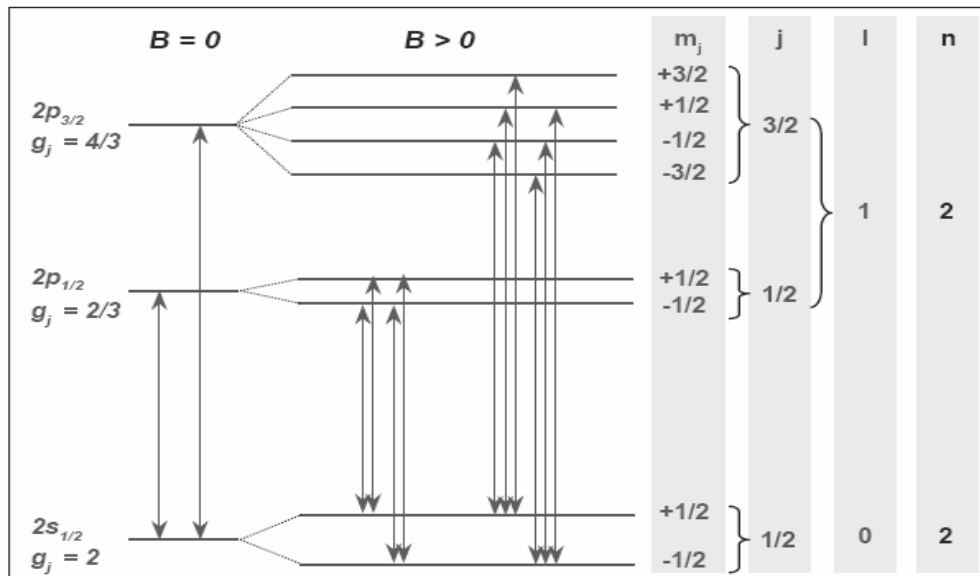


Abbildung 4.16: Zeeman-Aufspaltung für die Zustände $1s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$ des Wasserstoffs.

Da der Landé-Faktor g_j vom Zustand (j, l) abhängt, ist die Aufspaltung für Niveaus mit unterschiedlichen Quantenzahlen (j, l) im Gegensatz zum normalen Zeeman-Effekt verschieden. Das Aufspaltungsbild ist somit beim anomalen Zeeman-Effekt komplizierter.



Zum Mitnehmen

Beste Methode um g-Faktor zu messen:
Präzession des Myon-Spins in einem Magnetfeld

Kombination von Spin- und Bahnmagnetismus mit $g_s=2$ und $g_l=1$ führt zur Landé-Faktor zwischen 1 und 2.
Dies kann als anomaler Zeeman-Effekt beobachtet werden



Vorlesung 16:

Roter Faden:

**Elektronenspinresonanz (ESR)
Kernspinresonanz (NMR = Nuclear Magnetic Resonance)
Mehrelektron-Atome**

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

**Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag**

Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

1



Wie lässt sich Spinflip erzeugen, d.h. Kegelöffnung ändern?

Wie kann man die Kegelöffnung, die $\mathbf{j}$ um $\mathbf{B}$ beschreibt, vergrößern? (vergrößern von $\mathbf{B}$ vergrößert nur $\omega_{\text{präz.}}$)

Antwort: Veränderung durch ein zu $\mathbf{B}$ zusätzliches $\mathbf{B}'$ -Feld mit $\mathbf{B}' \perp \mathbf{B}$

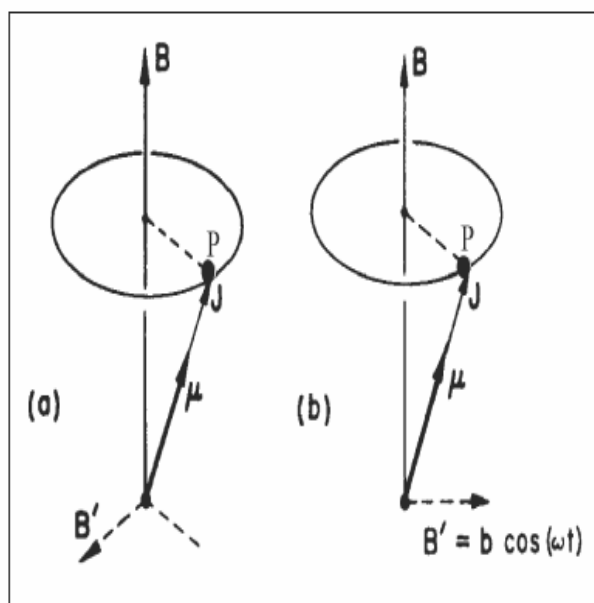


Abbildung 42:

Änderung der Präzessionswinkel durch horizontales Feld (a) oder durch oszillierendes Feld (b)

Kommt $\mathbf{j}$ bei $\mathbf{P}$ vorbei (das geschieht

$\frac{\omega_{\text{präz.}}}{2\pi}$ mal in der Sekunde), wirke $\mathbf{B}'$ in der

gezeigten Richtung.

z.B. $\mathbf{B}' = B_0 \cdot \cos \omega_{\text{präz.}} t$. Start wie im Bild mit $t=0$.

→ Überlagerung durch Kegelöffnung von $\mathbf{j}$ um $\mathbf{B}'$. Da $\mathbf{j}$ bei $\mathbf{P} \perp \mathbf{B}'$ ist $\mathbf{B}'$ Normalenvektor zu der Ebene, in der $\mathbf{j}$ den Kegelöffnungswinkel zu $\mathbf{B}$ ändert.

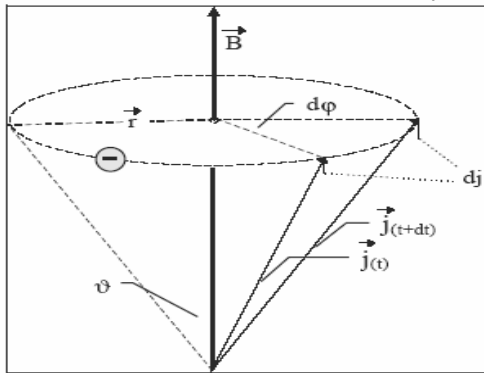
Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



Präzessionsfreq. eines magn. Dipols im B-Feld



$$\frac{dj}{dt} = \text{Drehmoment } \mu \times B$$

$$|dj| = j \cdot \sin \vartheta \cdot d\varphi$$

$$j \cdot \sin \vartheta \cdot \frac{d\varphi}{dt} = \mu \cdot B \cdot \sin \vartheta$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \omega_{\text{präz.}} = \frac{\mu}{j} \cdot B$$

$$\text{Damit gilt: } \omega_{\text{präz.}} = g \left| \frac{Q}{2m} \right| \cdot B$$

Abbildung 34

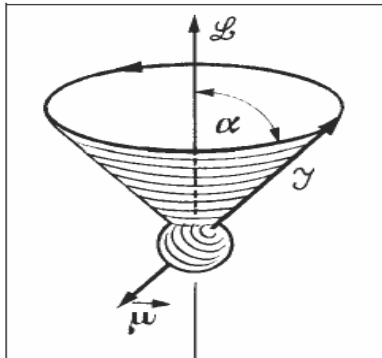


Abbildung 35:
Präzidierender atomarer Kreisel

Wir erwarten Präzession von Elektronenbahnen und Spins im B-Feld.

$$\text{Abschätzung: } B \text{ in Gauß} = 10^{-4} \frac{\text{Vs}}{\text{m}^2}$$

$$f_{\text{präz.}} = \frac{\omega}{2\pi} = 1,4 \text{ Megahertz} \cdot \frac{g \cdot B}{\text{Gauß}}$$

$$f_{\text{präz. Kern}} = (0,76 \text{ Kilowattertz/Gauß}) \cdot g \cdot B$$

$$\text{Hilfe: } \frac{\mu_0}{[B]} = 10^{-8} \text{ eV}$$

$$\frac{e\hbar}{2m}$$

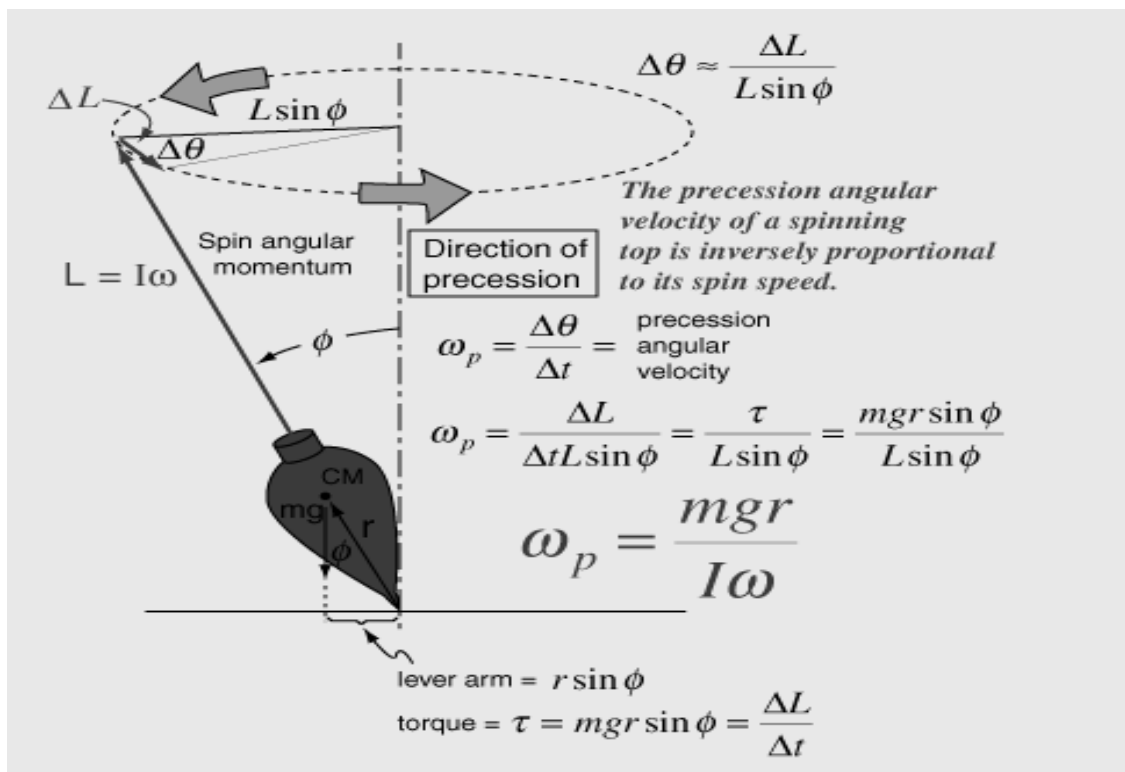
$$\vec{\omega}_{\text{präz.}} = g \cdot \mu_0 \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot B = g \cdot B \cdot \frac{10^{-8} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 2\pi}{6,6 \cdot 10^{-34}} [\text{s}^{-1}]$$

(wenn für B die Zahl in 'Gauß' angegeben wird)

$$\nu_{\text{res}} = \frac{g\mu_B B}{h} = 2,8 \times 10^{10} B_0 \left[\frac{\text{Hz}}{\text{T}} \right]$$

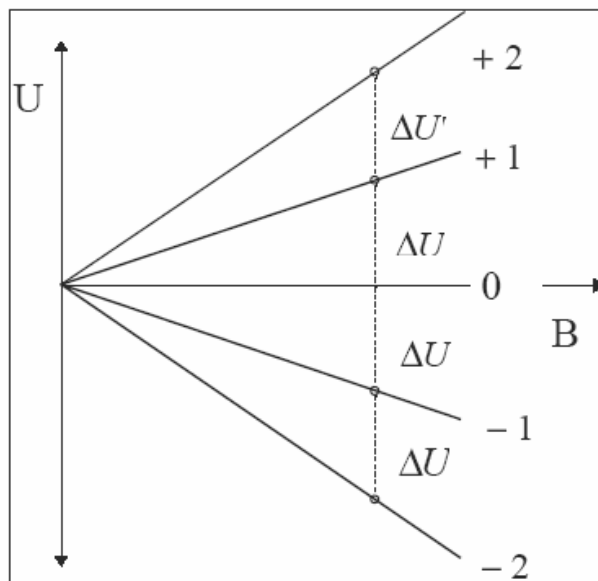


Vergleich mit klassischem Kreisel





Elektronenspinresonanz (ESR)



$$\Delta U = g\mu_0 B$$

Drehimpulsumklappung erfolgt nur bei $\omega = \Delta U$;

z.B. $\omega = 10^{-4} \text{ eV} \rightarrow \lambda = 1 \text{ cm}$

Abbildung 44



ESR-Spektrometer

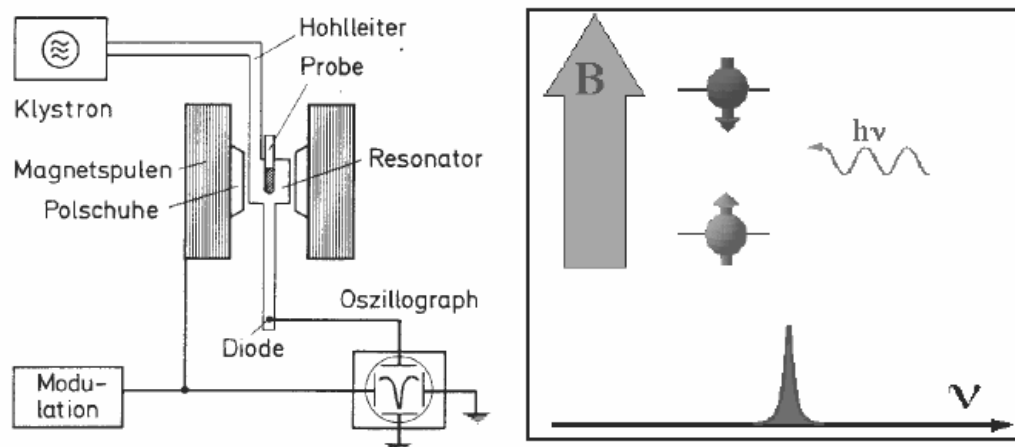
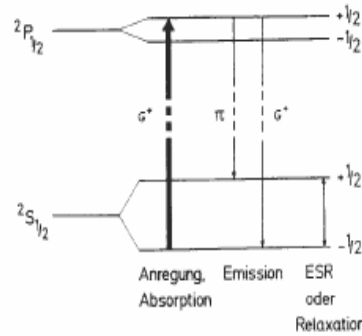


Abbildung 56: Schematische Darstellung des Versuchs. Die Spannung an den Spulen des Modulationsfeldes wird an die x -Ablenkung und das Signal der Diode an die y -Ablenkung eines Oszillographen gelegt. Im Falle der Resonanz nimmt das Signal in der Diode ab, da dem Feld Energie entzogen wird. Aus Haken Wolf, Atomphysik

Energieabsorption bei der Resonanzfrequenz

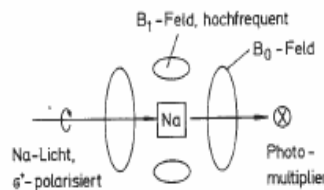


Elektronenspinresonanz (ESR)



$$\frac{N_+}{N_-} = 1 - \frac{g\mu_B B}{k_B T}$$

Verteilung der Teilchen im thermischen Gleichgewicht über Energieniveaus gegeben durch Boltzmannverteilung: $N \propto \exp(-E/kT)$



$$N_- - N_+ = N_- \left[1 - \left(1 - \frac{g\mu_B B}{k_B T} \right) \right] = \frac{N g \mu_B B}{2 k_B T} \quad (2.6)$$

$$\text{Signal} \propto N_- - N_+ \propto B/T$$

Abbildung 57: Nachweis der Elektronenspinresonanz durch einen viel höherenergetischen optischen Übergang. Gleichzeitig zeigt die Figur ein Beispiel für das sog. optische Pumpen. Aus Haken Wolf, Atomphysik



Kernspinresonanz wie ESR jedoch im Radiobereich statt Mikrowellenbereich

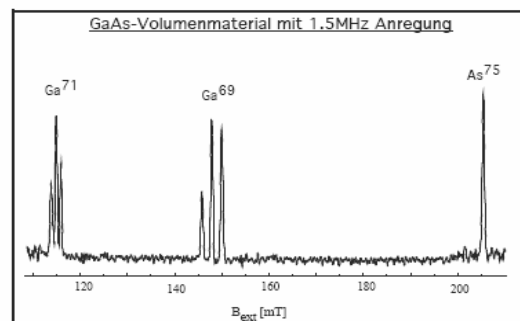
Für Protonen erhalten wir

$$\nu_{\text{Res}}(^1\text{H}) = \frac{5 \cdot 10^{-27} \cdot 2.8}{\frac{1}{2} \cdot 6.6 \cdot 10^{-34}} \frac{\text{J}}{\text{TJs}} = 44.6 \text{ MHz/T}.$$

NMR= Nuclear Magnetic Resonance

Einige relevante Feldstärken und Resonanzfrequenzen (=Spektrometerfrequenzen) sind $B = 8\text{T}$, entsprechend $\nu_{\text{H}} = 360 \text{ MHz}$ und $B = 13.5 \text{ T}$ mit $\nu_{\text{H}} = 600 \text{ MHz}$.

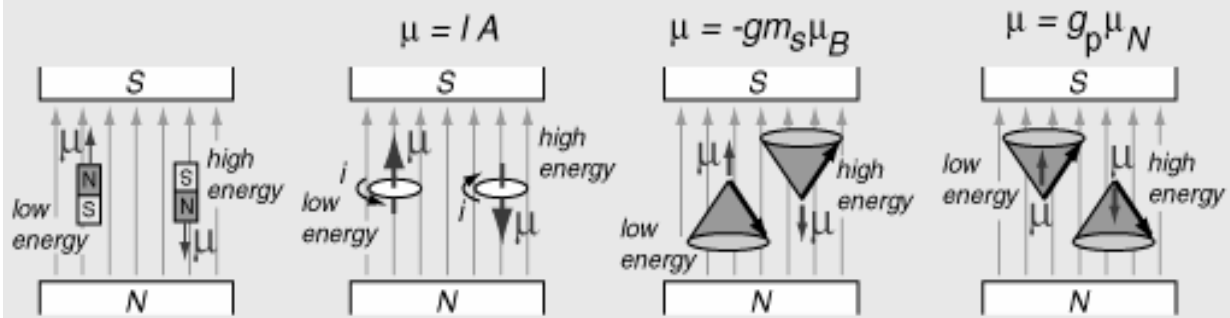
In der Figur ist als Beispiel ein Übersichtsspektrum von GaAs gezeigt, in dem die Resonanzen der drei relevanten Isotope erkennbar sind: ^{75}As , ^{71}Ga und ^{69}Ga . Wir erhalten dafür die folgenden Resonanzfrequenzen:



	μ	I	ν_{Larmor}/B MHz/T	$B_{\text{res}}@1.5 \text{ MHz}$ mT
^{69}Ga	2.016	1.5	10.2	146
^{71}Ga	2.562	1.5	13.0	115
^{75}As	1.439	1.5	7.31	205



Vergleich NMR und ESR



Bar magnet
magnetic moment

Current loop
magnetic moment

Electron spin
magnetic moment

Proton spin
magnetic moment

$$\omega_{\text{electron spin}} = \frac{2\mu_B}{\hbar} = \frac{2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} (5.79 \times 10^{-5} \text{ eV/T})(1\text{T})}{6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}} = 1.7608 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$$

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 28.025 \text{ GHz} \quad \text{Larmor frequency}$$

$$\omega_{\text{proton spin}} = \frac{2\mu_p B}{\hbar} = \frac{2(2.79)(3.15 \times 10^{-8} \text{ eV/T})(1\text{T})}{6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}} = 2.6753 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$$

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 42.5781 \text{ MHz} \quad \text{Larmor frequency}$$

$$g = 2$$

$$\mu_B = 5.79 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$g = 2.79$$

$$\mu_N = 3.15 \times 10^{-8} \text{ eV/T}$$

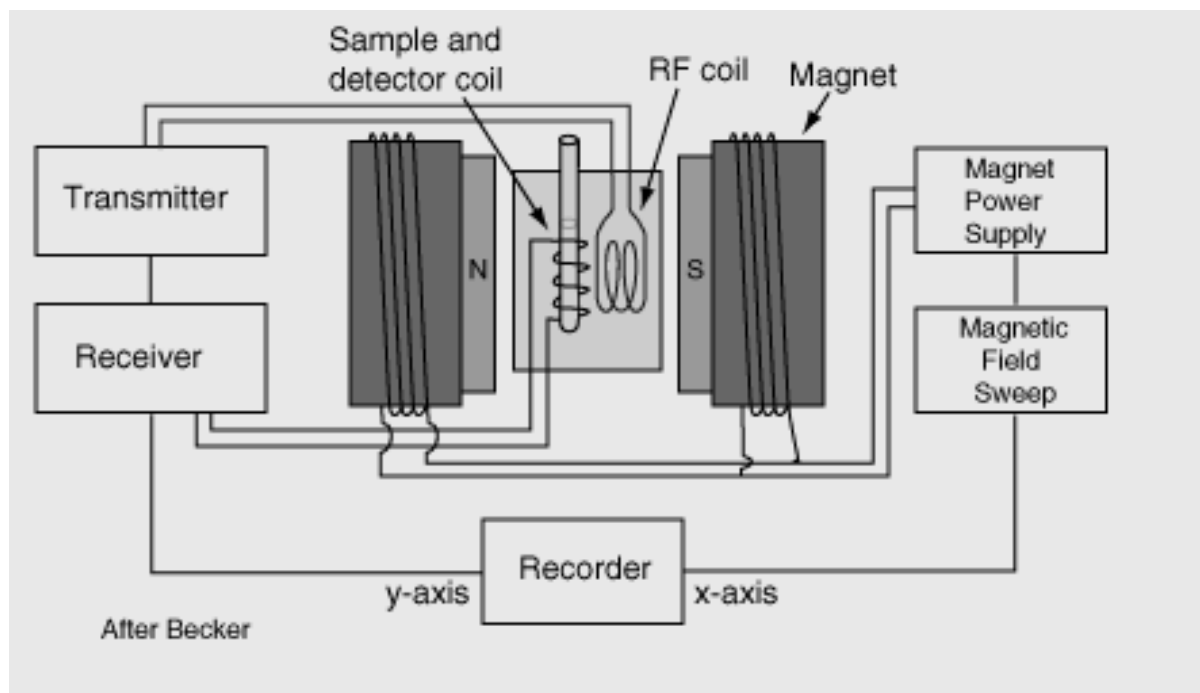
Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



NMR Spektrometer



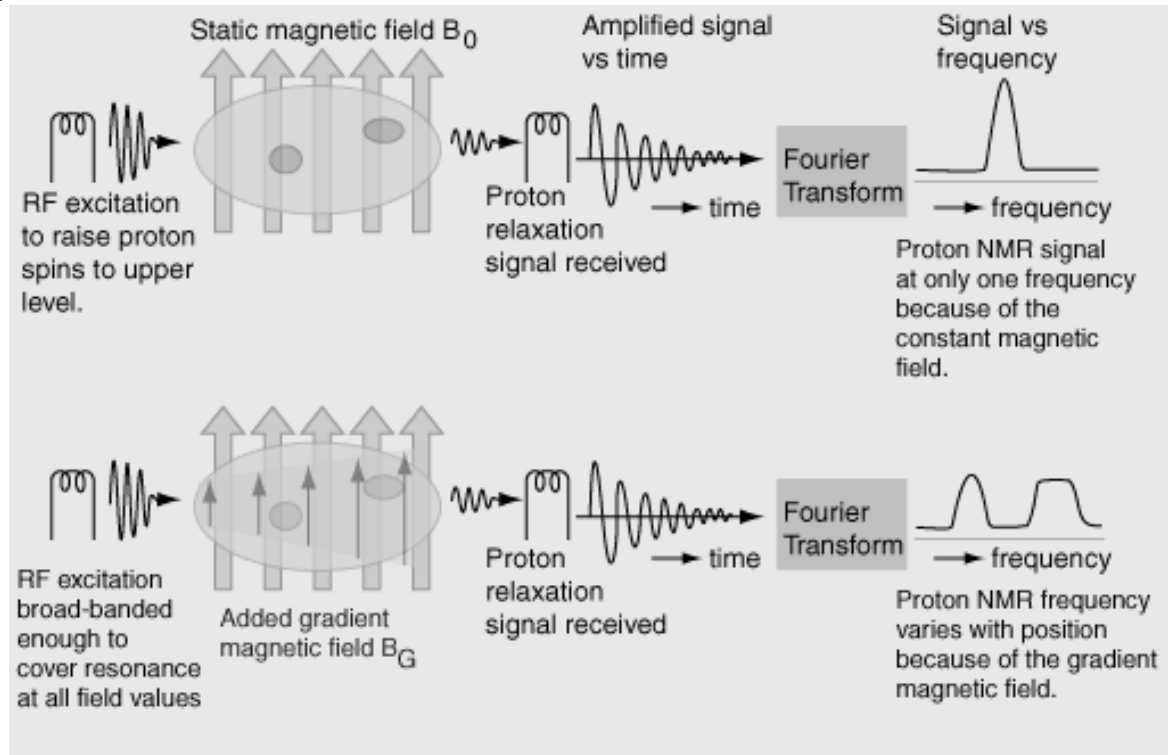
Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

10



Gepulste NMR



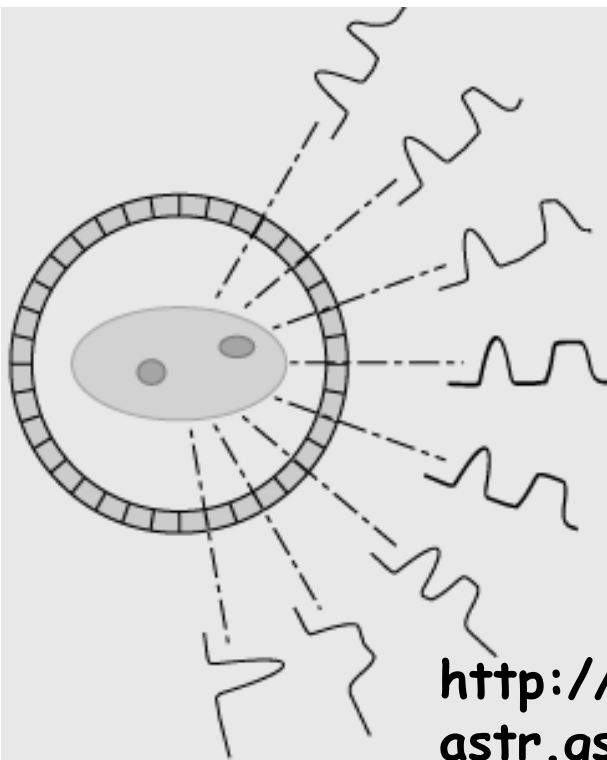
Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



2D NMR



When a rotating field gradient is used, linear positioning information is collected along a number of different directions. That information can be combined to produce a two-dimensional map of the proton densities. The proton NMR signals are quite sensitive to differences in proton content that are characteristic of different kinds of tissue. Even though the spatial resolution of MRI is not as great as a conventional x-ray film, its contrast resolution is much better for tissue. Rapid scanning and computer reconstruction give well-resolved images of organs.

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hframe.html>

Juni 9, 2005

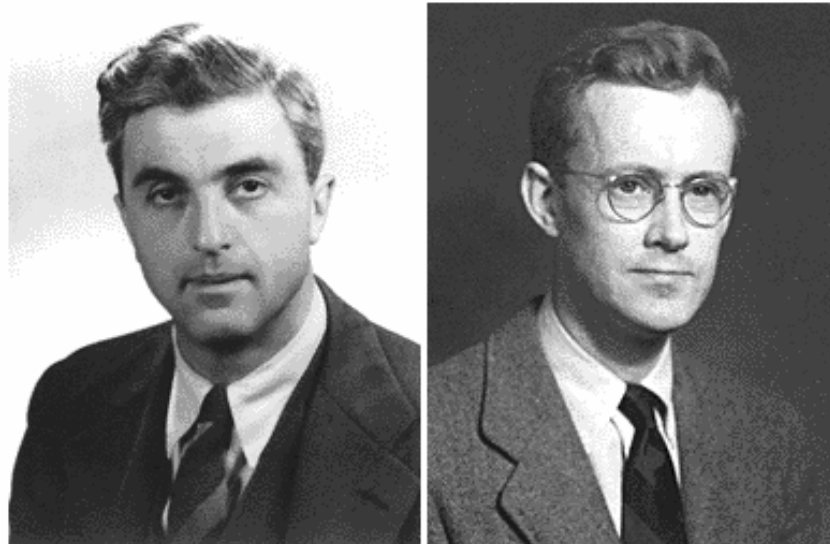
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Beginn der NMI (Nuclear Magnetic Imaging)

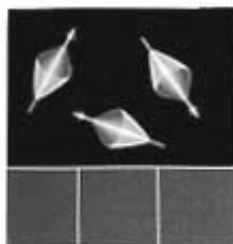
The foundations for imaging using magnetic resonance were laid in 1946 by Bloch and Purcell; Bloch at Stanford, studying liquids, and Purcell at Harvard, in solids. Though they received Nobel prizes for their discover, it was not until 1973 that nuclear magnetic resonance (NMR) was used to generate images.



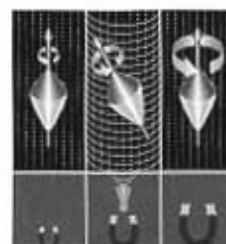
[READ MORE ABOUT THE HISTORY OF MRI](#)



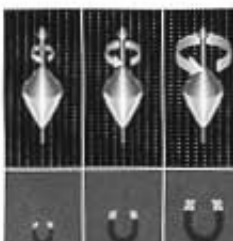
Wie "MRI" (Magnetic Resonance Imaging) funktioniert



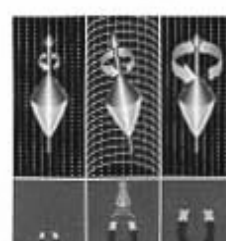
1. Hydrogen protons, positively charged particles in the hydrogen molecule's nucleus, normally spin in random directions



3. A brief radio signal, whose soundwave frequency equals the frequency of wobble of certain protons, knocks those protons out of alignment



2. Protons wobble in alignment with magnetic fields of varying intensity; frequency of wobble is proportionate to strength of individual magnetic field



4. When radio signal ceases, protons snap back into alignment with magnetic field, emitting a radio signal of their own, that announces the presence of a specific tissue

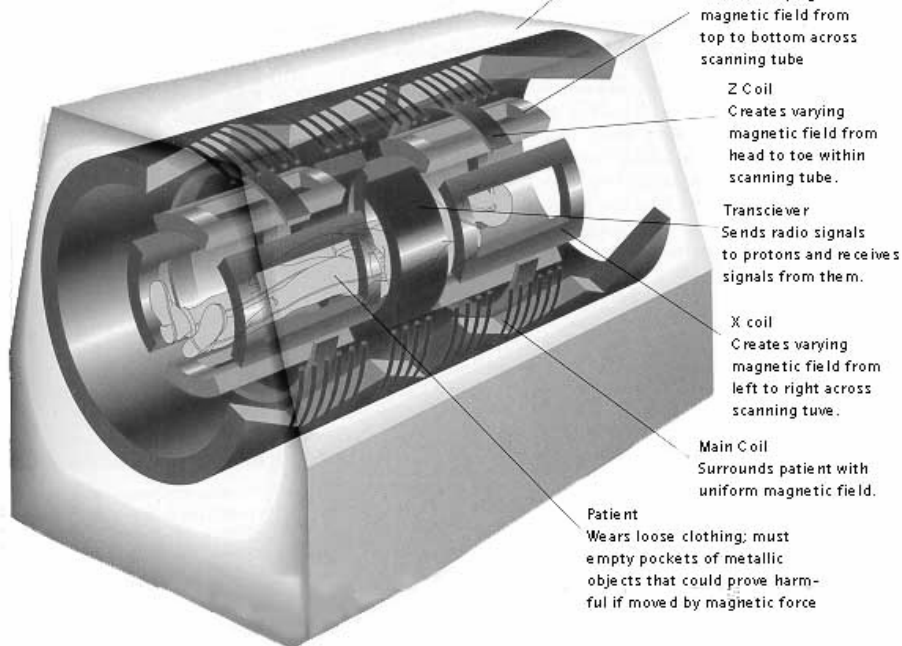
Like X ray, MRI is based on a discovery in the physic lab: when the nuclei of hydrogen atoms--single protons, all spinning randomly--are caught suddenly in a strong magnetic field, they tend to line up like so many compass needles. If the protons are then hit with a short, precisely tuned burst of radio waves, they will momentarily flip around. Then, in the process of returning to their original orientation, they resound with a brief radio signal of their own. The intensity of this emission reflects the number of protons in a particular "slice" of matter.



MRI scanner

CREATING REFINED ANATOMICAL IMAGES

Within the metallic cocoon of an MRI scanner, the patient is surrounded by four electromagnetic coils and the components of a transceiver



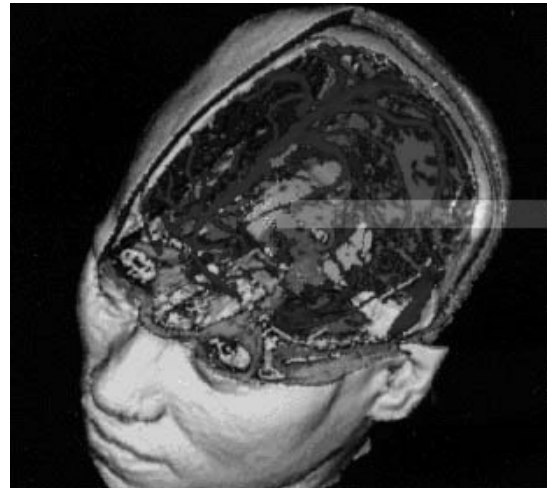
History of MRI

In 1890 Roy and Sherrington's paper 'On the regulation of blood supply of the brain' suggested that neural activity was accompanied by a regional increase in cerebral blood flow. Until 1990 there was no way of non-invasively measuring the flow of blood in cortical areas. Ogawa and Lee at the AT and T Bell Laboratories working on rodents discovered that the oxygenation level of blood acts as a contrast agent in MR images. They demonstrated that signals received from vessels were altered by drug-induced changes in blood flow from the brain. It was suggested that this is a consequence of changing the content of deoxyhemoglobin in the blood.

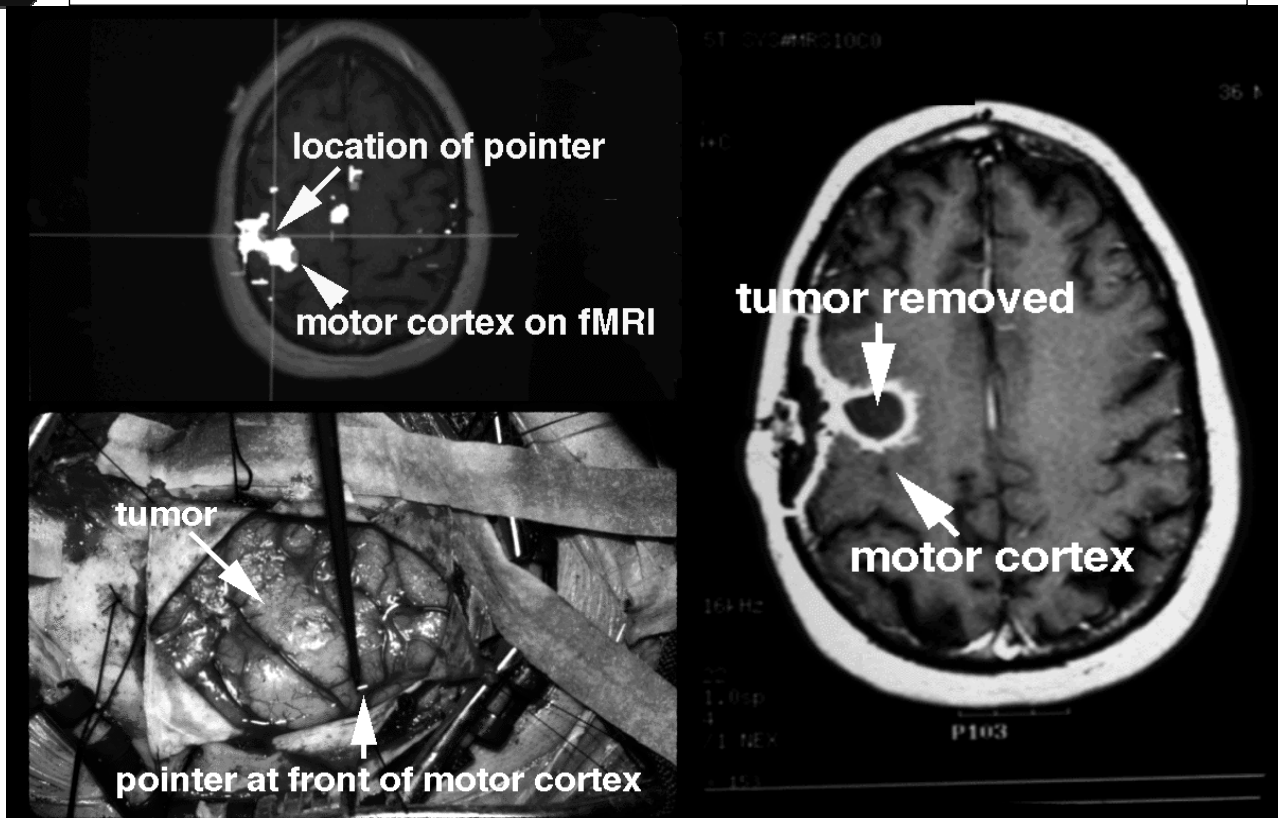


3D-Bilder möglich

Traditionally data has been analyzed by visual evaluation of image slices on radiological film. Digital representation of this data is rarely the norm despite the increased use of computers. To make use of the huge amount of data contained in fMRI scans, a doctor needs a composite image for making a quantitative rather than qualitative diagnoses. The clinically important features need to be extracted from the image, whether that is blood flow, tumor size, or cortical activity. In the case of fMRI it is necessary to know exactly where the areas of cortical stimulation are located



functional MRI (=interactives MRI) Beispiel für "image guided robotic surgery"





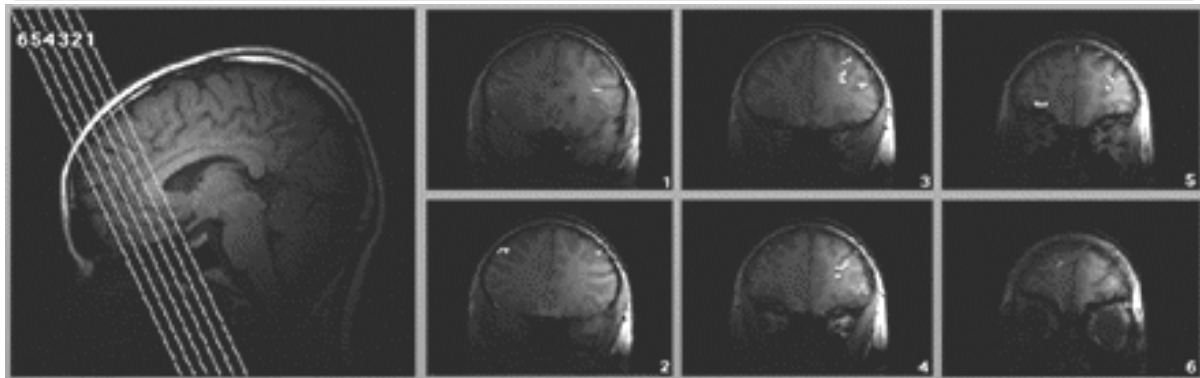
Violent Video Games Trigger Unusual Brain Activity in Aggressive Adolescents

Adolescents with disruptive behavior disorders (DBD) have different brain structure and brain activation patterns than nonaggressive adolescents.

When watching violent video games, aggressive adolescents had less brain activation than the nonaggressive control group.

Normal adolescents previously exposed to greater amounts of violent media also exhibited differences in brain function.

Adolescents with DBD showed abnormal development of the brain's frontal lobes.



Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

19



Mehrelektron-Atome

Juni 9, 2005

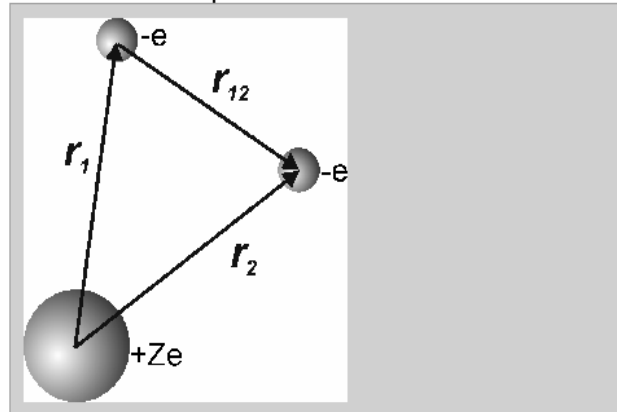
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

20



Helium-Atom

Atomkern mit Ladungszahl Z wird als unendlich schwerer Massenpunkt betrachtet.



Die potentielle Energie aller Elektronen ist:

$$E_{pot} = -\sum_i \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

wobei der 2. Term die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt.

Die Schrödinger-Gleichung des Helium-Atoms

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Delta_1 + \Delta_2) + E_{pot} \right) \psi = E_{ges} \psi$$

mit der potentiellen Energie

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Modell unabhängiger Teilchen:

- Vernachlässige Elektron-Elektron-Wechselwirkung
- Lösungen wie im H-Atom

Bindungsenergie, je 1 Elektron in Zuständen a und b :

$$E = E_a + E_b = -R_H hc Z^2 \left(\frac{1}{n_a^2} + \frac{1}{n_b^2} \right)$$

Bei Helium im Grundzustand (beide Elektronen in 1S) ist $E = -2 \times 2^2 \times 13.6 = -2 \times 54.4 = -108.8$ eV.

Tatsächliche Bindungsenergie: -24,6 eV für erstes Elektron, -54.4 eV für das zweite. Die Differenz folgt aus Abschirmung des Kerns durch das erste Elektron.

Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

21



Wellenfunktion des Heliumatoms

Bahnanteil der Wellenfunktion

Wahrscheinlichkeit, Elektron 1 bei r_1 und Elektron 2 bei r_2 zu finden, wenn e_1 im Zustand a und e_2 in b ist:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \equiv \psi_a(1) \psi_b(2)$$

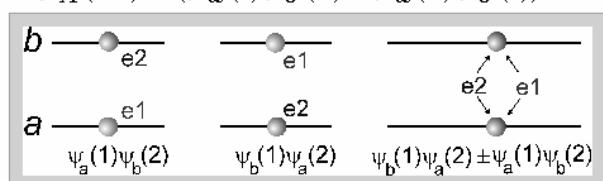
Elektronen sind aber ununterscheidbar, die Wellenfunktion muss symmetrisiert werden.

Symmetrische Wellenfunktion

$$\psi_s(1,2) = (\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_a(2) \psi_b(1)) / \sqrt{2}$$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi_A(1,2) = (\psi_a(1) \psi_b(2) - \psi_a(2) \psi_b(1)) / \sqrt{2}$$



Die antisymmetrische Wellenfunktion verschwindet für

- $a = b$ oder $r_1 = r_2$

daher geringere Abstoßung der Elektronen als bei ψ_s und stärker Bindung

Spinanteil der Wellenfunktion

Symmetrische Wellenfunktion

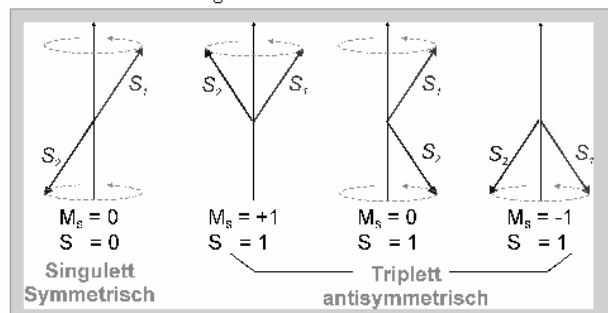
$$\chi_S(1,2) \sqrt{2} = \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) \\ \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\uparrow}(2) \chi_{\downarrow}(1) \\ \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) \end{cases}$$

Gesamtspin $S = 1$, Projektion $M_S = 1, 0, -1$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\chi_A(1,2) \sqrt{2} = \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\uparrow}(2) \chi_{\downarrow}(1)$$

mit $S = 0$ und $M_S = 0$



Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

22



Wellenfunktion des Heliumatoms

Bahnanteil der Wellenfunktion

Wahrscheinlichkeit, Elektron 1 bei r_1 und Elektron 2 bei r_2 zu finden, wenn e_1 im Zustand a und e_2 in b ist:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \equiv \psi_a(1)\psi_b(2)$$

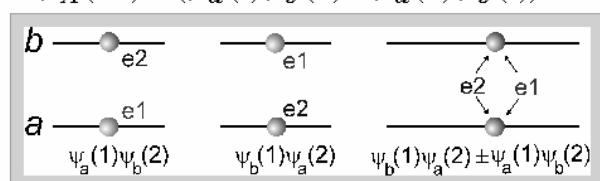
Elektronen sind aber ununterscheidbar, die Wellenfunktion muss symmetrisiert werden.

Symmetrische Wellenfunktion

$$\psi_S(1,2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)) / \sqrt{2}$$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi_A(1,2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)) / \sqrt{2}$$



Die antisymmetrische Wellenfunktion verschwindet für
 ▶ $a = b$ oder $r_1 = r_2$

daher geringere Abstoßung der Elektronen als bei ψ_S und stärker Bindung

Spinanteil der Wellenfunktion

Symmetrische Wellenfunktion

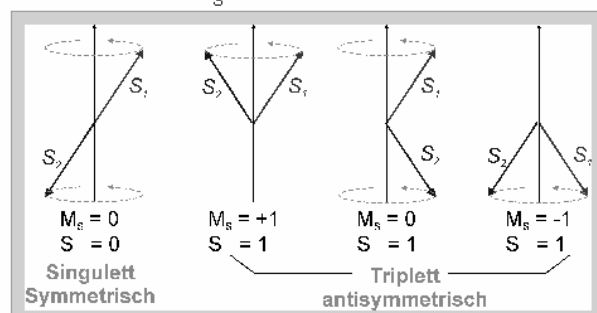
$$\chi_S(1,2)\sqrt{2} = \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) \\ \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\uparrow}(2)\chi_{\downarrow}(1) \\ \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) \end{cases}$$

Gesamtspin $S = 1$, Projektion $M_S = 1, 0, -1$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\chi_A(1,2)\sqrt{2} = \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\uparrow}(2)\chi_{\downarrow}(1)$$

mit $S = 0$ und $M_S = 0$



Ortho- und Parahelium

Es gilt:

Die Gesamtwellenfunktion der Elektronen muss antisymmetrisch sein.

Helium kann demnach in 2 Formen vorliegen:

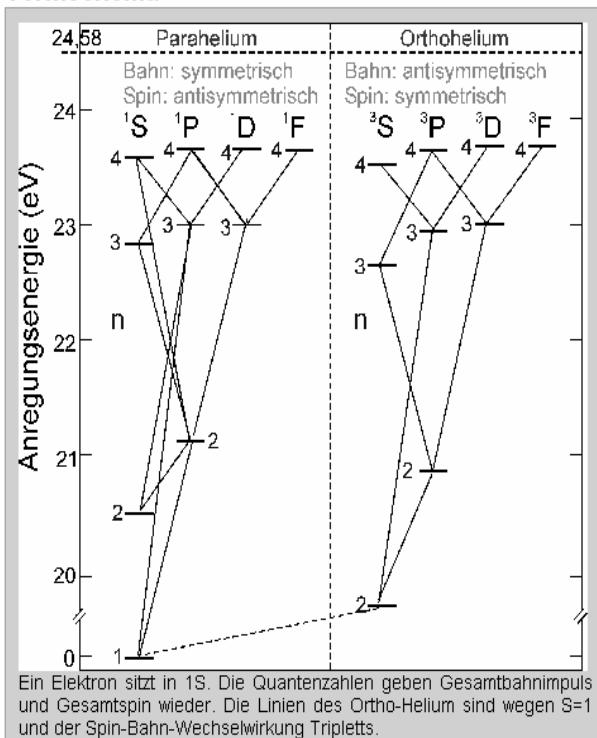
Parahelium ($S=0$)

- ▶ Spinfunktion antisymmetrisch
- ▶ Bahnfunktion symmetrisch
- ▶ Beide Elektronen können in 1S sitzen (Grundzustand)
- ▶ Beide Elektronen können am gleichen Ort sein (Abstoßung, geringere Bindungsenergie)
- ▶ Keine Feinaufspaltung der Linien

Orthohelium ($S=1$)

- ▶ Spinfunktion symmetrisch
- ▶ Bahnfunktion antisymmetrisch
- ▶ Im Grundzustand ist 2. Elektron in 2S
- ▶ Linien zeigen Feinstruktur (Triplets, wegen Spin-Bahn-Kopplung)

Termschema





Aufbau des Periodensystems

In Modell unabhängiger Teilchen entsteht das Periodensystem durch Auffüllen der Niveaus unter Berücksichtigung folgender Regeln:

Pauli-Prinzip

Zwei Elektronen dürfen nicht Zustände mit den gleichen Quantenzahlen einnehmen.

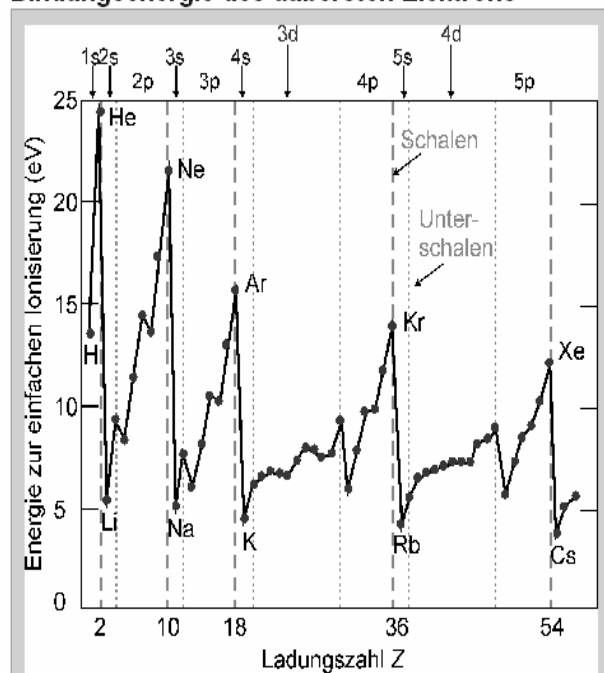
Hundsche Regel

Äquivalente Niveaus werden so besetzt, dass der Gesamtspin maximal ist (keine strenge Regel).

Nomenklatur:

- ▶ Einelektronenniveaus gegeben durch n, l, m, m_s
- ▶ Äquivalent sind Elektronen mit gleichem n, l
- ▶ Schreibweise bei X äquivalenten Elektronen: $n l^X$
- ▶ Schalenabschlüsse bei 2, 10, 18, 36, 54, 86, 118 Elektronen sind besonders stabil mit Gesamtdrehimpuls $J=0$.
- ▶ Unterschalen bei Auffüllung aller Niveaus mit n, l

Bindungsenergie des äußersten Elektrons

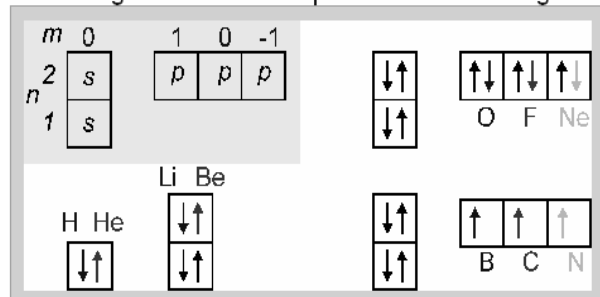


Interaktives Periodensystem

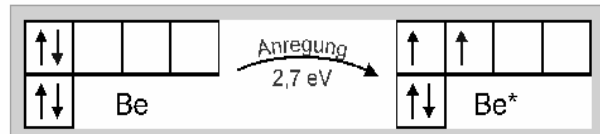


Elektronenstruktur der Elemente

Besetzung nach Pauli-Prinzip und Hundscher Regel:



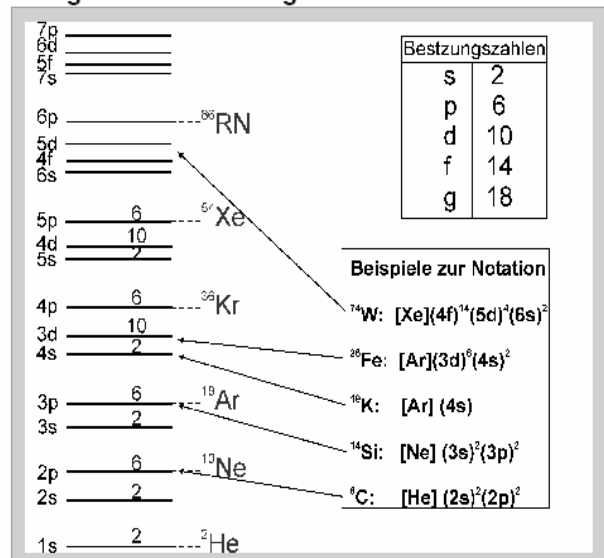
- ▶ Alkali-Metalle (Li, Na, K...) geben 1 Elektron leicht ab → Leitfähigkeit.
- ▶ Erdalkali-Metalle (Be, Mg, Ca...) sind 2-wertig



- ▶ Bohr-Gruppe (B, Al...) ist 3-wertig
- ▶ Kohlenstoff-Gruppe (C, Si...) ist 4-wertig



Energetische Staffelung der Niveaus



Notation der Elektronenkonfiguration

$[Y] (n_1 l_1)^{x_1} (n_2 l_2)^{x_2} \dots$ Mit Y: Atom der letzten abgeschlossenen Schale, n Hauptquantenzahl, l = ($s, p, d, \dots$) Drehimpuls des Einteilchenniveaus, X Zahl der Elektronen in diesem Niveau.



LS-Kopplung

Bahndrehimpulse der Elektronen koppeln zu

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i; \quad |\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

Spins der Elektronen koppeln zu Gesamtspin

$$\vec{S} = \sum \vec{S}_i; \quad |\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$$

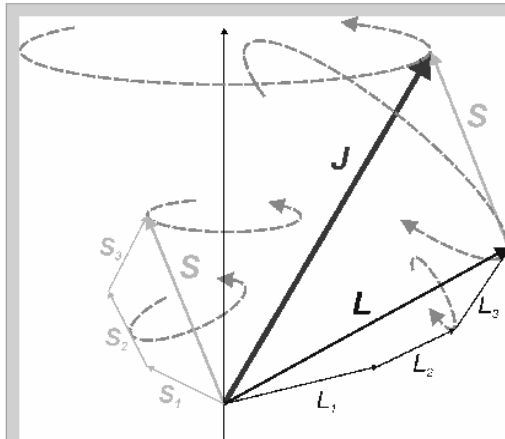
Der Gesamtdrehimpuls ist

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

mit

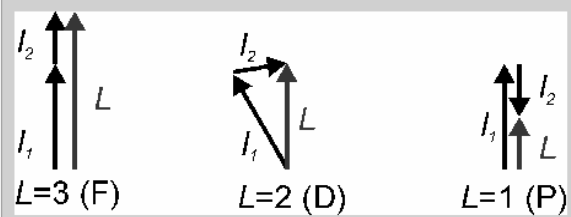
$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

$$J_z = M\hbar, \quad M = J, J-1, \dots, -J$$



Beispiel: 2 Elektronen mit $l_1 > l_2$

Mögliche Werte für L : $l_1+l_2, l_1+l_2-1, \dots, l_1-l_2$



Hierbei handelt es sich nicht um die Drehimpulsvektoren, sondern um eine symbolische Addition der Quantenzahlen.

Term: alle Zustände mit gleichem L und S .

Spin-Bahn-Kopplung $\rightarrow (2S+1)$ Kombinationen:

$J = L+S, L+S-1, \dots, L-S$ (Multipletts)

- 2 Elektronen: $S=0$ (Singulett) oder $S=1$ (Triplett)
- 3 Elektronen: $S=1/2$ (Doublett) oder $S=3/2$ (Quartett)
- 4 Elektronen: $S=0$ oder $S=1$ oder $S=2$ (Quintett)

Notation:

Term	Niveau
Multiplicität $2S+1$	$2S+1$
L	L
Bahndrehimpuls (S,P,D,...)	Gesamtdrehimpuls

Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

27



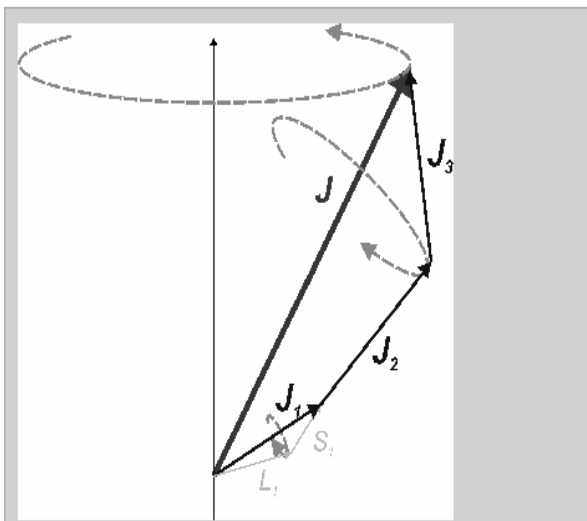
JJ-Kopplung

Mit steigender Kernladungszahl Z wird Spin-Bahn-Kopplung einzelner Elektronen stärker.

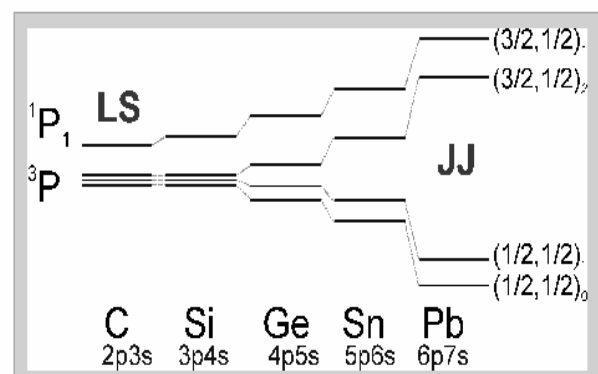
$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i$$

Die J_i koppeln zum Gesamtdrehimpuls des Atoms:

$$\vec{J} = \sum \vec{J}_i; \quad |\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$



LS- und JJ-Kopplung gibt es nur bei leichten bzw. schweren Atomen in Reinform. Die Niveaus im Übergangsbereich lassen sich nicht einfach zuordnen.



Notation: $(J_1, J_2, J_3)_J$

Juni 9, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

28



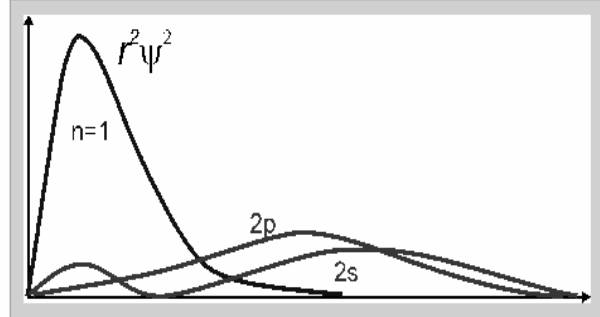
Atome mit 1 oder 2 Valenzelektronen

Abgeschlossene Schalen bilden Rumpf mit $L=0$, $S=0$.

Elektronen außerhalb (Valenzelektronen) bestimmen

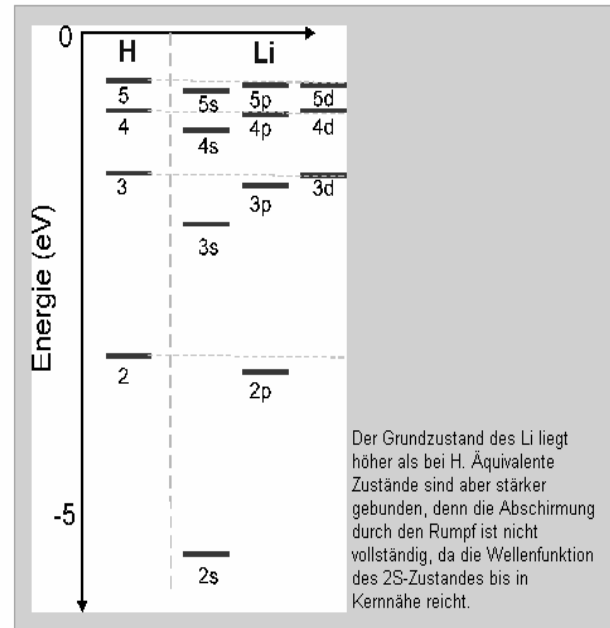
- chemische Eigenschaften
- metallische Eigenschaften
- magnetische Eigenschaften

Der Rumpf schirmt Kernladung teilweise ab.



Atome mit 1 Valenzelektron (Li, Na ...) haben wasserstoffähnliche Spektren. Äquivalente Niveaus sind aber stärker gebunden als im H-Atom.

Termchema des Lithium-Atoms



Atome mit 2 Valenzelektronen (Be, Mg ...) treten, wie Helium, in zwei Zuständen (Singulett und Triplett) auf.



Zum Mitnehmen

Aufspaltung der Spektrallinien kann im optischen Bereich (normaler und anomaler) Zeeman-Effekt, im Mikrowellenbereich (ESR) und Radiobereich (NMR) beobachtet werden.

NMR führt zu interessanten Anwendungen als 3D Imaging im Bereich der Medizin

Mehrelektronen: Besetzung der Energieniveaus bestimmt durch Pauli-Prinzip und Hundsche Regeln.

Pauli-Prinzip verbietet mehrere Elektronen in Zustand mit gleichen Quantenzahlen.



Vorlesung 17:

Roter Faden:

**Mehrelektron-Atome
Periodensystem**

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

**Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag**

Juni 14, 2005

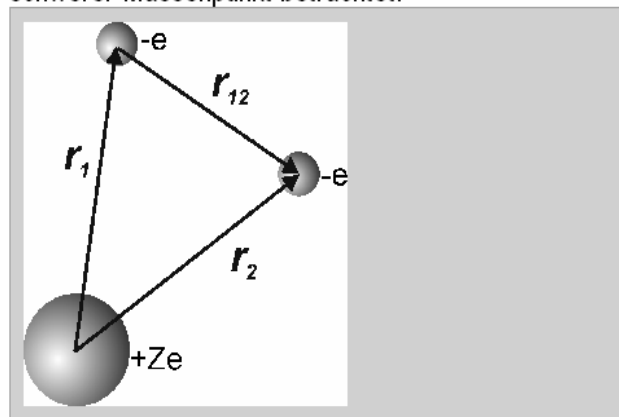
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

1



Helium-Atom

Atomkern mit Ladungszahl Z wird als unendlich schwerer Massenpunkt betrachtet.



Die potentielle Energie aller Elektronen ist:

$$E_{pot} = -\sum_i \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

wobei der 2. Term die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt.

Die Schrödinger-Gleichung des Helium-Atoms

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Delta_1 + \Delta_2) + E_{pot} \right) \psi = E_{ges} \psi$$

mit der potentiellen Energie

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Modell unabhängiger Teilchen:

- Vernachlässige Elektron-Elektron-Wechselwirkung
- Lösungen wie im H-Atom

Bindungsenergie, je 1 Elektron in Zuständen a und b :

$$E = E_a + E_b = -R_H hc Z^2 \left(\frac{1}{n_a^2} + \frac{1}{n_b^2} \right)$$

Bei Helium im Grundzustand (beide Elektronen in 1S) ist $E = -2 \times 2^2 \times 13.6 = -2 \times 54.4 = -108.8$ eV.

Tatsächliche Bindungsenergie: -24,6 eV für erstes Elektron, -54.4 eV für das zweite. Die Differenz folgt aus Abschirmung des Kerns durch das erste Elektron.

Juni 14, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



Wellenfunktion des Heliumatoms

Bahnanteil der Wellenfunktion

Wahrscheinlichkeit, Elektron 1 bei r_1 und Elektron 2 bei r_2 zu finden, wenn e_1 im Zustand a und e_2 in b ist:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \equiv \psi_a(1)\psi_b(2)$$

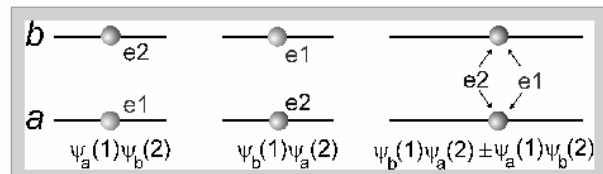
Elektronen sind aber ununterscheidbar, die Wellenfunktion muss symmetrisiert werden.

Symmetrische Wellenfunktion

$$\psi_S(1,2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)) / \sqrt{2}$$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi_A(1,2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)) / \sqrt{2}$$



Die antisymmetrische Wellenfunktion verschwindet für
 ▶ $a = b$ oder $r_1 = r_2$

daher geringere Abstoßung der Elektronen als bei ψ_S
 und stärker Bindung

Spinanteil der Wellenfunktion

Symmetrische Wellenfunktion

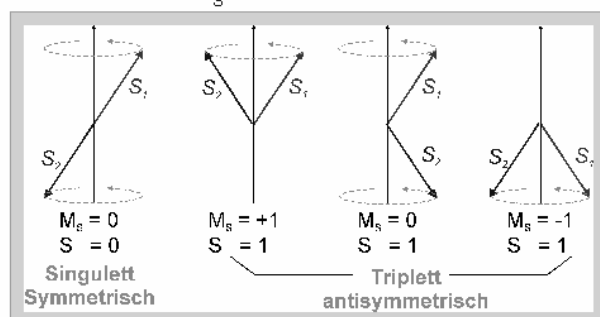
$$\chi_S(1,2)\sqrt{2} = \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) \\ \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\uparrow}(2)\chi_{\downarrow}(1) \\ \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) \end{cases}$$

Gesamtspin $S = 1$, Projektion $M_S = 1, 0, -1$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\chi_A(1,2)\sqrt{2} = \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\uparrow}(2)\chi_{\downarrow}(1)$$

mit $S = 0$ und $M_S = 0$



Ortho- und Parahelium

Es gilt: **Pauli-Postulat**

Die Gesamtwellenfunktion der Elektronen muss antisymmetrisch sein.

Helium kann demnach in 2 Formen vorliegen:

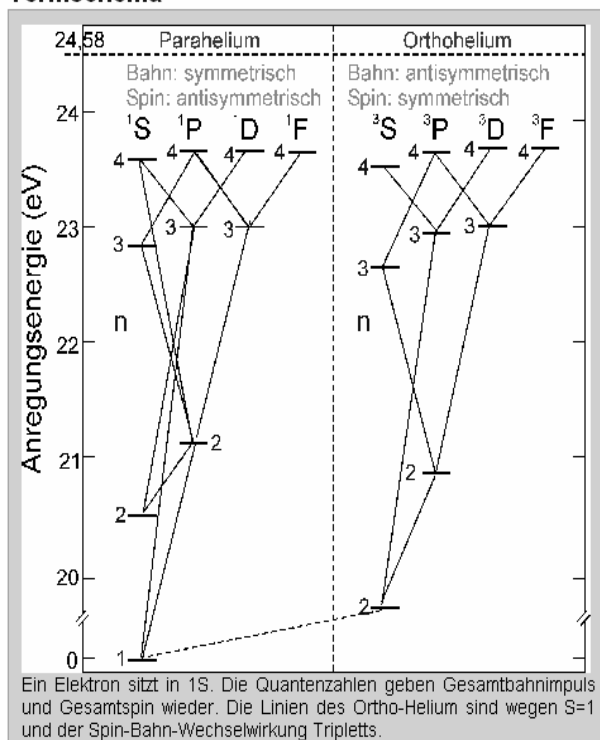
Parahelium ($S=0$)

- ▶ Spinfunktion antisymmetrisch
- ▶ Bahnfunktion symmetrisch
- ▶ Beide Elektronen können in 1S sitzen (Grundzustand)
- ▶ Beide Elektronen können am gleichen Ort sein (Abstoßung, geringere Bindungsenergie)
- ▶ Keine Feinaufspaltung der Linien

Orthohelium ($S=1$)

- ▶ Spinfunktion symmetrisch
- ▶ Bahnfunktion antisymmetrisch
- ▶ Im Grundzustand ist 2. Elektron in 2S
- ▶ Linien zeigen Feinstruktur (Triplets, wegen Spin-Bahn-Kopplung)

Termschema





Aufbau des Periodensystems

In Modell unabhängiger Teilchen entsteht das Periodensystem durch Auffüllen der Niveaus unter Berücksichtigung folgender Regeln:

Pauli-Prinzip

Zwei Elektronen dürfen nicht Zustände mit den gleichen Quantenzahlen einnehmen.

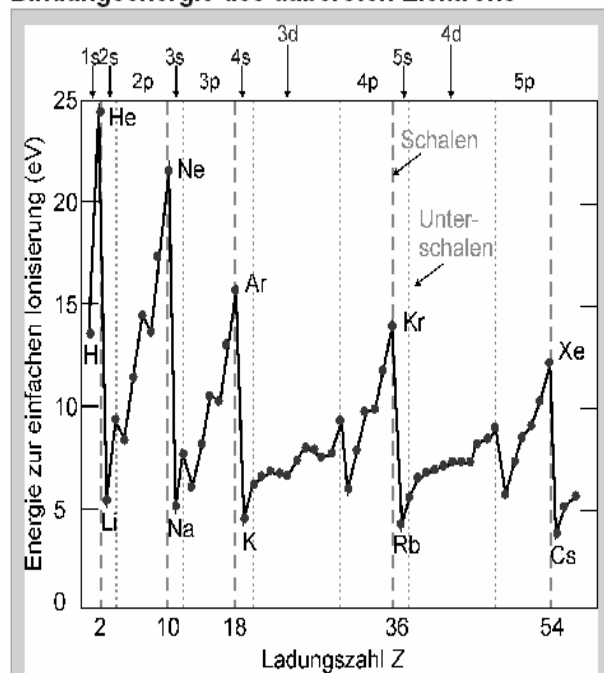
Hundsche Regel

Äquivalente Niveaus werden so besetzt, dass der Gesamtspin maximal ist (keine strenge Regel).

Nomenklatur:

- ▶ Einelektronenniveaus gegeben durch n, l, m, m_s
- ▶ Äquivalent sind Elektronen mit gleichem n, l
- ▶ Schreibweise bei X äquivalenten Elektronen: $n l^X$
- ▶ Schalenabschlüsse bei 2, 10, 18, 36, 54, 86, 118 Elektronen sind besonders stabil mit Gesamtdrehimpuls $J=0$.
- ▶ Unterschalen bei Auffüllung aller Niveaus mit n, l

Bindungsenergie des äußersten Elektrons



Interaktives Periodensystem



Periodensystem

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Ha													
58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				



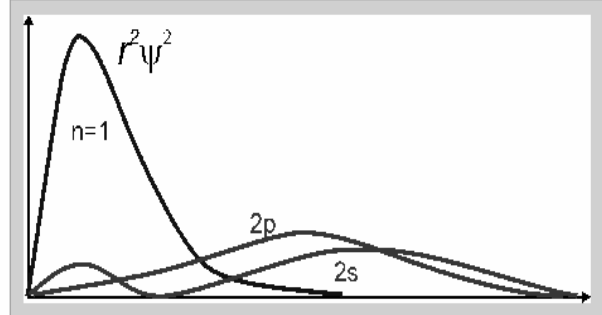
Atome mit 1 oder 2 Valenzelektronen

Abgeschlossene Schalen bilden Rumpf mit $L=0, S=0$.

Elektronen außerhalb (Valenzelektronen) bestimmen

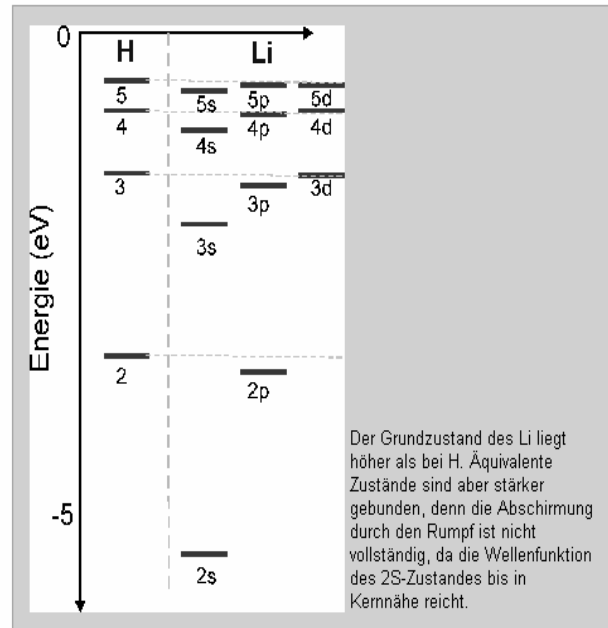
- chemische Eigenschaften
- metallische Eigenschaften
- magnetische Eigenschaften

Der Rumpf schirmt Kernladung teilweise ab.



Atome mit 1 Valenzelektron (Li, Na ...) haben wasserstoffähnliche Spektren. Äquivalente Niveaus sind aber stärker gebunden als im H-Atom.

Termschema des Lithium-Atoms



Atome mit 2 Valenzelektronen (Be, Mg ...) treten, wie Helium, in zwei Zuständen (Singulett und Triplett) auf.



LS-Kopplung

Bahndrehimpulse der Elektronen koppeln zu

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i; \quad |\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

Spins der Elektronen koppeln zu Gesamtspin

$$\vec{S} = \sum \vec{S}_i; \quad |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

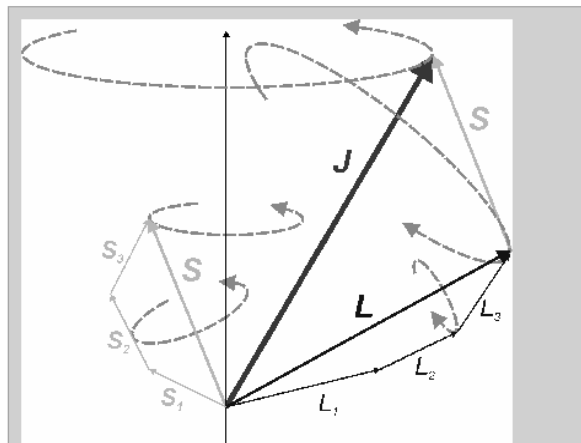
Der Gesamtdrehimpuls ist

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

mit

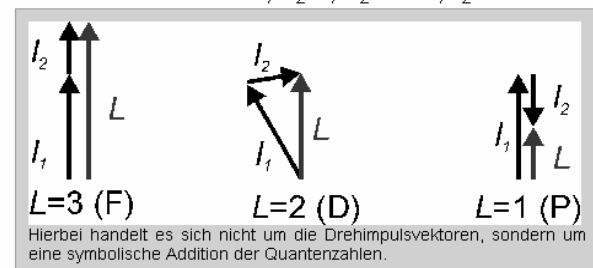
$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

$$J_z = M\hbar; \quad M = J, J-1, \dots, -J$$



Beispiel: 2 Elektronen mit $l_1 > l_2$

Mögliche Werte für L : $l_1+l_2, l_1+l_2-1, \dots, l_1-l_2$



Term: alle Zustände mit gleichem L und S .

Spin-Bahn-Kopplung $\rightarrow (2S+1)$ Kombinationen:

$J = L+S, L+S-1, \dots, L-S$ (Multipletts)

- 2 Elektronen: $S=0$ (Singulett) oder $S=1$ (Triplett)
- 3 Elektronen: $S=1/2$ (Doublett) oder $S=3/2$ (Quartett)
- 4 Elektronen: $S=0$ oder $S=1$ oder $S=2$ (Quintett)

Notation:

Term	Niveau
Multiplicität $2S+1$	$2S+1$
L	L
Bahndrehimpuls (S,P,D,...)	Gesamtdrehimpuls



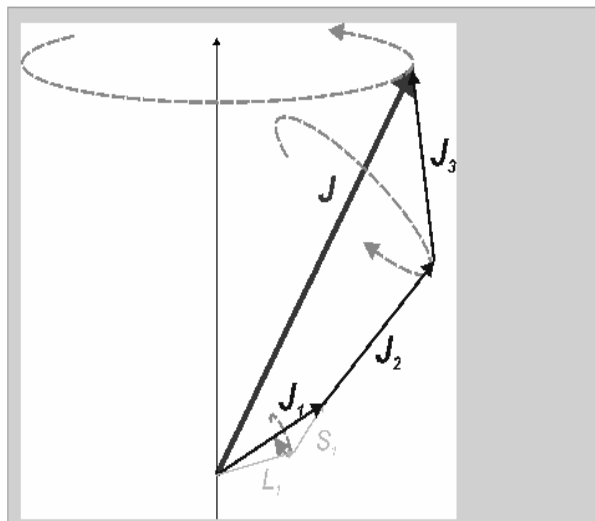
JJ-Kopplung

Mit steigender Kernladungszahl Z wird Spin-Bahn-Kopplung einzelner Elektronen stärker.

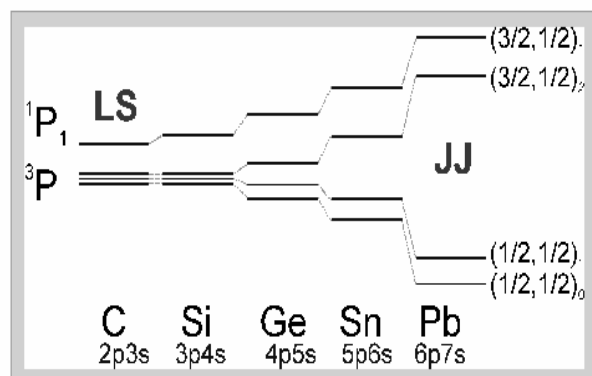
$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i$$

Die J_i koppeln zum Gesamtdrehimpuls des Atoms:

$$\vec{J} = \sum \vec{J}_i; |\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$



LS- und JJ-Kopplung gibt es nur bei leichten bzw. schweren Atomen in Reinform. Die Niveaus im Übergangsbereich lassen sich nicht einfach zuordnen.

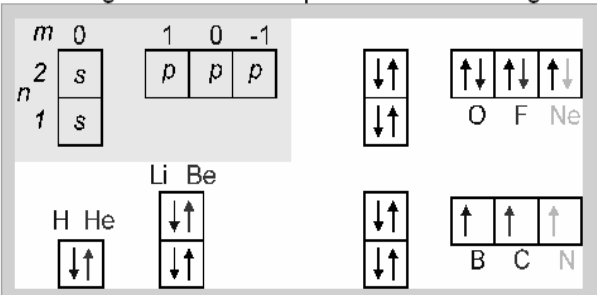


Notation: $(J_1, J_2, J_3)_J$

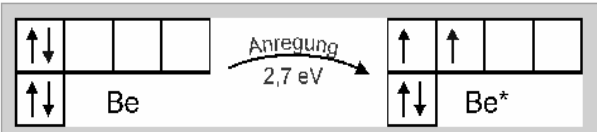


Elektronenstruktur der Elemente

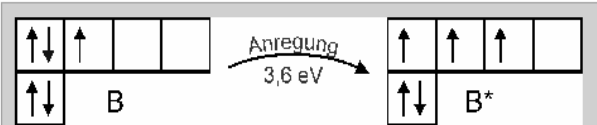
Besetzung nach Pauli-Prinzip und Hundscher Regel:



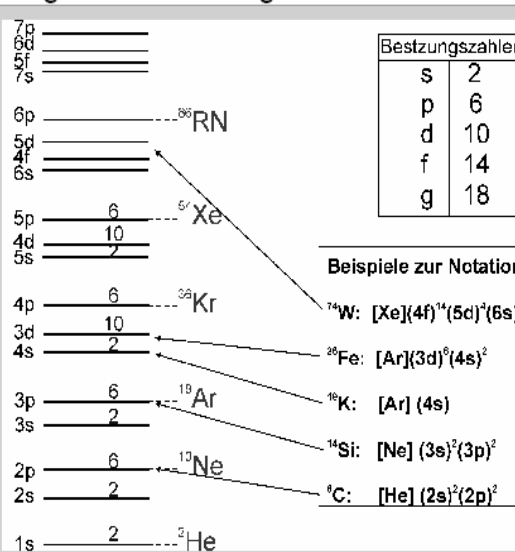
- Alkali-Metalle (Li, Na, K...) geben 1 Elektron leicht ab $\rightarrow$ Leitfähigkeit.
- Erdalkali-Metalle (Be, Mg, Ca...) sind 2-wertig



- Bohr-Gruppe (B, Al...) ist 3-wertig
- Kohlenstoff-Gruppe (C, Si...) ist 4-wertig



Energetische Staffelung der Niveaus



Notation der Elektronenkonfiguration

$[Y] (n_1 l_1)^{x_1} (n_2 l_2)^{x_2} \dots$ Mit Y: Atom der letzten abgeschlossenen Schale, n Hauptquantenzahl, l = (s, p, d, ...) Drehimpuls des Einteilchenniveaus, x Zahl der Elektronen in diesem Niveau.



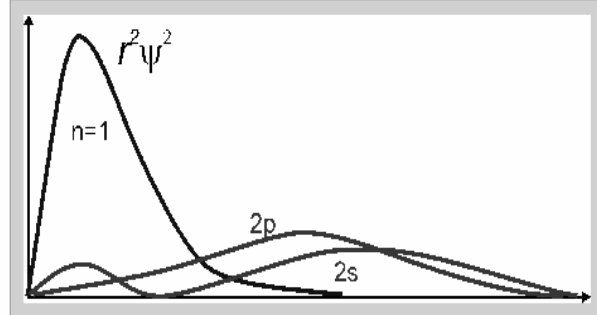
Atome mit 1 oder 2 Valenzelektronen

Abgeschlossene Schalen bilden Rumpf mit $L=0$, $S=0$.

Elektronen außerhalb (Valenzelektronen) bestimmen

- ▶ chemische Eigenschaften
- ▶ metallische Eigenschaften
- ▶ magnetische Eigenschaften

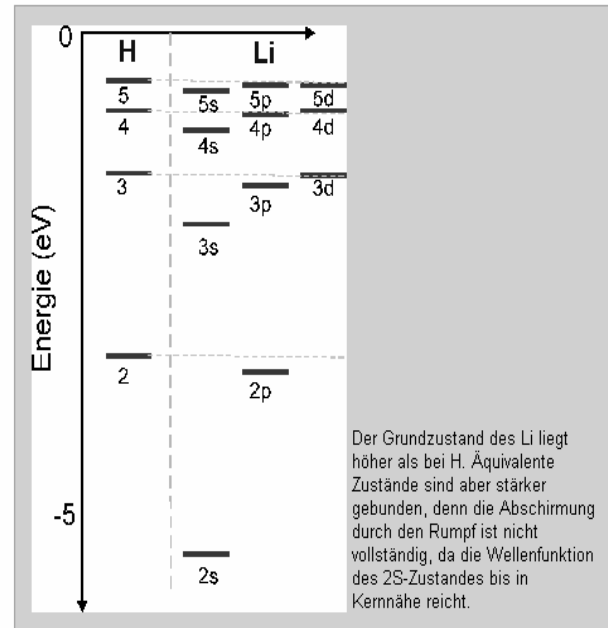
Der Rumpf schirmt Kernladung teilweise ab.



Atome mit 1 Valenzelektron (Li, Na ...)

haben wasserstoffähnliche Spektren. Äquivalente Niveaus sind aber stärker gebunden als im H-Atom.

Termschema des Lithium-Atoms



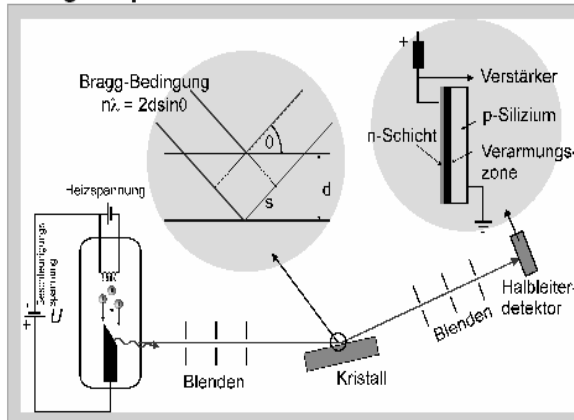
Atome mit 2 Valenzelektronen (Be, Mg ...)

treten, wie Helium $\uparrow\downarrow$, in zwei Zuständen (Singulett und Triplett) auf.



Röntgenstrahlung

Röntgen-Spektrometer



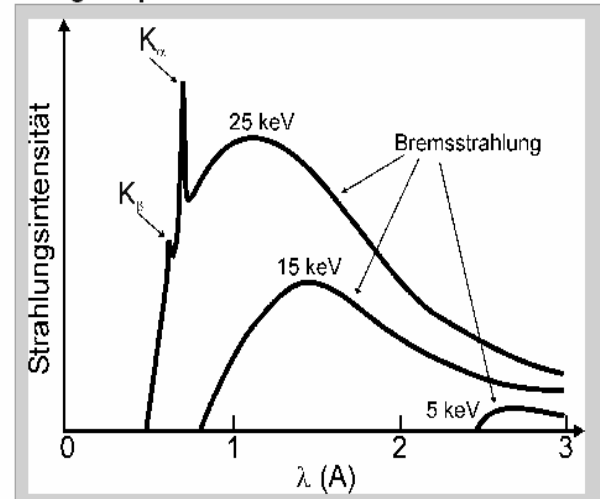
Spektroskopie der inneren Schalen.

- ▶ $E = 1-100 \text{ keV}$
- ▶ $\lambda = 0,1-10 \text{ \AA}$

Röntgen-Bremsspektrum

- ▶ Kontinuierlich
- ▶ Grenzfrequenz $\nu_{\max} = eU/h$
- ▶ $I(\nu) \sim Z(\nu_{\max} - \nu)$

Röntgen-Spektrum



Charakteristisches Spektrum

- ▶ Wenige Linien
- ▶ Zusammengefasst in Serien
- ▶ Kurzwellige Grenzfrequenz (Serienkante)
- ▶ Serien verschieben sich mit Z zu höheren Energien



Röntgenlinien

Deutung der Röntgen-Spektren durch Kossel 1916 im Modell unabhängiger Teilchen.

- ▶ Energetisches Elektron stößt Elektron aus inneren Schale
- ▶ Unbesetztes Niveau in sonst voller Schale (genannt Loch) hat gleichen Eigenschaften wie ein einzelnes Elektron in der Schale
- ▶ Übergang von Elektronen aus höheren Schalen und Emission eines Photons

Notation

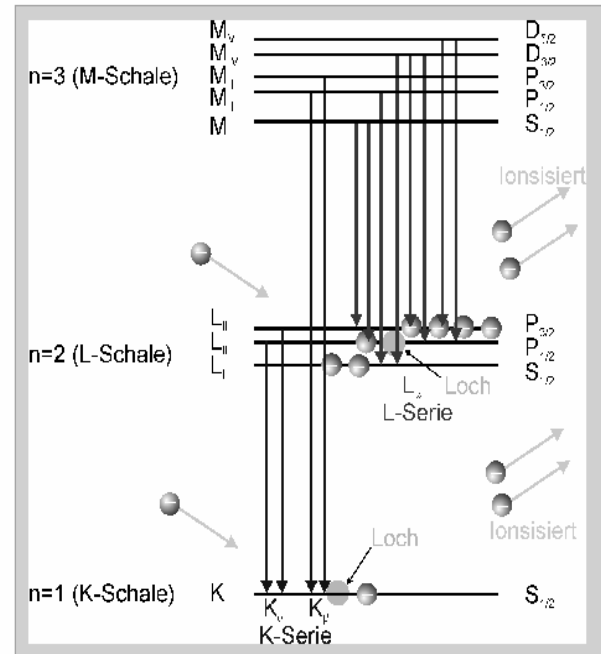
- ▶ Serien: K (n=1), L (n=2), M (n=3), N (n=4) ...
- ▶ Linien: α , β , γ , δ ...
- ▶ Feinaufspaltung: I, II, III, IV ...

Energie der Übergänge

$$\frac{1}{\lambda_{K\alpha}} \approx R_H (Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{L\alpha}} \approx R_H (Z-7,4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

Hier schirmen innere Elektronen die Kernladung um $1e$ bzw. $7,4e$ ab.

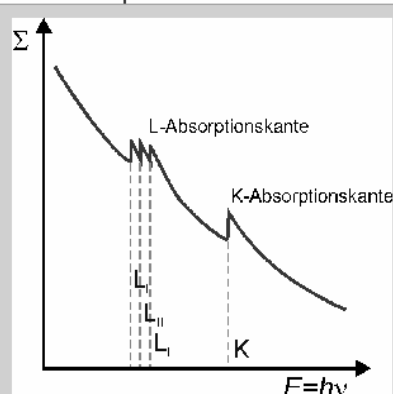


Die Ionisation der inneren Schale kann auch durch Röntgen-Strahlung erfolgen (Photoionisation, Röntgen-Fluoreszenz).



Röntgenabsorption

Die Abschwächung von Röntgen-Strahlen in Materie wird durch den makroskopischen Wirkungsquerschnitt oder Absorptionskoeffizienten Σ beschrieben.



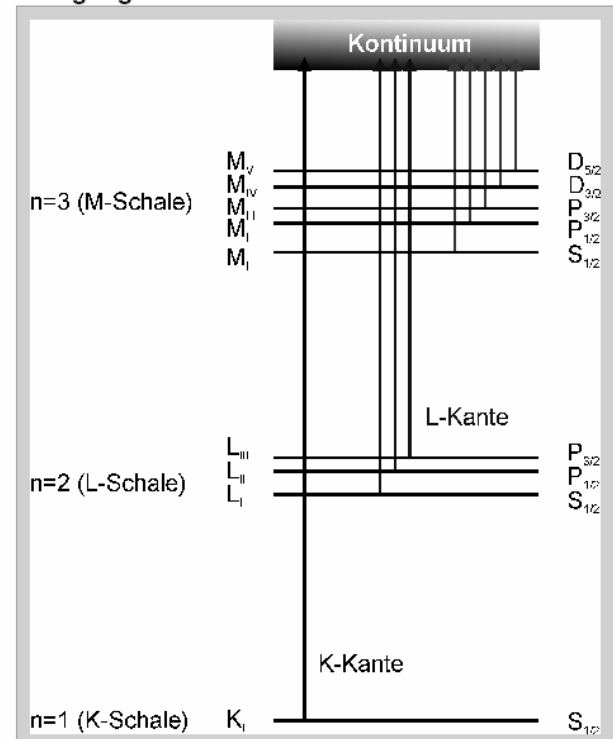
Wenn die Energie der Strahlung ausreicht, Elektronen aus einer tieferen Schale in das Kontinuum anzuregen, nimmt der Absorptionskoeffizient sprunghaft zu (s. rechts).

Man beobachtet:

- ▶ Sprunghafte Zunahme von Σ mit der Energie der Strahlung (Absorptionskanten)
- ▶ Dazwischen Abnahme mit $Z^{3-4}/(h\nu)^3$

Halbwertsdicke d ist der Weg, nach dem die Strahlung auf halbe Intensität gesunken ist.

Anregungen ins Kontinuum

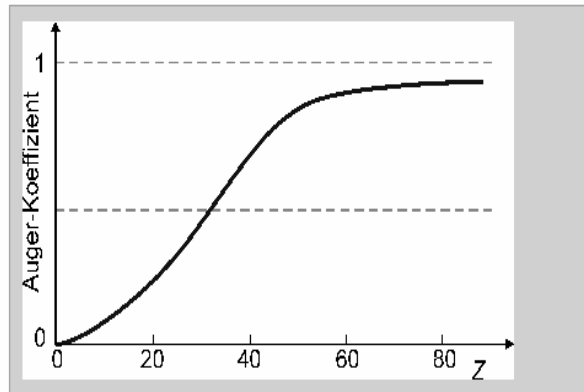




Auger-Elektronen

Nicht alle Atome mit einem fehlenden K- oder L-Elektron emittieren ein Röntgen-Quant beim Übergang in den Grundzustand.

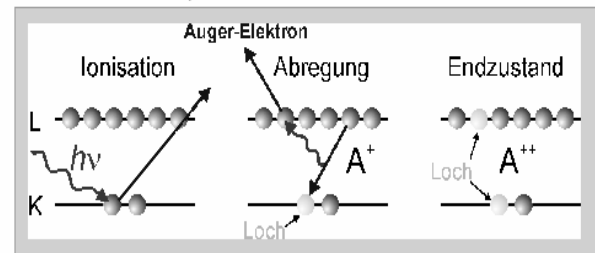
Auger-Koeffizient: Relative Zahl an Atome die mit Röntgen-Quant in Grundzustand übergehen.



Erklärung

Ein Teil der Atome geht über Emission eines Auger-Elektrons in den Grundzustand über:

- ▶ Ionisation innerer Schale durch Röntgen-Quant
- ▶ Übergang eines Elektrons aus höherer Schale unter Emission eines Quants
- ▶ Quant regt weiteres Elektron in einen Kontinuumzustand an (analog zum atomaren Photoeffekt) ☐



Energie des Auger-Elektrons

$$E_{\text{Auger}} = E_K - E_L - E_L$$

Inneres Photon Bindungsenergie
Auger-Elektron



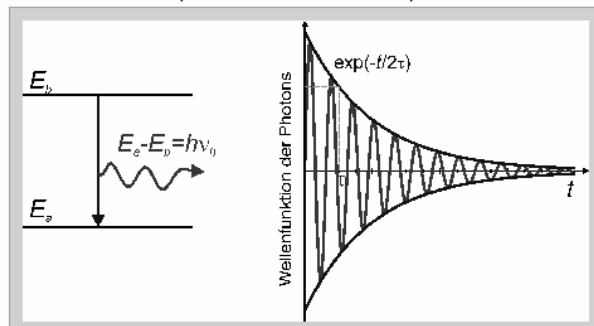
Linienformen

Angeregte Zustände zerfallen exponentiell in der charakteristischen Zeit τ (mittlere Lebensdauer)

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$$

Wellenfunktion des emittierten Quants:

$$\psi(t) = \psi_0 \left(e^{i\omega_0 t} e^{-t/2\tau} + CC \right)$$



Resultierende Spektrum aus Fourier-Transformierten:

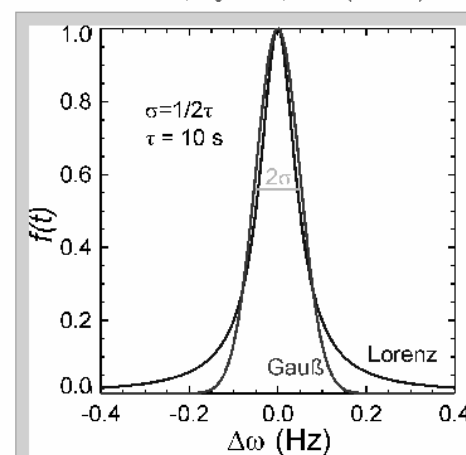
$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) e^{-i\omega t} dt$$

Integration ergibt:

$$C(\omega) = \frac{-\psi_0}{i(\omega_0 - \omega) - 1/2\tau} + \varepsilon$$

Die natürliche Linienform ist ein Lorenz-Profil

$$|C(\omega)|^2 = \frac{I}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/2\tau)^2}$$



Beobachtet man Linien die von einem heißen Gas emittiert werden, so bewirkt der Doppler-Effekt ☐ ein Gauß-Profil ☐

$$|C(\omega)|^2 = I \exp\left(-(\omega_0 - \omega)^2 / 2\sigma^2\right)$$



Zum Mitnehmen

Mehrelektronen: Besetzung der Energieniveaus bestimmt durch Pauli-Prinzip und Hundsche Regeln.

Pauli-Prinzip verbietet mehrere Elektronen in Zustand mit gleichen Quantenzahlen.

Röntgenstrahlung (durch Beschuss einer Elektrode mit Elektronen) zeigt Linien aus der diskreten Energieniveaus und ein kontinuierliches Spektrum durch Bremsstrahlung.



Vorlesung 18:

Roter Faden:

Periodensystem
Röntgenstrahlung

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag



Periodensystem

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Ha													
58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				

Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

2



LS-Kopplung

Bahndrehimpulse der Elektronen koppeln zu

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i; \quad |\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

Spins der Elektronen koppeln zu Gesamtspin

$$\vec{S} = \sum \vec{S}_i; \quad |\vec{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$$

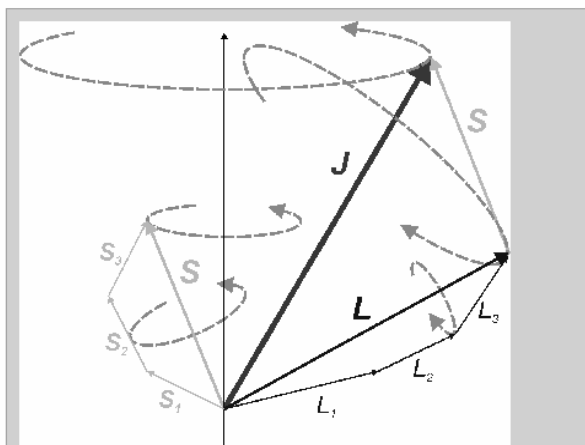
Der Gesamtdrehimpuls ist

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

mit

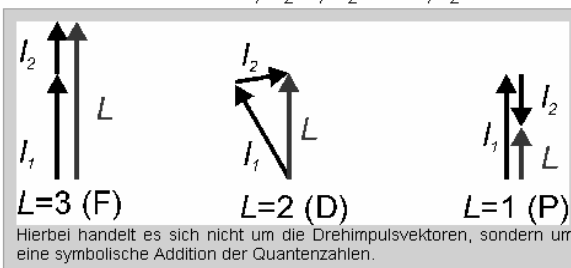
$$|\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$

$$J_z = M\hbar; \quad M = J, J-1, \dots, -J$$



Beispiel: 2 Elektronen mit $l_1 > l_2$

Mögliche Werte für L : $l_1+l_2, l_1+l_2-1, \dots, l_1-l_2$



Term: alle Zustände mit gleichem L und S .

Spin-Bahn-Kopplung $\rightarrow (2S+1)$ Kombinationen:

$J = L+S, L+S-1, \dots, L-S$ (Multipletts)

- 2 Elektronen: $S=0$ (Singulett) oder $S=1$ (Triplett)
- 3 Elektronen: $S=1/2$ (Doublett) oder $S=3/2$ (Quartett)
- 4 Elektronen: $S=0$ oder $S=1$ oder $S=2$ (Quintett)

Notation:

Term	Niveau
Multiplicität $2S+1$	$2S+1$
L	L
Bahndrehimpuls (S,P,D,...)	Gesamtdrehimpuls

Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

3



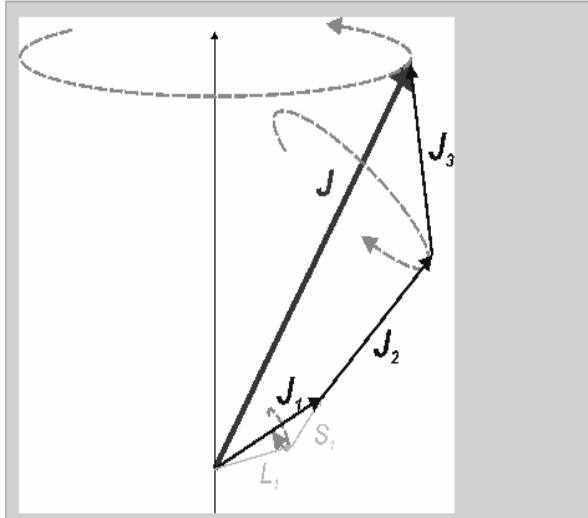
JJ-Kopplung

Mit steigender Kernladungszahl Z wird Spin-Bahn-Kopplung einzelner Elektronen stärker.

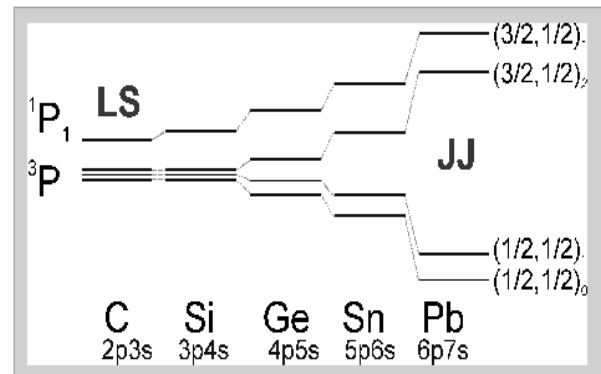
$$\vec{J}_i = \vec{L}_i + \vec{S}_i$$

Die J_i koppeln zum Gesamtdrehimpuls des Atoms:

$$\vec{J} = \sum \vec{J}_i; \quad |\vec{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$$



LS- und JJ-Kopplung gibt es nur bei leichten bzw. schweren Atomen in Reinform. Die Niveaus im Übergangsbereich lassen sich nicht einfach zuordnen.



Notation: $(J_1, J_2, J_3)_J$



Vergleich LS und JJ Kopplung

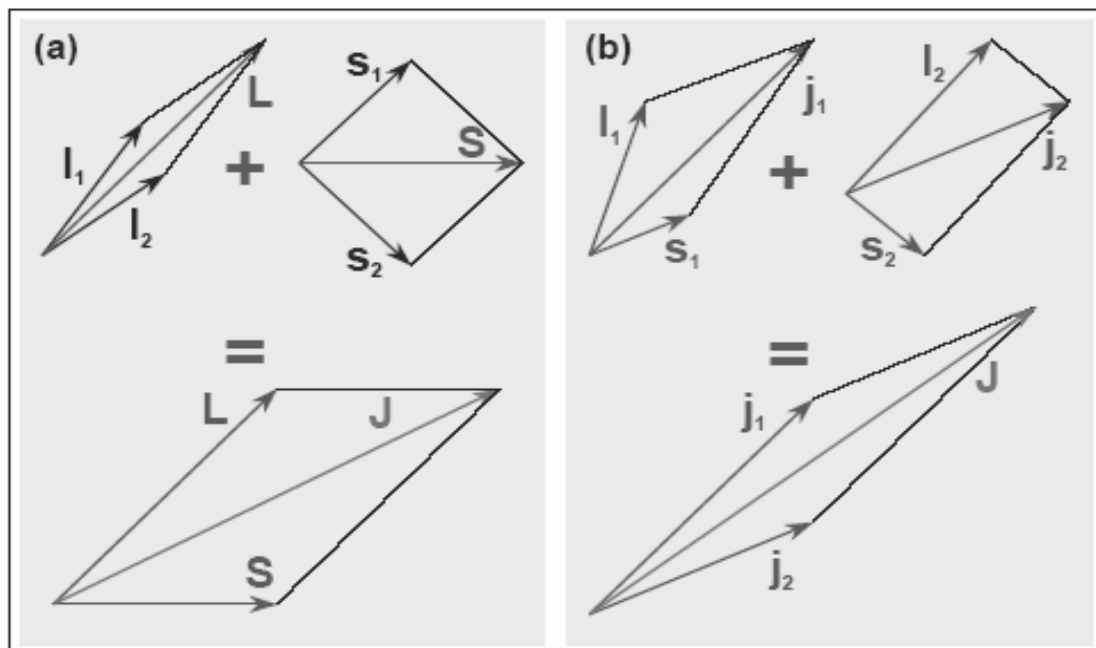


Abbildung 7.5: Vektormodell der L-S-Kopplung (a) und der j-j-Kopplung (b).



QZ bei mehreren Elektronen

Elektronen-konfiguration	Drehimpulsquantenzahlen			Spektroskopische Symbole
	L	S	J	
s	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$^2S_{1/2}$
s ²	0	0	0	1S_0
	0	1	1	3S_1
sp	1	0	1	1P_1
	1	1	0,1,2	3P_0 3P_1 3P_2
p ²	0	0	0	1S_0
	1	1	0,1,2	3P_0 3P_1 3P_2
	2	0	2	1D_2
	0	1	1	3S_1
	1	0	1	1P_1
	2	1	1,2,3	$^3D_{1,2,3}$

Tabelle 7.1: Mögliche Gesamtdrehimpulse und spektroskopische Symbole für verschiedene Elektronenkonfigurationen. Die rot markierten Terme sind aufgrund des Pauli-Prinzips für $n_1 = n_2$ verboten.



Beispiel der QZ für die np² Konfiguration

L	S	m _{l1}	m _{l2}	m _{s1}	m _{s2}	M _S	M _J	Term
0	0	0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	1S_0
1	0	0	-1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	0	3P_0
1	1	+1	-1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+1	3P_1
		+1	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	0	
		+1	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-1	
1	1	+1	0	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+2	3P_2
		+1	-1	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+1	
		0	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	
		+1	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-1	
		0	-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	-2	
2	0	+1	+1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	+2	1D_2
		+1	0	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	+1	
		0	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	
		0	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	-1	
		-1	-1	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	-2	

Tabelle 7.2: Mögliche Zustände der Konfiguration np² mit Quantenzahlen L, S, m_{l1}, m_{l2}, m_{s1}, m_{s2}, M_S = m_{s1} + m_{s2} und M_J = m_{l1} + m_{l2} + m_{s1} + m_{s2} für gleiche Hauptquantenzahlen n₁ = n₂ der beiden p-Elektronen.



Verbotene QZ

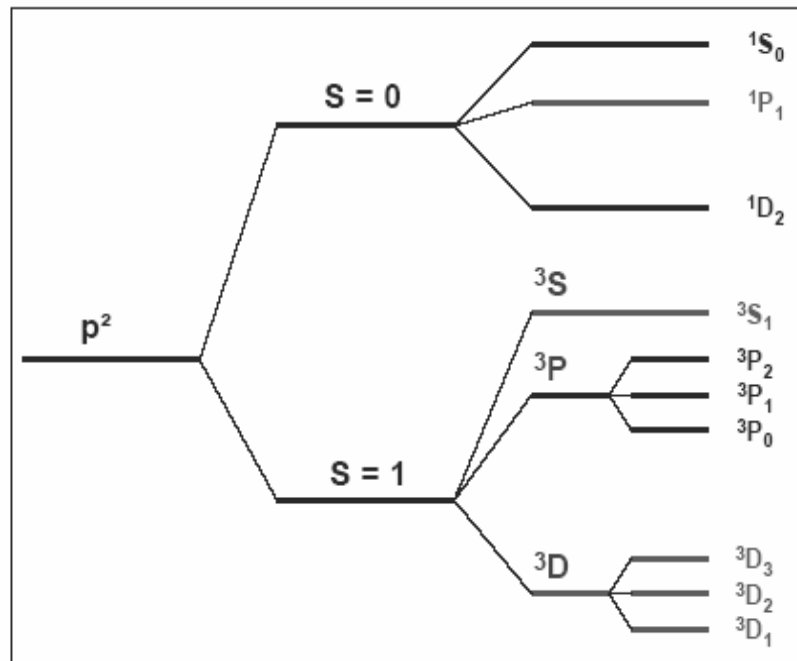


Abbildung 7.7: Mögliche Atomterme der p^2 -Konfiguration. Die rot markierten Terme sind aufgrund des Pauli-Prinzips verboten.



Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale		K		L		M		N
Z	Element	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s
1	H Wasserstoff	1						
2	He Helium	2						
3	Li Lithium	2	1					
4	Be Beryllium	2	2					
5	B Bor	2	2	1				
6	C Kohlenstoff	2	2	2				
7	N Stickstoff	2	2	3				
8	O Sauerstoff	2	2	4				
9	F Fluor	2	2	5				
10	Ne Neon	2	2	6				
11	Na Natrium	2	2	6	1			
12	Mg Magnesium	2	2	6	2			
13	Al Aluminium	2	2	6	2	1		
14	Si Silizium	2	2	6	2	2		
15	P Phosphor	2	2	6	2	3		
16	S Schwefel	2	2	6	2	4		
17	Cl Chlor	2	2	6	2	5		
18	Ar Argon	2	2	6	2	6		
19	K Kalium	2	2	6	2	6		1
20	Ca Calcium	2	2	6	2	6		2
21	Sc Scandium	2	2	6	2	6	1	2
22	Ti Titan	2	2	6	2	6	2	2
23	V Vanadium	2	2	6	2	6	3	2
24	Cr Chrom	2	2	6	2	6	5	1
25	Mn Mangan	2	2	6	2	6	5	2
26	Fe Eisen	2	2	6	2	6	6	2
27	Co Kobalt	2	2	6	2	6	7	2
28	Ni Nickel	2	2	6	2	6	8	2
29	Cu Kupfer	2	2	6	2	6	10	1
30	Zn Zink	2	2	6	2	6	10	2
31	Ga Gallium	2	2	6	2	6	10	2
32	Ge Germanium	2	2	6	2	6	10	2
33	As Arsen	2	2	6	2	6	10	2
34	Se Selen	2	2	6	2	6	10	2
35	Br Brom	2	2	6	2	6	10	2
36	Kr Krypton	2	2	6	2	6	10	2
37	Rb Rubidium	2	2	6	2	6	10	2
38	Sr Strontium	2	2	6	2	6	10	2
39	Y Yttrium	2	2	6	2	6	10	2
40	Zr Zirkonium	2	2	6	2	6	10	2
41	Nb Niob	2	2	6	2	6	10	2
42	Mo Molybdän	2	2	6	2	6	10	2
43	Tc Technetium	2	2	6	2	6	10	2
44	Ru Ruthenium	2	2	6	2	6	10	2
45	Rh Rhodium	2	2	6	2	6	10	2
46	Pd Palladium	2	2	6	2	6	10	2
47	Ag Silber	2	2	6	2	6	10	2
48	Cd Cadmium	2	2	6	2	6	10	2
49	In Indium	2	2	6	2	6	10	2
50	Sn Zinn	2	2	6	2	6	10	2
51	Sb Antimon	2	2	6	2	6	10	2
52	Te Tellur	2	2	6	2	6	10	2
53	I Iod	2	2	6	2	6	10	2
54	Xe Xenon	2	2	6	2	6	10	2



Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale							N	O					P
Z	Element	4f	5s	5p	5d	5f	6s						
55	Cs Cäsium		2	6			1						
56	Ba Barium		2	6			2						
57	La Lanthan		2	6	1		2						
58	Ce Cer	2	2	6			2						
59	Pr Praseodym	3	2	6			2						
60	Nd Neodym	4	2	6			2						
61	Pm Promethium	5	2	6			2						
62	Sm Samarium	6	2	6			2						
63	Eu Europium	7	2	6			2						
64	Gd Gadolinium	7	2	6	1		2						
65	Tb Terbium	9	2	6			2						
66	Dy Dysprosium	10	2	6			2						
67	Ho Holmium	11	2	6			2						
68	Er Erbium	12	2	6			2						
69	Tm Thulium	13	2	6			2						
70	Yb Ytterbium	14	2	6			2						
71	Lu Lutetium	14	2	6	1		2						
72	Hf Hafnium	14	2	6	2		2						
73	Ta Tantal	14	2	6	3		2						
74	W Wolfram	14	2	6	4		2						
75	Re Rhenium	14	2	6	5		2						
76	Os Osmium	14	2	6	6		2						
77	Ir Iridium	14	2	6	7		2						
78	Pt Platin	14	2	6	9		1						
79	Au Gold	14	2	6	10		1						

Schale							N	O					P	Q
Z	Element	4f	5s	5p	5d	5f	6s							
80	Hg Quecksilber	14	2	6	10		2							
81	Tl Thallium	14	2	6	10		2	1						
82	Pb Blei	14	2	6	10		2	2						
83	Bi Bismut	14	2	6	10		2	3						
84	Po Polonium	14	2	6	10		2	4						
85	At Astat	14	2	6	10		2	5						
86	Rn Radon	14	2	6	10		2	6						
87	Fr Francium	14	2	6	10		2	6					1	
88	Ra Radium	14	2	6	10		2	6					2	
89	Ac Actinium	14	2	6	10		2	6	1				2	
90	Th Thorium	14	2	6	10		2	6	2				2	
91	Pa Protactinium	14	2	6	10	2	2	6	1				2	
92	U Uran	14	2	6	10	3	2	6	1				2	
93	Np Neptunium	14	2	6	10	5	2	6					2	
94	Pu Plutonium	14	2	6	10	6	2	6					2	
95	Am Americium	14	2	6	10	7	2	6					2	
96	Cm Curium	14	2	6	10	7	2	6	1				2	
97	Bk Berkelium	14	2	6	10	8	2	6	1				2	
98	Cf Californium	14	2	6	10	10	2	6					2	
99	Es Einsteinium	14	2	6	10	11	2	6					2	
100	Fm Fermium	14	2	6	10	12	2	6					2	
101	Md Mendelevium	14	2	6	10	13	2	6					2	
102	No Nobelium	14	2	6	10	14	2	6					2	
103	Lr Lawrencium	14	2	6	10	14	2	6	1				2	
104	Rf Rutherfordium	14	2	6	10	14	2	6	2				2	

Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

10



Periodensystem mit Untergruppen

Periode	Hauptgruppen												Hauptgruppen					
	1 IA	2 IIA											13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	18 VIIIA
1	1 H 1.008																	2 He 4.003
2	3 Li 6.941	4 Be 9.012	Nebengruppen										5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
3	11 Na 22.99	12 Mg 24.31	3 IIIB	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIII	9 VIII	10 VIII	11 IB	12 IIB	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95
4	19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.88	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.39	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80
5	37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3
6	55 Cs 132.9	56 Ba 137.3	57 La 138.9	72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.9	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.1	79 Au 197.0	80 Hg 200.6	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)
7	87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (257)	105 Db (260)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 ---	111 ---	112 ---	113 ---	114 ---	115 ---	116 ---	117 ---	118 ---
künstlich erzeugt																		
Lanthaniden			58 Ce 140.1	59 Pr 140.9	60 Nd 144.2	61 Pm (147)	62 Sm 150.4	63 Eu 152.0	64 Gd 157.3	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.9	68 Er 167.3	69 Tm 168.9	70 Yb 173.0	71 Lu 175.0		
Actiniden			90 Th 232.0	91 Pa (231)	92 U (238)	93 Np (237)	94 Pu (242)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (249)	99 Es (254)	100 Fm (253)	101 Md (256)	102 No (254)	103 Lr (257)		

Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



Reihenfolge der Besetzung im Periodensystem

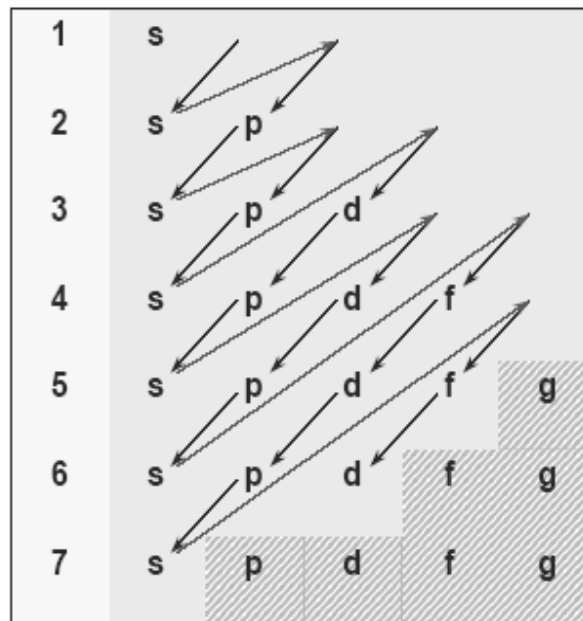


Abbildung 7.9: Graphisches Merkverfahren zur energetischen Abfolge der Einteilchenniveaus. Die Zahlen geben die Schale an, die Buchstaben die zu jeder Schale gehörigen Unterschalen. Die schraffiert hinterlegten Niveaus werden im Grundzustand der stabilen Atome nicht mehr besetzt.



Große Drehimpulse = maximale Abschirmung = geringe Bindung

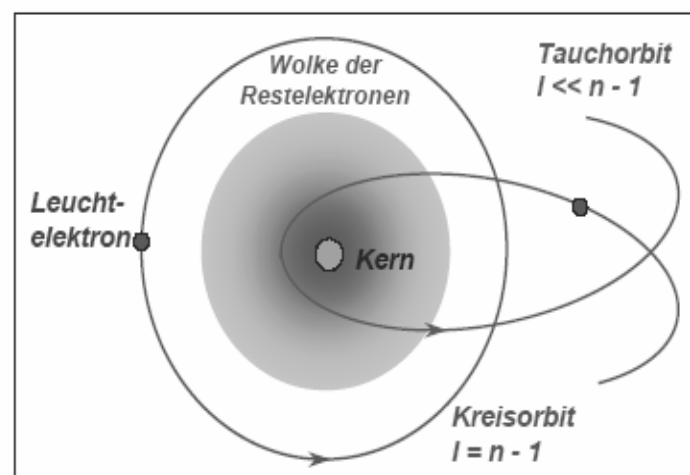
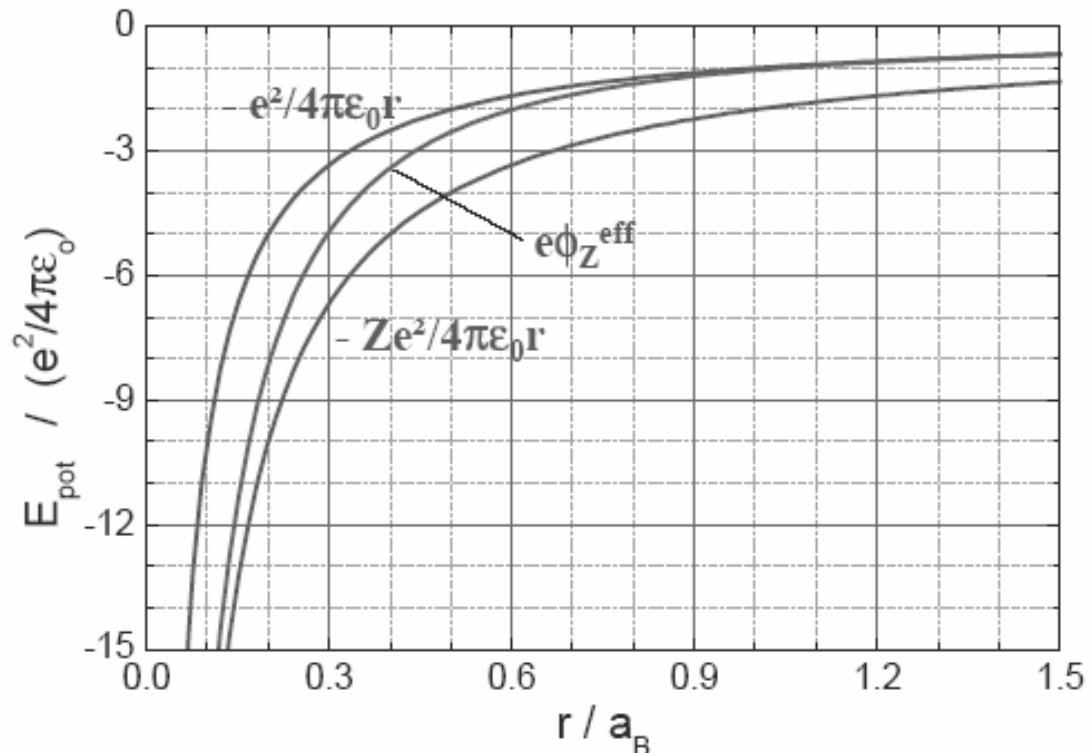


Abbildung 7.3: Zur Veranschaulichung der Aufhebung der l -Entartung mit Hilfe des Sommerfeldschen Modells. Für $l = n - 1$ haben wir es mit einem Orbital zu tun, das einer klassischen Kreisbahn sehr nahe kommt. Für $l \ll n - 1$ hingegen ist das Sommerfeldsche Orbital sehr stark elliptisch. Das Elektron kommt auf seiner "Tauchbahn" dem unabschirmten Kern häufiger sehr nahe, was auf Grund der Attraktivität der Wechselwirkung zu einer Absenkung der Energieniveaus führt.



Effektives Potential bei mehreren Elektronen



Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

14



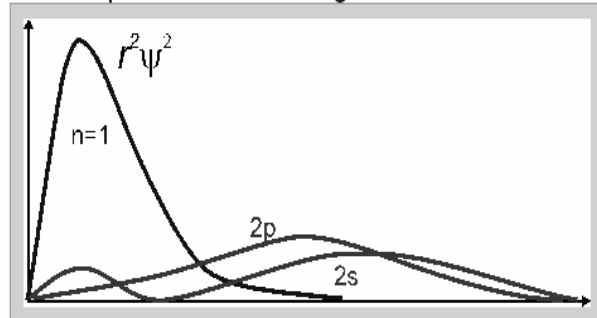
Atome mit 1 oder 2 Valenzelektronen

Abgeschlossene Schalen bilden Rumpf mit $L=0, S=0$.

Elektronen außerhalb (Valenzelektronen) bestimmen

- chemische Eigenschaften
- metallische Eigenschaften
- magnetische Eigenschaften

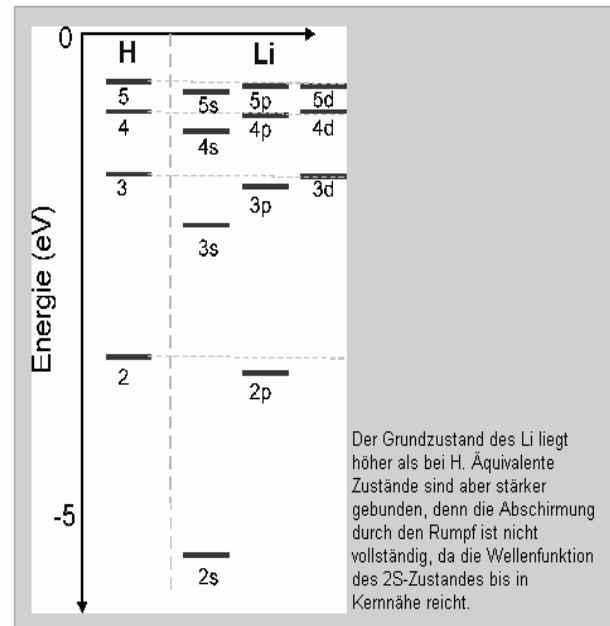
Der Rumpf schirmt Kernladung teilweise ab.



Atome mit 1 Valenzelektron (Li, Na ...)

haben wasserstoffähnliche Spektren. Äquivalente Niveaus sind aber stärker gebunden als im H-Atom.

Termschema des Lithium-Atoms



Atome mit 2 Valenzelektronen (Be, Mg ...)

treten, wie Helium, in zwei Zuständen (Singulett und Triplett) auf.

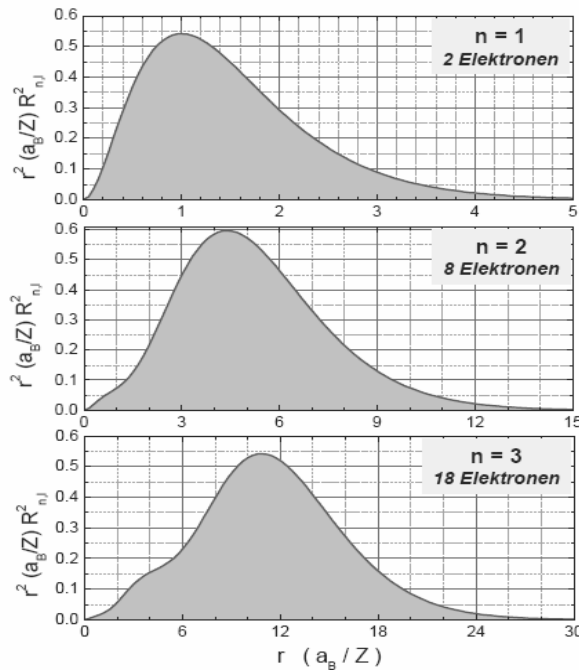
Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

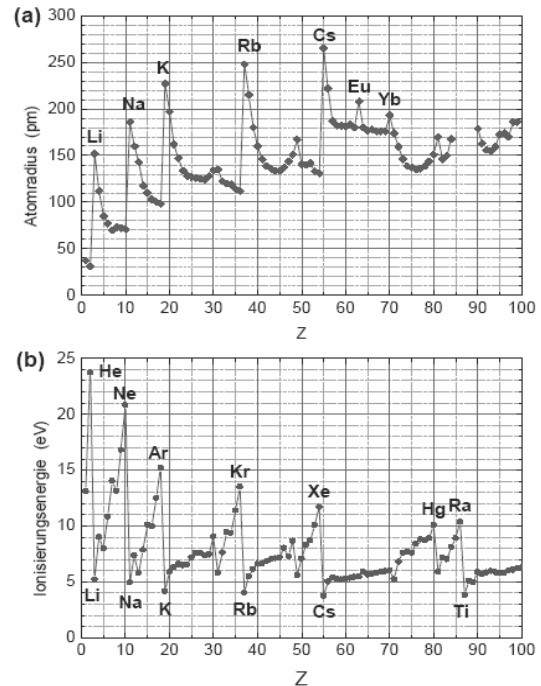
15



Abgeschlossen Schalen



Elektronendichte bei vollen Schalen
($Z=2, 10, 28$ für $n=1, 2, 3$)



Atomradien und Ionisierungsenergie



Zusammenfassung

- Bei Atomen mit mehreren Elektronen führt die elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen dazu, dass das gesamte Potenzial nicht mehr kugelsymmetrisch ist.
- Für die Besetzung der Zustände eines Mehrelektronenatoms gilt das Pauli-Prinzip, für das man folgende äquivalente Formulierungen angeben kann:
 - Die Gesamtwellenfunktion aller Elektronen muss antisymmetrisch gegenüber Vertauschung zweier Elektronen sein.
 - Ein atomarer Zustand, der durch die 4 Quantenzahlen n (Hauptquantenzahl), l (Bahndrehimpulsquantenzahl), m (Bahndrehimpulsorientierungsquantenzahl) und m_s (Spinorientierungsquantenzahl) charakterisiert ist, kann nur von einem Elektron besetzt werden.
- Die Besetzung der möglichen Elektronenzustände eines Mehrelektronenatoms erfolgt unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips und der Energieminimierung.
- In der Elektronenhülle von Mehrelektronenatomen fassen wir Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl in Schalen ($n = 1, 2, 3, 4, \dots \Leftrightarrow K, L, M, N, \dots$) zusammen, solche mit gleicher Haupt- und Bahndrehimpulsquantenzahl in Unterschalen ($l = 0, 1, 2, 3, \dots \Leftrightarrow s, p, d, f, \dots$) zusammen.
- Der Schalenbau der Atome wird durch die Abhängigkeit der Ionisierungsenergie und der Atomvolumina von der Zahl der Elektronen in der Hülle widerspiegelt. Die Alkalimetalle haben von allen Atomen in der gleichen Periode die kleinsten Ionisierungsenergien und den größten Atomradius, die Edelgase die größten Ionisierungsenergien und den kleinsten Atomradius.



Zusammenfassung

1. Für Atome mit angeschlossenen Schalen gilt $L = S = J = 0$.
 2. In offenen s -, p -, d - oder f -Unterschalen liegen die Zustände mit maximalem S energetisch am tiefsten.
 3. Für die Terme mit maximalem S liegen die Terme mit maximalem L energetisch am tiefsten.
 4. Ist eine s -, p -, d - oder f -Unterschale weniger als halb gefüllt, so bildet der Term mit $J = |L - S|$ den Grundzustand, ist sie mehr als halb gefüllt, der Term mit $J = L + S$.
- Es wird folgende spektroskopische Notation für die Bezeichnung der Energieniveaus von Mehrelektronenatomen verwendet:

$$^M L_J \quad \text{mit der Multiplizität } M = 2S + 1 \quad \text{und} \quad |L - S| \leq J \leq L + S.$$

Für $L > S$ entspricht die Zahl $2S + 1$ der Feinstrukturkomponenten der Multiplizität des Zustandes. Für $L < S$ ist die Zahl $2L + 1$ der möglichen Feinstrukturkomponenten dagegen kleiner als die Multiplizität und wir sprechen von einer nicht vollständig entwickelten Multiplizität.



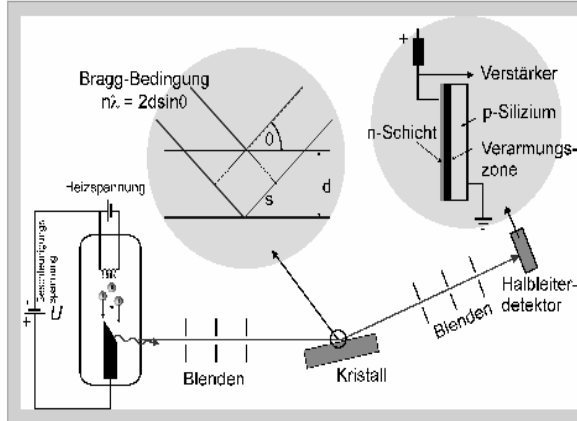
Zusammenfassung

- In einem Modell unabhängiger Elektronen nähert man man die Wechselwirkung eines Elektrons mit der Kernladung $+Ze$ und den verbleibenden $(Z - 1)$ anderen Elektronen durch ein effektives kugelsymmetrisches Potenzial. Dadurch wird das Problem für jedes einzelne Elektron auf ein Einteilchenproblem reduziert. Eine numerische Berechnung kann mit Hilfe des Hartree-Verfahren erfolgen. Die Vielelektronenwellenfunktion wird durch eine antisymmetrische Linearkombination von Produkten von Einelektronenfunktionen angenähert.
- Die Reihenfolge bei der Kopplung der Drehimpulse hängt von der Größe der beteiligten Wechselwirkungen ab:
 1. **L-S-Kopplung:**
Bei leichten Kernen ist die Spin-Bahn-Kopplung schwach, es koppeln zuerst alle Bahndrehimpulse zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$ und alle Spin zum Gesamtspin $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$. Erst anschließend koppeln $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$ zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J}$ des Atoms.
 2. **j-j-Kopplung:**
Bei schweren Kernen ist die Spin-Bahn-Kopplung stark, es koppeln zuerst alle Bahndrehimpulse und Spins der einzelnen Elektronen zu den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i$ der einzelnen Elektronen. Anschließend koppeln dann die verschiedenen $\mathbf{j}_i$ zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_i$ des Atoms.
- Für das Auffinden des Drehimpulszustandes des Grundzustandes eines Atoms können die Hundschen Regeln verwendet werden:



Röntgenstrahlung

Röntgen-Spektrometer



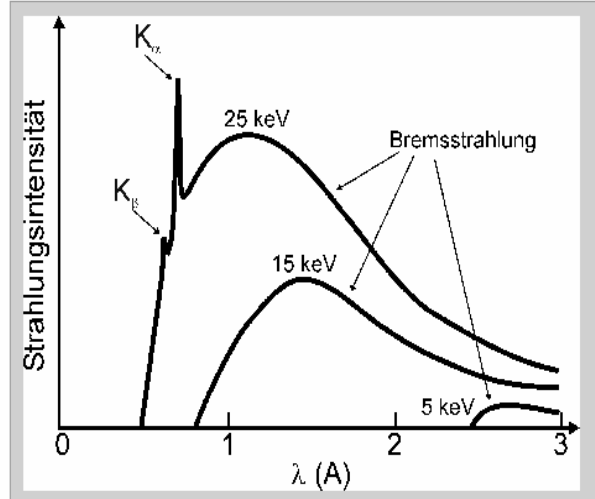
Spektroskopie der inneren Schalen.

- ▶ $E = 1-100 \text{ keV}$
- ▶ $\lambda = 0,1-10 \text{ \AA}$

Röntgen-Bremsspektrum

- ▶ Kontinuierlich
- ▶ Grenzfrequenz $\nu_{\max} = eU/h$
- ▶ $I(\nu) \sim Z(\nu_{\max} - \nu)$

Röntgen-Spektrum



Charakteristisches Spektrum

- ▶ Wenige Linien
- ▶ Zusammengefasst in Serien
- ▶ Kurzwellige Grenzfrequenz (Serienkante)
- ▶ Serien verschieben sich mit Z zu höheren Energien

Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

20



Röntgenlinien

Deutung der Röntgen-Spektren durch Kossel 1916 im Modell unabhängiger Teilchen.

- ▶ Energetisches Elektron stößt Elektron aus inneren Schale
- ▶ Unbesetztes Niveau in sonst voller Schale (genannt Loch) hat gleichen Eigenschaften wie ein einzelnes Elektron in der Schale
- ▶ Übergang von Elektronen aus höheren Schalen und Emission eines Photons

Notation

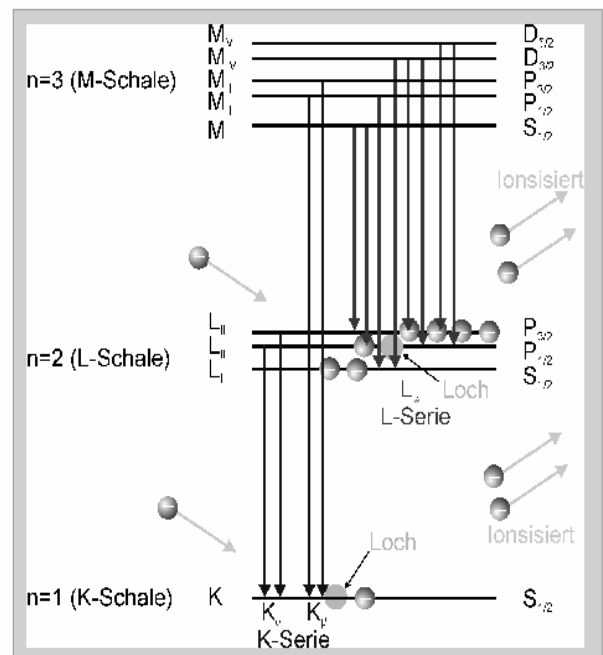
- ▶ Serien: K ($n=1$), L ($n=2$), M ($n=3$), N ($n=4$) ...
- ▶ Linien: $\alpha, \beta, \gamma, \delta$...
- ▶ Feinaufspaltung: I, II, III, IV ...

Energie der Übergänge

$$\frac{1}{\lambda_{K\alpha}} \approx R_H (Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{L\alpha}} \approx R_H (Z-7,4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

Hier schirmen innere Elektronen die Kernladung um $1e$ bzw. $7,4e$ ab.



Die Ionisation der inneren Schale kann auch durch Röntgen-Strahlung erfolgen (Photoionisation, Röntgen-Fluoreszenz).

Juni 16, 2005

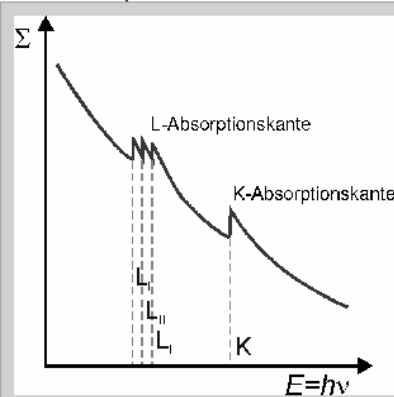
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

21



Röntgenabsorption

Die Abschwächung von Röntgen-Stahlen in Materie wird durch den makroskopischen Wirkungsquerschnitt oder Absorptionskoeffizienten Σ beschrieben.



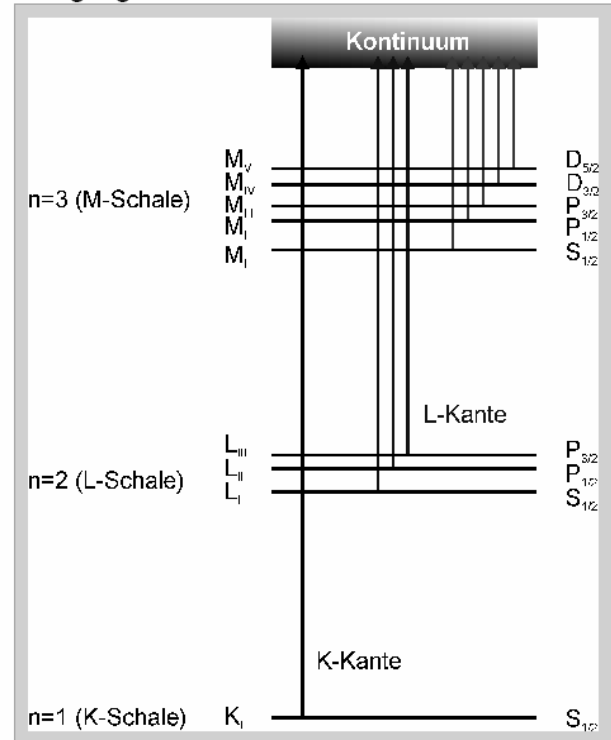
Wenn die Energie der Strahlung ausreicht, Elektronen aus einer tieferen Schale in das Kontinuum anzuregen, nimmt der Absorptionskoeffizient sprunghaft zu (s. rechts).

Man beobachtet:

- Sprunghafte Zunahme von Σ mit der Energie der Strahlung (Absorptionskanten)
- Dazwischen Abnahme mit $Z^{3-4}/(h\nu)^3$

Halbwertsdicke d ist der Weg, nach dem die Strahlung auf halbe Intensität gesunken ist.

Anregungen ins Kontinuum



Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

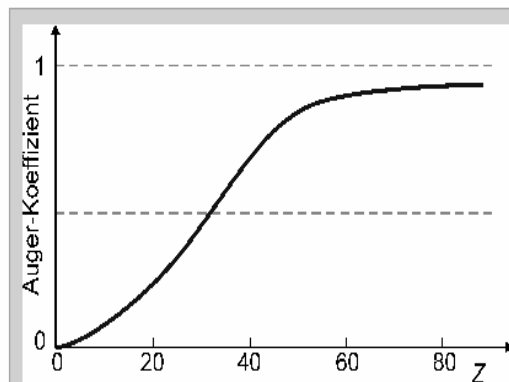
22



Auger-Elektronen

Nicht alle Atome mit einem fehlenden K- oder L-Elektron emittieren ein Röntgen-Quant beim Übergang in den Grundzustand.

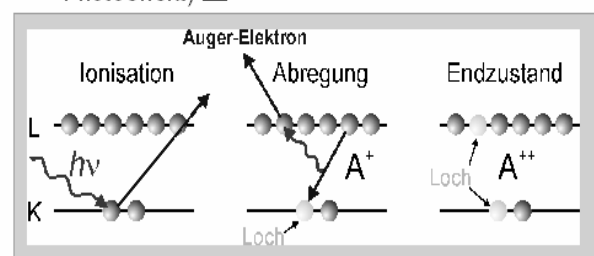
Auger-Koeffizient: Relative Zahl an Atome die mit Röntgen-Quant in Grundzustand übergehen.



Erklärung

Ein Teil der Atome geht über Emission eines Auger-Elektrons in den Grundzustand über:

- Ionisation innerer Schale durch Röntgen-Quant
- Übergang eines Elektrons aus höherer Schale unter Emission eines Quants
- Quant regt weiteres Elektron in einen Kontinuumszustand an (analog zum atomaren Photoeffekt)



Energie des Auger-Elektrons

$$E_{\text{Auger}} = E_K - E_L - E_L$$

Inneres Photon Bindungsenergie
Auger-Elektron

Juni 16, 2005

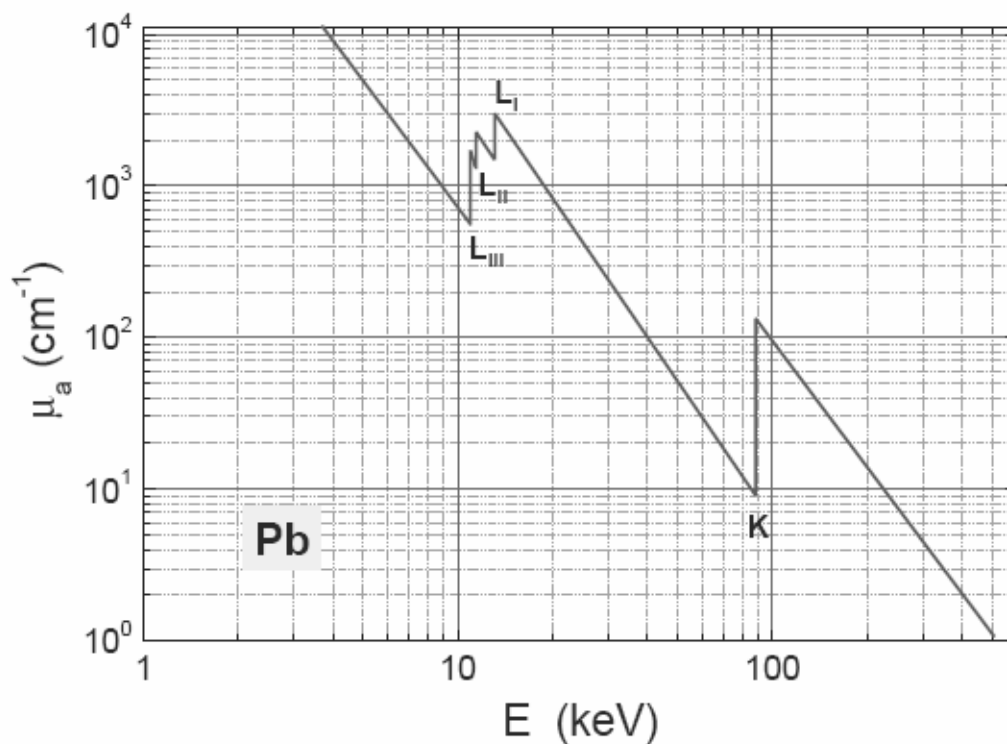
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

23



Absorptionskoeff. in Blei

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x)$$



Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

24



Röntgenabsorption

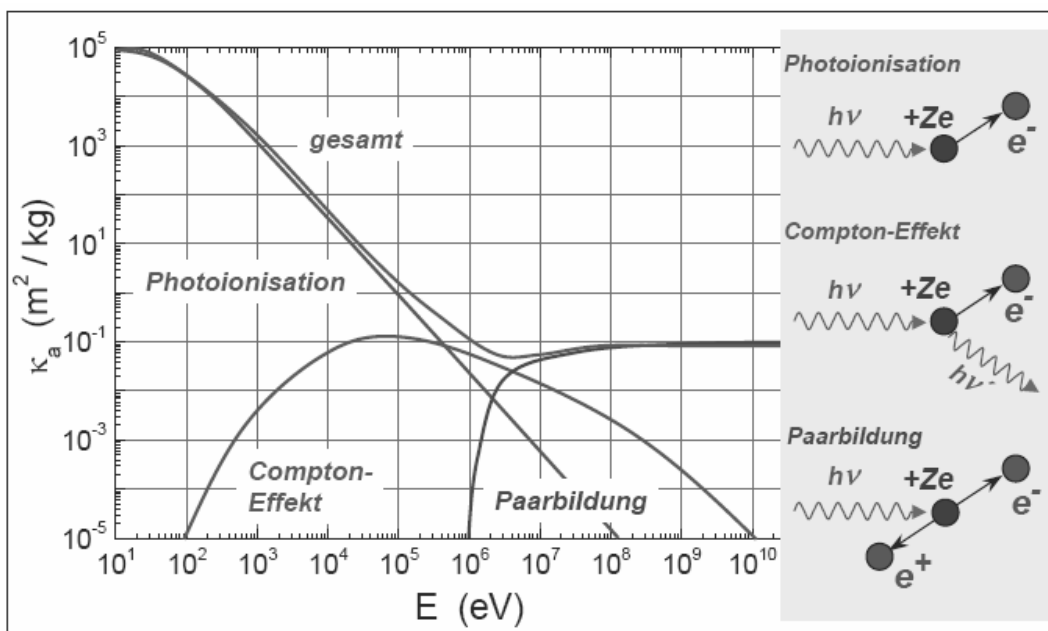


Abbildung 8.14: Qualitative Darstellung der einzelnen Beiträge (Photoionisation, Compton-Effekt, Paarbildung) zum Massenabsorptionskoeffizienten κ_a von Blei.

Juni 16, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

25



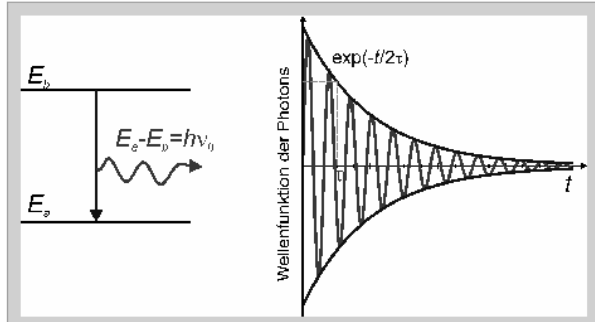
Linienformen

Angeregte Zustände zerfallen exponentiell in der charakteristischen Zeit τ (mittlere Lebensdauer)

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$$

Wellenfunktion des emittierten Quants:

$$\psi(t) = \psi_0 \left(e^{i\omega_0 t} e^{-t/2\tau} + CC \right)$$



Resultierende Spektrum aus Fourier-Transformierten:

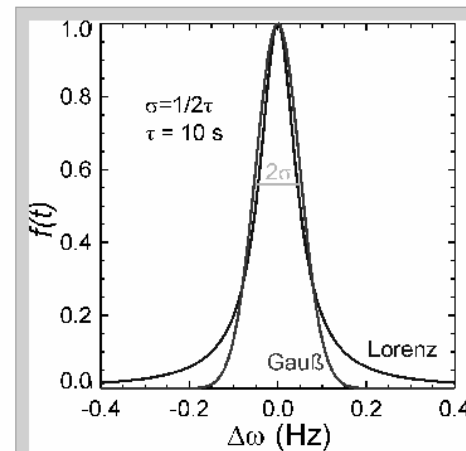
$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) e^{-i\omega t} dt$$

Integration ergibt:

$$C(\omega) = \frac{-\psi_0}{i(\omega_0 - \omega) - 1/2\tau} + \varepsilon$$

Die natürliche Linienform ist ein Lorenz-Profil

$$|C(\omega)|^2 = \frac{I}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/2\tau)^2}$$



Beobachtet man Linien die von einem heißen Gas emittiert werden, so bewirkt der Doppler-Effekt ein Gauß-Profil

$$|C(\omega)|^2 = I \exp\left(-(\omega_0 - \omega)^2 / 2\sigma^2\right)$$



Zusammenfassung Röntgenstrahlung

- Ein- und Mehrelektronenanregungen in Atomen können durch Absorption elektromagnetischer Strahlung oder durch inelastische Stoßprozesse erhalten werden.
- Werden Elektronen aus den inneren Schalen eines Atoms herausgelöst, spricht man von Innerschalenanregungen.
- Röntgenstrahlung entsteht
 1. beim Abbremsen von Elektronen mit Energien im keV-Bereich. Das resultierende Bremsspektrum ist kontinuierlich.
 2. durch Übergänge von Elektronen auf freie Plätze in inneren Schalen. Das daraus resultierende Spektrum ist ein Linienspektrum, das für jedes Atom charakteristisch ist (charakteristische Röntgenstrahlung).
- Die typische Wellenlänge von Röntgenstrahlung liegt zwischen etwa 100 und 0.1 Å, was in etwa Frequenzen ν zwischen 10^{16} und 10^{19} Hz und Photonenenergien $h\nu$ zwischen 0.1 und 100 keV entspricht.
- Die Absorption von Röntgenstrahlung erfolgt über (i) die Photoionisation, (ii) die Compton-Streuung und (iii) die Paarbildung für $E_\gamma \geq 2m_0c^2 \simeq 1$ MeV.
- Der Absorptionskoeffizient aufgrund der Photoionisation steigt als Funktion der Energie der absorbierten Photonen immer dann sprunghaft an, wenn die Photonenenergie gerade dazu ausreicht, ein Elektron aus einer inneren Schale ins Kontinuum anzuheben. Es entstehen für jedes Atom charakteristische Absorptionskanten.
- Das charakteristische Linienspektrum und die Absorptionskanten zeigen eine Feinstruktur, die durch die Feinstruktur der inneren Schalen L, M, N, ... verursacht wird.
- Röntgenstrahlung kann durch Beugung an einem Kristallgitter oder durch Filterung mit dünnen Metallfolien monochromatisiert werden.



Zum Mitnehmen

Röntgenstrahlung (durch Beschuss einer Elektrode mit Elektronen) zeigt Linien aus der diskreten Energieniveaus und ein kontinuierliches Spektrum durch Bremsstrahlung.



Vorlesung 19:

Roter Faden:

**Röntgenstrahlung
Laserprinzip**

Folien auf dem Web:

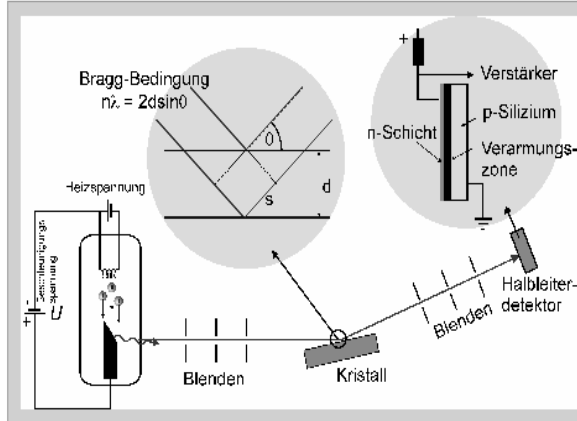
<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

**Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag**



Röntgenstrahlung

Röntgen-Spektrometer



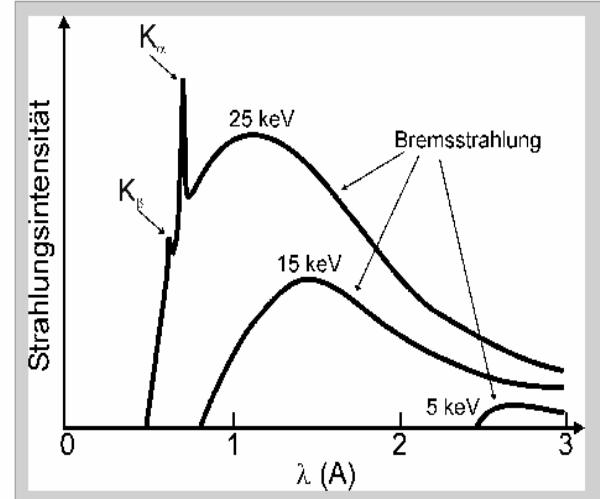
Spektroskopie der inneren Schalen.

- ▶ $E = 1-100 \text{ keV}$
- ▶ $\lambda = 0,1-10 \text{ \AA}$

Röntgen-Bremsspektrum

- ▶ Kontinuierlich
- ▶ Grenzfrequenz $\nu_{\max} = eU/h$
- ▶ $I(\nu) \sim Z(\nu_{\max} - \nu)$

Röntgen-Spektrum

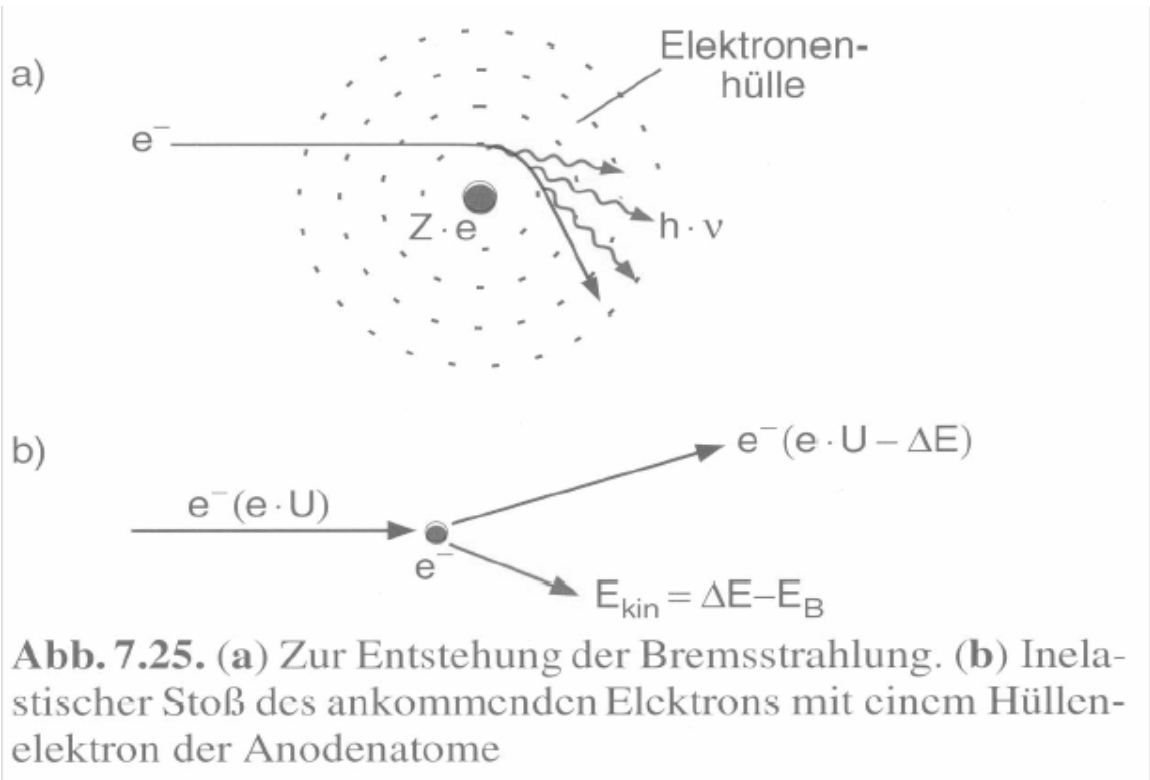


Charakteristisches Spektrum

- ▶ Wenige Linien
- ▶ Zusammengefasst in Serien
- ▶ Kurzwellige Grenzfrequenz (Serienkante)
- ▶ Serien verschieben sich mit Z zu höheren Energien



Entstehung der Röntgenstrahlung





Röntgenlinien

Deutung der Röntgen-Spektren durch Kossel 1916 im Modell unabhängiger Teilchen.

- ▶ Energetisches Elektron stößt Elektron aus inneren Schale
- ▶ Unbesetztes Niveau in sonst voller Schale (genannt Loch) hat gleichen Eigenschaften wie ein einzelnes Elektron in der Schale
- ▶ Übergang von Elektronen aus höheren Schalen und Emission eines Photons

Notation

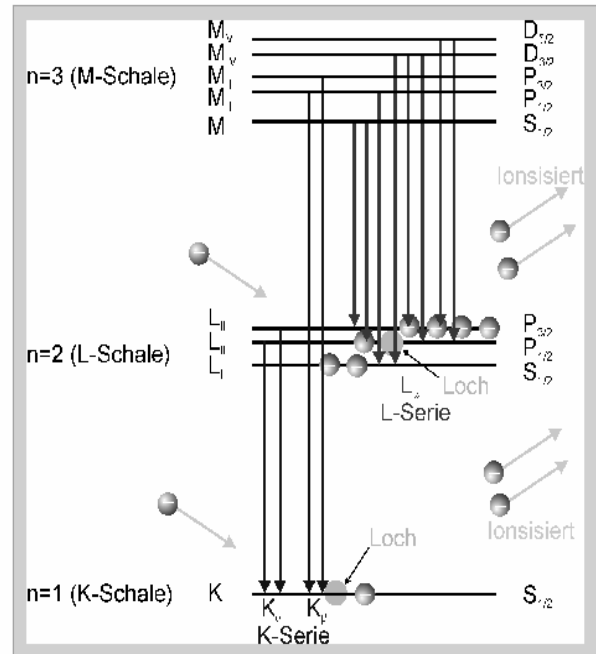
- Serien: K (n=1), L (n=2), M (n=3), N (n=4) ...
- Linien: α , β , γ , δ ...
- Feinaufspaltung: I, II, III, IV ...

Energie der Übergänge

$$\frac{1}{\lambda_{K\sim}} \approx R_H (Z-1)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda_{L\alpha}} \approx R_H (Z-7.4)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right)$$

Hier schirmen innere Elektronen die Kernladung um $1e$ bzw. $7.4e$ ab.



Die Ionisation der inneren Schale kann auch durch Röntgen-Strahlung erfolgen (Photoionisation $\rightarrow$, Röntgen-Fluoreszenz).



Röntgenspektren

Charakteristische Röntgenstrahlung:

Energie der Elektronen muß "genügend" groß sein um Elektronen der Anodenatome aus inneren Schale in freie höhere Energiezustände anzuregen.



mit $E_{kin} - E'_{kin} = E_i - E_k$ und $A^*(E_i) \Rightarrow A(E_k) + h\nu_{ik}$

Bremsstrahlung:

Elektronen wandeln ihre Energie $e \cdot U$ beim Auftreffen auf ein Target in **Bremsstrahlung** um.

Ein Teil wird in kontinuierliche Röntgenstrahlung umgesetzt, ein Teil in Wärme.

Ist **elektromagnetische Strahlung** - zeigt Polarisation, Beugung, Interferenz.

Intensitätsverteilung - siehe Abb.

kurzwellige Grenze: $h\nu \leq h\nu_G = e \cdot U \Rightarrow \lambda \geq \lambda_G = \frac{h \cdot c}{e \cdot U}$

Bei ausreichend großen Spannungen - charakteristische Linien - entsprechen atomaren Übergängen.

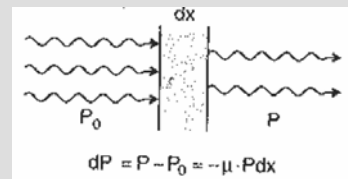


Röntgenabsorption

Paralleles Strahlungsbündel wird in Materialschicht der Dicke dx abgeschwächt: $dP = -\mu P dx$

μ ...Abschwächungskoeffizient

Es gilt: $P(x) = P_0 \cdot e^{-\mu x}$



Abschwächung infolge: Streuung und Absorption.

Schwächungskoeffizient $\mu = \mu_s + \mu_a$

μ_s ...**Streukoeffizient** proportional zu ω^4 wenn Teilchendurchmesser $d \ll \lambda$ (aus Streutheorie)

Daher bei hohen Energien Streuung dominant,
bei kleinen Energien Absorption. Absorption $\propto$ Dichte $\rightarrow$
Massenabsorptionskoeff. $\kappa_\alpha = \mu_\alpha / \rho$ $I = I_0 \exp(-\kappa_\alpha \rho x)$



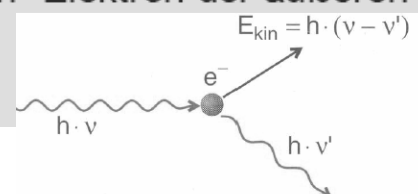
Energieabh. der Absorptionsprozesse

Photoeffekt: Röntgenquant $h\nu$ wird von Atom absorbiert - Elektron aus inneren Schale ionisiert $h\nu + A(E_k) \rightarrow A^+(E_{Ion}) + e^-(E_{kin})$

Energiebilanz: $E_{kin}(e^-) = h\nu - (E_{Ion} - E_k)$

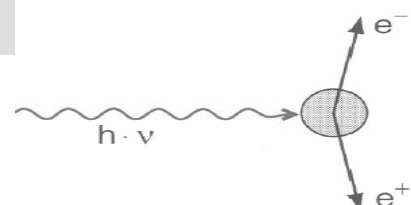
Compton-Effekt: Röntgenquant stößt mit "freien" Elektron der äußeren Schale zusammen - Bindungsenergie $E_B \ll h\nu$

$h\nu + e^- \rightarrow e^-(E_{kin}) + h\nu'$



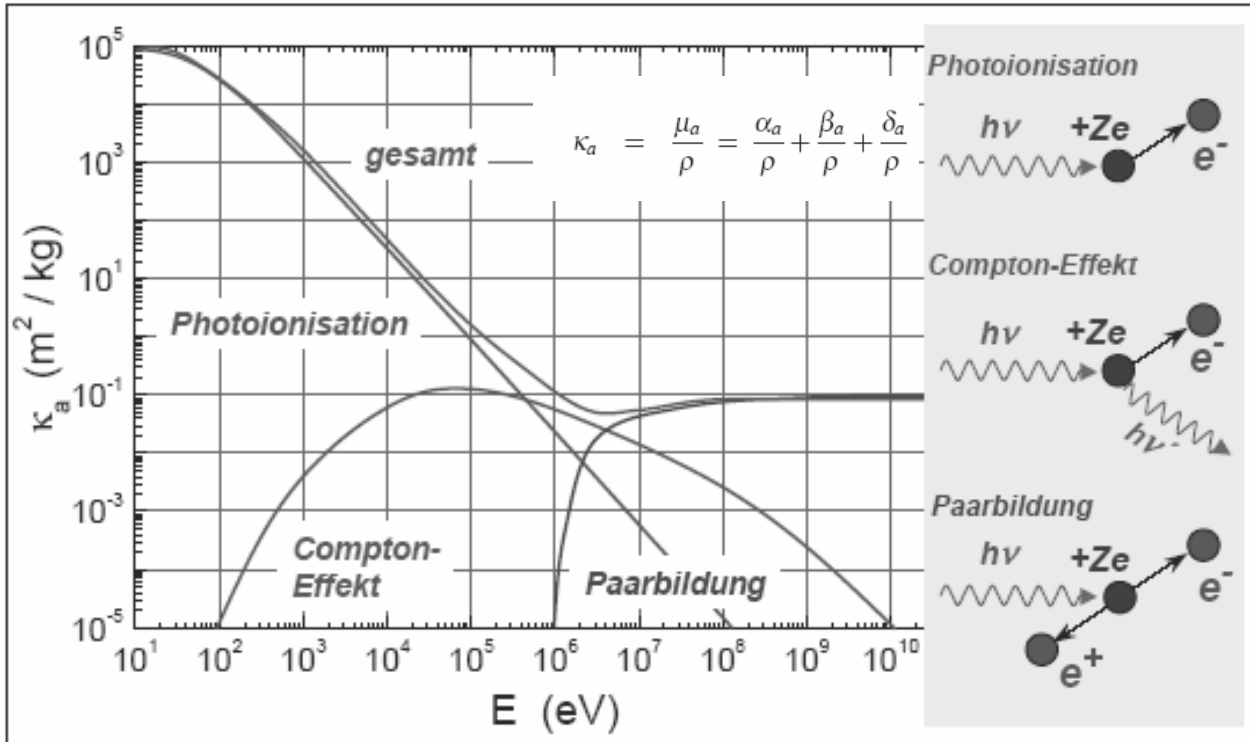
Paarbildung - bei $h\nu > 1\text{MeV}$ wird ein Elektron- Positronpaar erzeugt.

$h\nu \rightarrow e^- + e^+ + 2E_{kin}$ mit $h\nu = 2m_e c^2 + 2E_{kin}$





Beiträge zum Massenabsorptionskoeff.



Juni 21, 2005

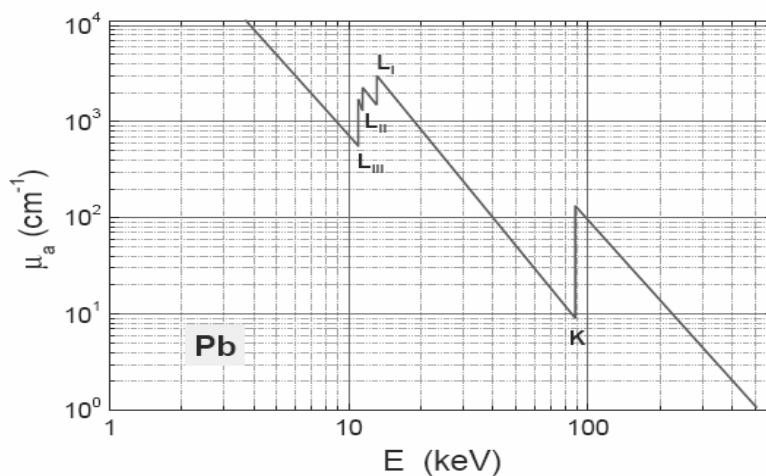
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

8



Energieabhängigkeit der Absorption

$$\kappa_a = \frac{\mu_a}{\rho} = \frac{\alpha_a}{\rho} + \frac{\beta_a}{\rho} + \frac{\delta_a}{\rho} \quad \frac{\alpha_a}{\rho} \propto \frac{Z^4}{(\hbar\omega)^3} \propto Z^4 \lambda^3 \quad \frac{\beta_a}{\rho} \propto \frac{1}{\hbar\omega} \propto \lambda \quad \frac{\delta_a}{\rho} \propto \frac{Z}{\ln(\hbar\omega)}$$



Da in das Abschwächungsgesetz $I = I_0 \exp(-\kappa_a \rho x)$ ferner die Dichte ρ des Absorbermaterials eingeht, verwendet man zur Abschwächung von Röntgenstrahlung Materialien mit hohem Z und hohem ρ . Aufgrund diesen Zusammenhangs schirmt z.B. Blei ($Z = 82$) Röntgenstrahlung wesentlich besser ab als Aluminium ($Z = 13$).

Juni 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Materialabhängigkeit

$$I = I_0 \exp(-\kappa_a \rho x) .$$

Energie		Luft	H ₂ O	Al	Cu	W	Pb
E (eV)	λ (nm)	κ_a (m ² /kg)					
5	0.246	2	2.0	25	24	70	100
10	0.123	0.5	0.52	2.6	22.4	9.53	13.7
50	0.025	0.02	0.92	0.04	0.26	0.6	0.8
100	0.012	0.015	0.017	0.02	0.05	0.4	0.6

Tabelle 8.2: Massenabsorptionskoeffizienten κ_a verschiedener Absorbermaterialien Röntgenstrahlung verschiedener Energie.



Absorptionskanten

Mißt man atomare Absorptionsquerschnitte σ_A über größeren Wellenlängenbereich so findet man zuerst einen Verlauf $\sigma_A \propto \lambda^3$ aber bei bestimmten Wellenlängen λ_k Sprünge - **Absorptionskanten**. Charakteristisch für absorbierendes Material.

Entsprechen Anregungsenergien.

Trägt man $\sqrt{\nu_k}$ mit $\nu_k = 1/\lambda_k$ der Kante n gegen die Kernladungszahl Z auf so findet man es gilt:

$$\nu_k = K_n (Z - 1)^2$$

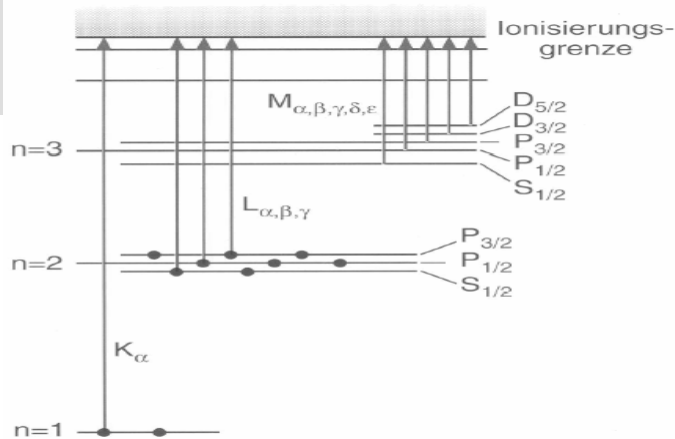


Abb. 7.35. Zur Erklärung der Absorptionskanten



Moseley Gesetz

K_n ist eine von der Hauptquantenzahl n abhängige Konstante $\rightarrow$ Moseley-Gesetz.

Energie $h \cdot \nu_{ik}$ eines Röntgenquants kann beschrieben werden durch:

$$h \cdot \nu_{ik} = (Z - S)^2 \cdot Ry \cdot hc \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\bar{\nu}_{ik} = (Z - S)^2 \cdot Ry \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$(Z - S) = Z_{eff}$...auf Elektron wirkende effektive Kernladung
 SAbschirmzahl.



Moseley Diagramm $\rightarrow$ Abschirmzahl S

$$h \cdot \nu_{ik} = (Z - S)^2 \cdot Ry \cdot hc \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (7.83a)$$

Frequenz aus Wellenlängenbestimmung
durch Bragg Beugung am Gitter

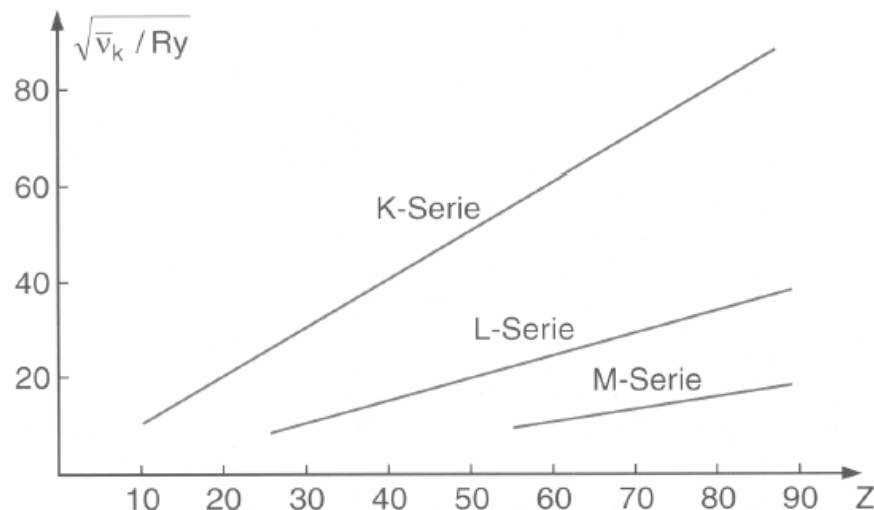
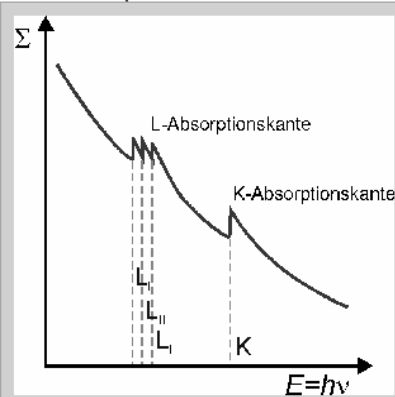


Abb. 7.36. Moseley-Diagramm der Absorptionskanten $\nu_K(Z)$



Zusammenfassung

Die Abschwächung von Röntgen-Strahlen in Materie wird durch den makroskopischen Wirkungsquerschnitt oder Absorptionskoeffizienten Σ beschrieben.



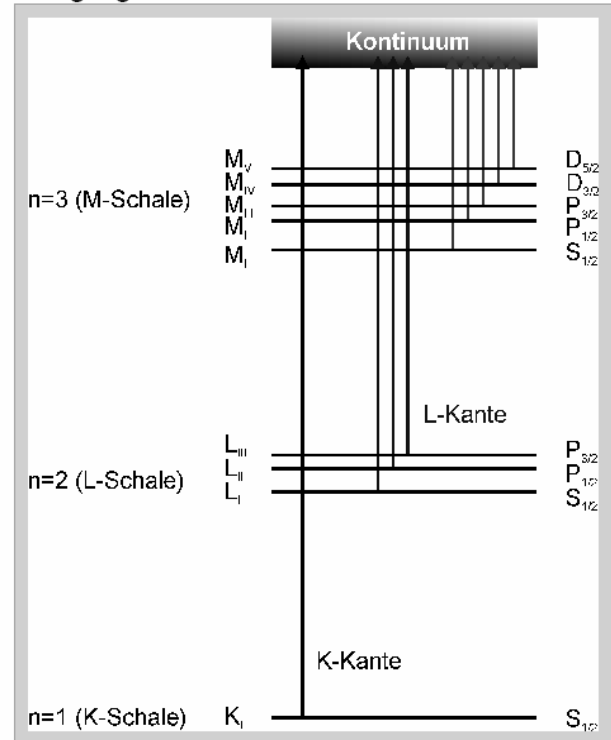
Wenn die Energie der Strahlung ausreicht, Elektronen aus einer tieferen Schale in das Kontinuum anzuregen, nimmt der Absorptionskoeffizient sprunghaft zu (s. rechts).

Man beobachtet:

- Sprunghafte Zunahme von Σ mit der Energie der Strahlung (Absorptionskanten)
- Dazwischen Abnahme mit $Z^{3-4}/(h\nu)^3$

Halbwertsdicke d ist der Weg, nach dem die Strahlung auf halbe Intensität gesunken ist.

Anregungen ins Kontinuum



Juni 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

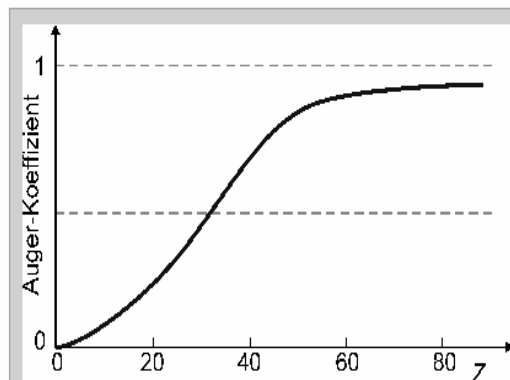
14



Auger-Elektronen

Nicht alle Atome mit einem fehlenden K- oder L-Elektron emittieren ein Röntgen-Quant beim Übergang in den Grundzustand.

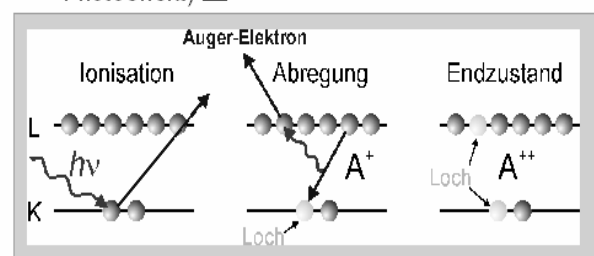
Auger-Koeffizient: Relative Zahl an Atome die mit Röntgen-Quant in Grundzustand übergehen.



Erklärung

Ein Teil der Atome geht über Emission eines Auger-Elektrons in den Grundzustand über:

- Ionisation innerer Schale durch Röntgen-Quant
- Übergang eines Elektrons aus höherer Schale unter Emission eines Quants
- Quant regt weiteres Elektron in einen Kontinuumszustand an (analog zum atomaren Photoeffekt)



Energie des Auger-Elektrons

$$E_{\text{Auger}} = E_K - E_L - E_L$$

Inneres Photon Bindungsenergie Auger-Elektron

Juni 21, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

15



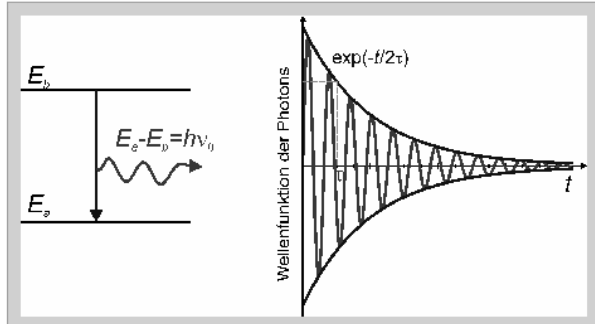
Linienformen

Angeregte Zustände zerfallen exponentiell in der charakteristischen Zeit τ (mittlere Lebensdauer)

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$$

Wellenfunktion des emittierten Quants:

$$\psi(t) = \psi_0 \left(e^{i\omega_0 t} e^{-t/2\tau} + CC \right)$$



Resultierende Spektrum aus Fourier-Transformierten:

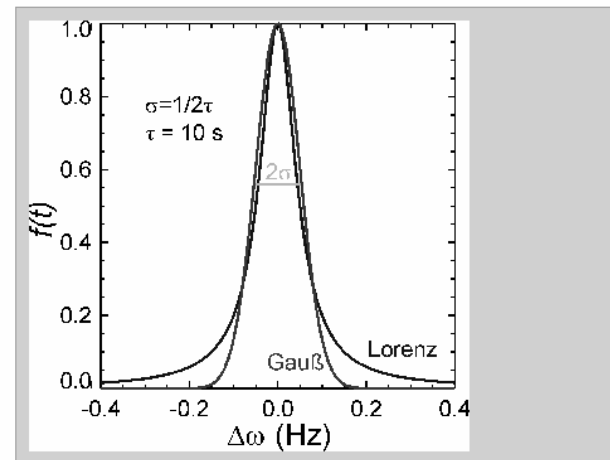
$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) e^{-i\omega t} dt$$

Integration ergibt:

$$C(\omega) = \frac{-\psi_0}{i(\omega_0 - \omega) - 1/2\tau} + \varepsilon$$

Die natürliche Linienform ist ein Lorenz-Profil

$$|C(\omega)|^2 = \frac{I}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/2\tau)^2}$$



Beobachtet man Linien die von einem heißen Gas emittiert werden, so bewirkt der Doppler-Effekt ein Gauß-Profil

$$|C(\omega)|^2 = I \exp\left(-(\omega_0 - \omega)^2 / 2\sigma^2\right)$$



Synchrotronstrahlung (-> sehr intense Röntgenstrahlung)

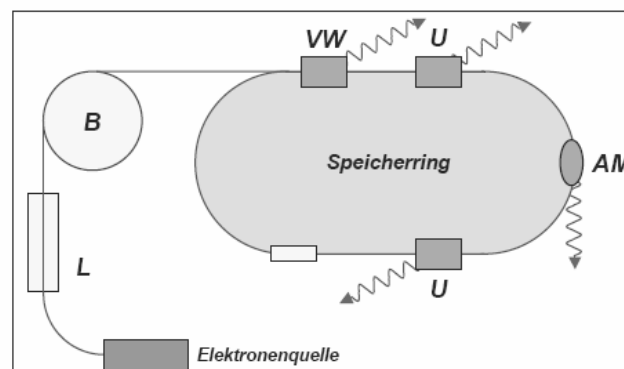


Abbildung 8.10: Schematische Darstellung einer Synchrotronstrahlungsquelle. Der Linearbeschleuniger L sorgt für die Anfangsbeschleunigung, der Booster B ist ein Synchrotron, mit dem die Elektronen bis auf ihre Endenergie (einige GeV) beschleunigt werden. Im Speicherring befinden sich einige Insertion Devices (Undulatoren U , Vielpolwiggler VW oder Ablenkmagneten AM etc.). Mit der Hochfrequenzbeschleunigungsstrecke RF wird der Energieverlust pro Umlauf ausgeglichen.



Synchrotronstrahlung (-> sehr intense Bremsstrahlung)

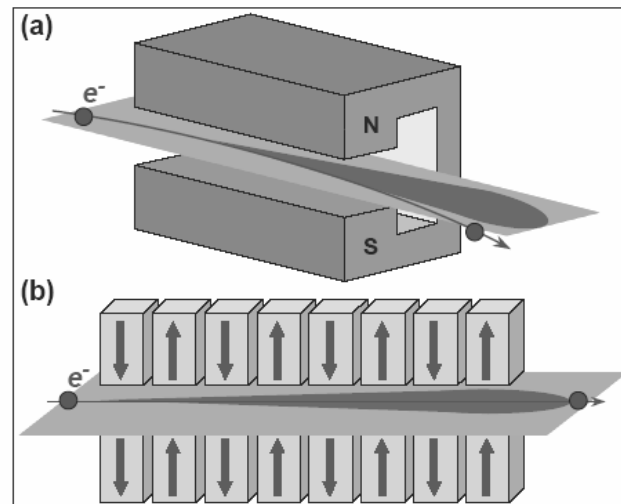


Abbildung 8.11: (a) Schematische Darstellung eines Dipolmagneten zur Ablenkung des Elektronenstrahl in einem Speicherring. (b) Schematische Darstellung eines Undulators. Durch die periodische Variation der Feldrichtung wird der Elektronenstrahl in der Strahlebene hin- und hergelenkt. Die Abstrahlung der Synchrotronstrahlung erfolgt gerichtet in Strahlrichtung (Quelle: ESRF).

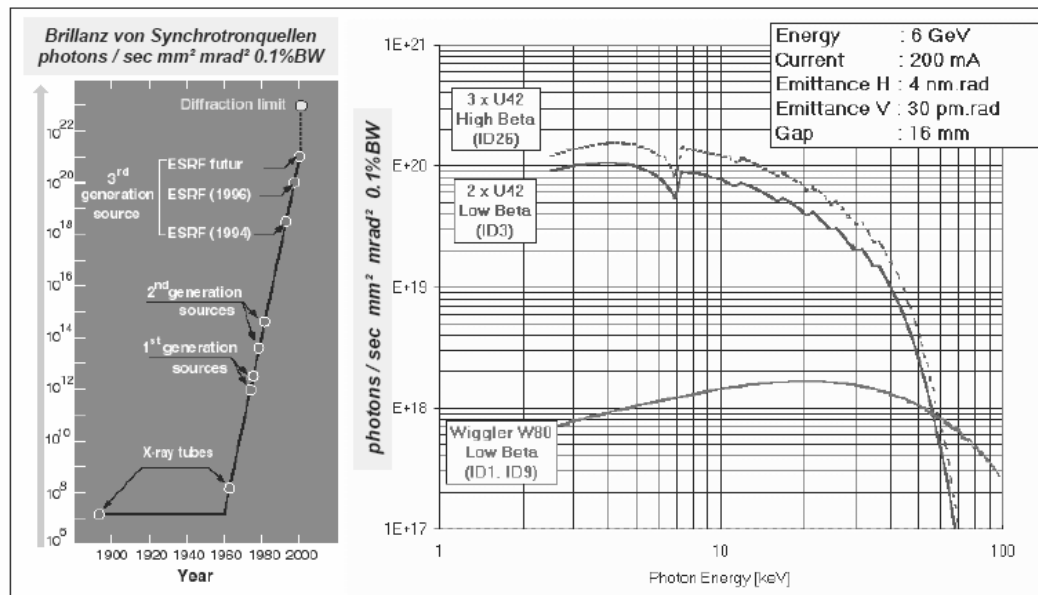


Abbildung 8.8: Links: Brillanz von Synchrotronstrahlungsquellen verschiedener Generationen. Die Brillanz ist definiert als Zahl der Photonen pro Einheitfläche der Quelle und Raumwinkel und für eine Bandbreite, die einem 1/1000-tel der Photonenenergie entspricht. Synchrotronquellen der 1. Generation (~ 1970) und der 2. Generation (~ 1980) benutzen die Ablenkung von schnellen Elektronen durch Magnetfelder. Die Quellen der 3. Generation (ab etwa 1995) benutzen so genannte *Insertion Devices* (Wellenlängenschieber, Wiggler, Undulatoren), die in lineare Bereiche eines Beschleunigerrings eingebracht werden. Die Quellen der 3. Generation haben eine etwa 10^{12} mal höhere Brillanz als eine Röntgenröhre. Rechts: Beispiele für die Brillanz, die an der ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) als Funktion der Wellenlänge für verschiedene Insertion Devices erreicht wird (Stand: 1998). Quelle: ESRF.

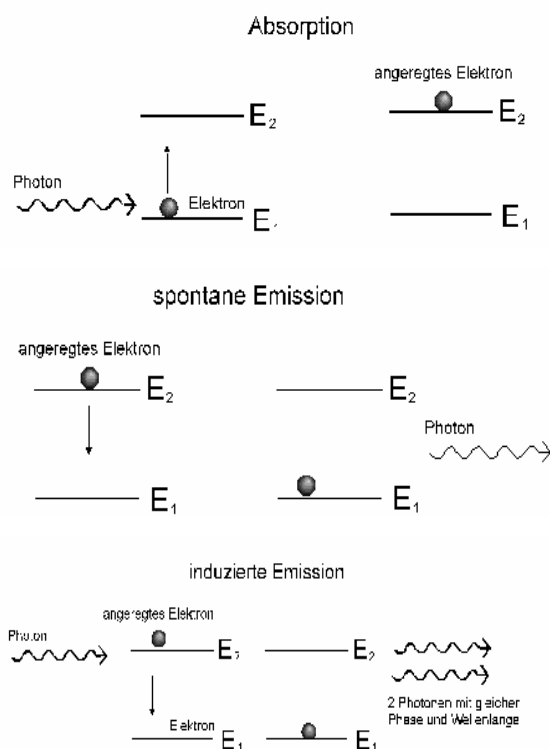


Zusammenfassung

- Ein- und Mehrelektronenanregungen in Atomen können durch Absorption elektromagnetischer Strahlung oder durch inelastische Stoßprozesse erhalten werden.
- Werden Elektronen aus den inneren Schalen eines Atoms herausgelöst, spricht man von Innerschalenanregungen.
- Röntgenstrahlung entsteht
 1. beim Abbremsen von Elektronen mit Energien im keV-Bereich. Das resultierende Bremsspektrum ist kontinuierlich.
 2. durch Übergänge von Elektronen auf freie Plätze in inneren Schalen. Das daraus resultierende Spektrum ist ein Linienspektrum, das für jedes Atom charakteristisch ist (charakteristische Röntgenstrahlung).
- Die typische Wellenlänge von Röntgenstrahlung liegt zwischen etwa 100 und 0.1 Å, was in etwa Frequenzen ν zwischen 10^{16} und 10^{19} Hz und Photonenenergien $h\nu$ zwischen 0.1 und 100 keV entspricht.
- Die Absorption von Röntgenstrahlung erfolgt über (i) die Photoionisation, (ii) die Compton-Streuung und (iii) die Paarbildung für $E_\gamma \geq 2m_0c^2 \simeq 1$ MeV.
- Der Absorptionskoeffizient aufgrund der Photoionisation steigt als Funktion der Energie der absorbierten Photonen immer dann sprunghaft an, wenn die Photonenenergie gerade dazu ausreicht, ein Elektron aus einer inneren Schale ins Kontinuum anzuheben. Es entstehen für jedes Atom charakteristische Absorptionskanten.
- Das charakteristische Linienspektrum und die Absorptionskanten zeigen eine Feinstruktur, die durch die Feinstruktur der inneren Schalen L, M, N, ... verursacht wird.
- Röntgenstrahlung kann durch Beugung an einem Kristallgitter oder durch Filterung mit dünnen Metallfolien monochromatisiert werden.



Prinzip eines Lasers



Das Wort Laser ist eine Abkürzung für Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

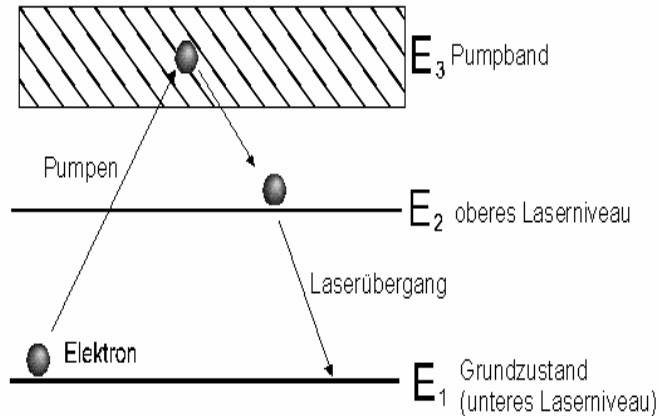
Für den Laser spielen drei Wechselwirkungen zwischen Atomen und Photonen eine Rolle:

Absorption, spontane Emission und induzierte Emission:



Pumpen eines Lasers

Pumpen eines 3-Niveau-Lasers



Um die Elektronen in einen angeregten Zustand zu bringen, muß der Laser "gepumpt" werden. Dies kann z.B. durch Gasentladung, Licht oder andere Laser geschehen. Bei einem 3-Niveau-Laser wird dabei ein Elektron in ein noch höheres Energieniveau gebracht und fällt dann wieder auf das Energieniveau E2 zurück (siehe Skizze). Die dabei entstehende Energie wird als Wärme abgegeben.



Besetzungsinversion

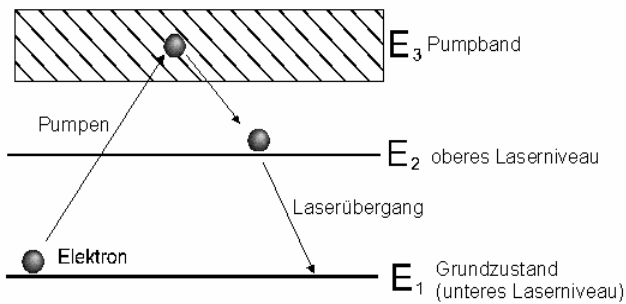
In einem Laser werden zunächst durch das sogenannte "Pumpen" Elektronen in einem Medium auf ein höheres Energieniveau gebracht. Es müssen sich mehr Elektronen im angeregten Zustand befinden als im unangeregten. Diesen Zustand nennt man Besetzungsinversion.

Wird nun durch die spontane Emission ein Photon frei, löst dieses durch die induzierte Emission eine "Kettenreaktion" aus. Die erzeugten Photonen besitzen günstigerweise alle die gleiche Wellenlänge und Phase. Um den Effekt zu verstärken werden normalerweise Spiegel auf beiden Seiten des Mediums plziert. Einer von ihnen ist nicht vollständig verspiegelt und läßt einen geringen Teil des Lichts passieren. Das Licht wird nun zwischen beiden Spiegeln hin- und herreflektiert und erzeugt weitere induzierte Emissionen. Der erzeugte Laserstrahl tritt durch den Halbspiegel aus.

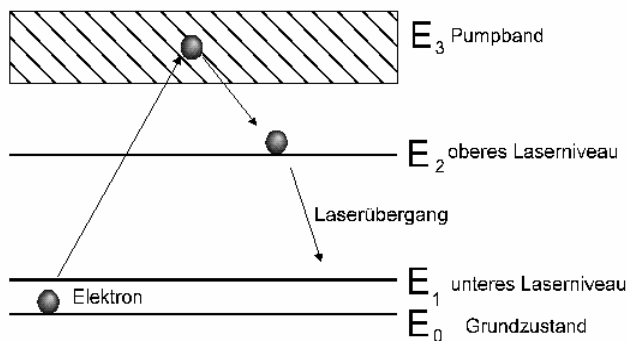


Pumpen eines Lasers

Pumpen eines 3-Niveau-Lasers



Pumpen eines 4-Niveau-Lasers

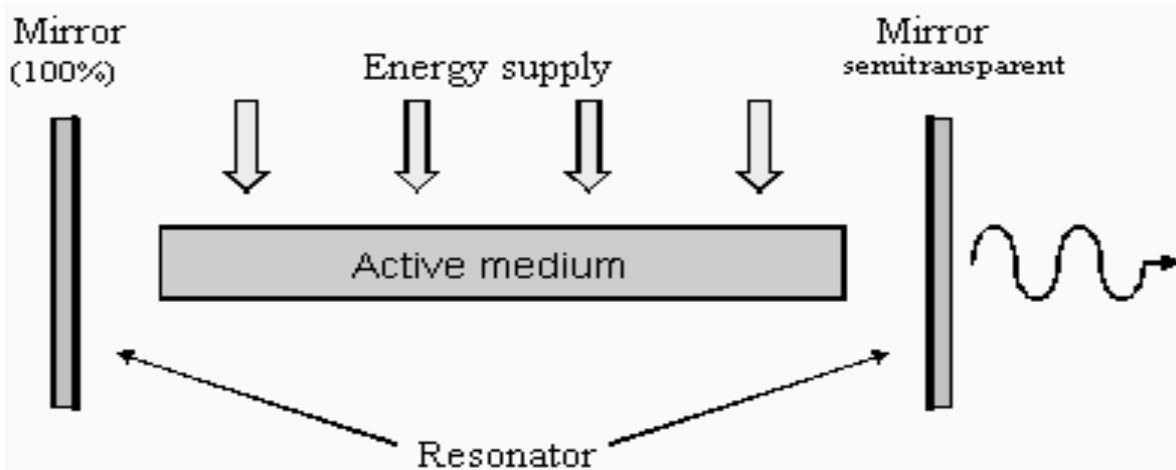


Um die Elektronen in einen angeregten Zustand zu bringen, muß der Laser "gepumpt" werden. Dies kann z.B. durch Gasentladung, Licht oder andere Laser geschehen. Bei einem 3-Niveau-Laser wird dabei ein Elektron in ein noch höheres Energieniveau gebracht und fällt dann wieder auf das Energieniveau E_2 zurück (siehe Skizze). Die dabei entstehende Energie wird als Wärme abgegeben.

Freq. des Lasers:
$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$



Aufbau eines Lasers



**3 Komponenten: Medium mit metastabilen Energieniveaus
Resonator mit Spiegeln
Energiequelle zum Pumpen**



Zum Mitnehmen

Röntgenstrahlung (durch Beschuss einer Elektrode mit Elektronen) zeigt Linien aus der diskreten Energieniveaus und ein kontinuierliches Spektrum durch Bremsstrahlung.

Laser benutzt stimulierte Emission um kohärentes monochromatisches Licht zu erzeugen



Vorlesung 20:

Roter Faden:

Laser

Exotische Atome

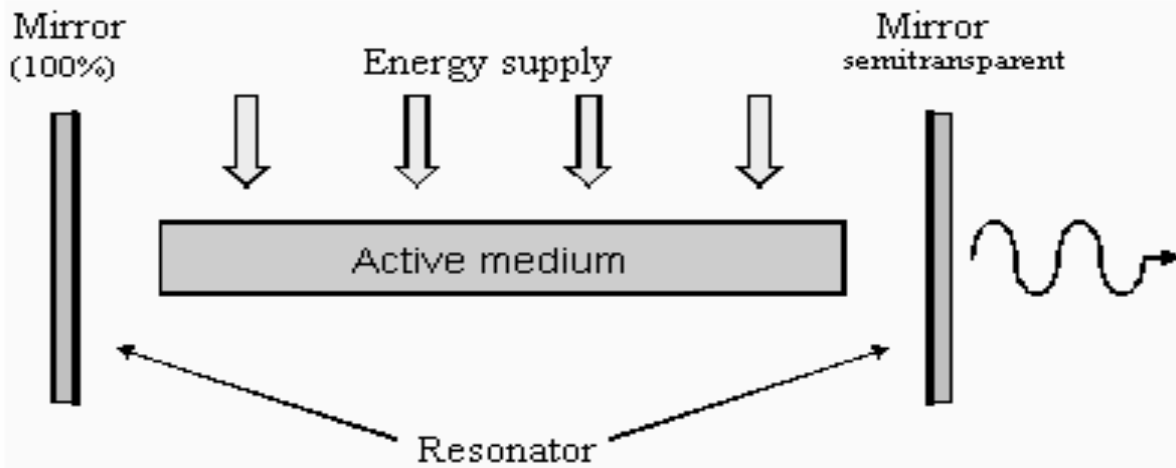
Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag



Aufbau eines Lasers

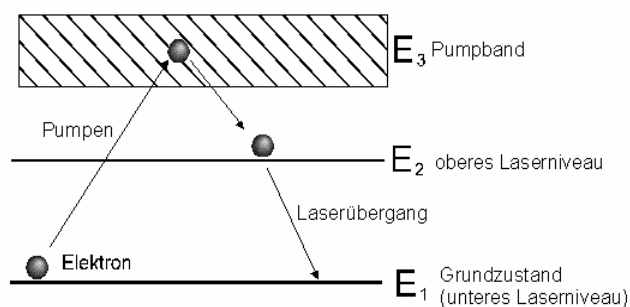


**3 Komponenten: Medium mit metastabilen Energieniveaus
Resonator mit Spiegeln
Energiequelle zum Pumpen**

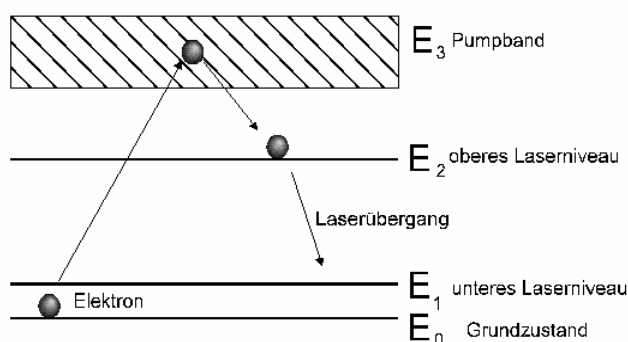


Pumpen eines Lasers

Pumpen eines 3-Niveau-Lasers



Pumpen eines 4-Niveau-Lasers



Um die Elektronen in einen angeregten Zustand zu bringen, muß der Laser "gepumpt" werden. Dies kann z.B. durch Gasentladung, Licht oder andere Laser geschehen. Bei einem 3-Niveau-Laser wird dabei ein Elektron in ein noch höheres Energieniveau gebracht und fällt dann wieder auf das Energieniveau E2 zurück (siehe Skizze). Die dabei entstehende Energie wird als Wärme abgegeben.

Freq. des Lasers:
$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$



Eigenschaften des Laserlichts

1. hohe Monochromie : $\frac{\Delta\nu}{\nu} \ll 10^{-15}$ ($\Delta\nu \approx 1 \text{ Hz}$)
2. Räumliche und zeitliche Kohärenz, d.h. alle Photonen haben um jeden Ort und zu jedem Zeitpunkt die *gleiche* Phase $\rightarrow$ Lichtwellezug mit einer Länge l , der nicht begrenzt ist durch stehende Wellen im Laser, sondern
 $l = \frac{c}{\Delta\nu} \approx 3 \times 10^8 \text{ m}$ für : $\Delta\nu \approx 1 \text{ Hz}$, d.h. Abschwächung der Intensität durch Interferenzen erst nach $3 \times 10^8 \text{ m}$!
3. Starke Bündelung (begrenzt durch Beugung am Fenster)
4. Ultrakurze Pulse (10^{-13} s) und hohe Intensität $\rightarrow$ hohe Leistung (MW!)



Warum hat Laserlicht diese ungewöhnliche Eigenschaften?

1. Monochromasie bedingt durch die Energieunschärfe der Laserniveaus : wenn die Lebensdauer τ sehr groß ist, dann gilt nach der Unschärferelation:
 $\Delta E = \frac{h}{\Delta t} = \frac{h}{\tau}$ sehr klein.
2. Die Kohärenz ist eine quantenmechanische Eigenschaft: die stimulierte Emission ist maximal, wenn die Wellenfunktion des Photons und des Elektrons in Phasen sind.

Durch Kohärenz des Lichts werden die AMPLITUDEN der Photonen addiert $\rightarrow$

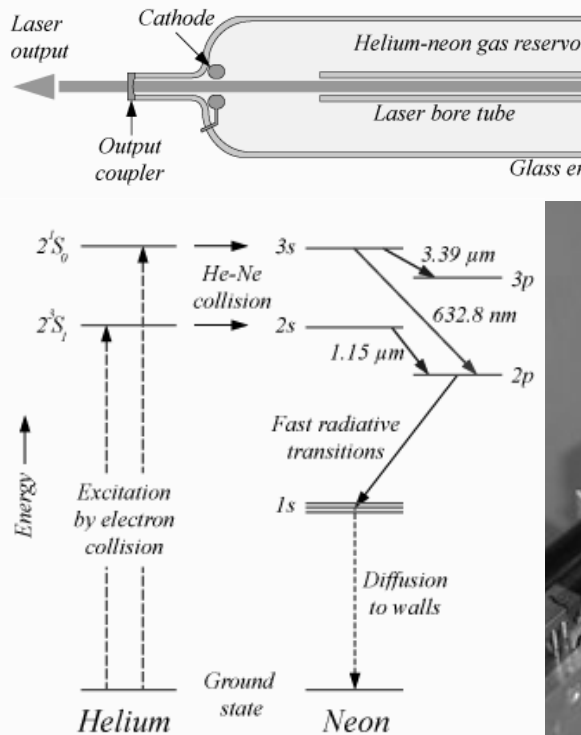
Bei N Photonen $\rightarrow$ Amplitude NA_0

Intensität $\propto N^2 A_0^2 = N^2 I_0$.

Bei inkohärenten Quellen (Glühbirne) : $\propto NI_0$ ($\propto$ Anzahl der Photonen)



Konkretes Beispiel: He-Neon Laser



Lasermedium:
1 mbar HeNe (1:7)

Angeregte metastabile He 2^3S_1 Niveaus hat fast gleiche Energie wie Ne*

Daher können He Atome abregen durch Stoß mit Ne und dadurch Ne anregen!

Lasern durch induzierte Emission nach mehreren niedrigeren Energieniv. möglich.



HeNe Laser

The laser process starts with collision of electrons from the electrical discharge with the helium atoms in the gas. This excites helium from the ground state to the 2^3S_1 and 2^1S_0 long-lived, metastable excited states. Collision of the excited helium atoms with the ground-state neon atoms results in transfer of energy to the neon atoms, exciting them into the $2s$ and $3s$ states. This is due to a coincidence of energy levels between the helium and neon atoms. This process is given by the reaction equation:

$$\text{He}^* + \text{Ne} \rightarrow \text{He} + \text{Ne}^* + \Delta E$$
 where He^* represents an excited state, and ΔE is the small energy difference between the energy states of the two atoms, of the order of 0.01 eV .

Spontaneous emission between the $3s$ and $2p$ states results in emission of 632.8 nm wavelength light, the typical operating wavelength of a HeNe laser.

The gain bandwidth of the laser is dominated by Doppler broadening, and is quite narrow at around 1.5 GHz . This, along with the visible output and excellent beam quality possible from these lasers, makes the HeNe a useful source for holography and as a reference for spectroscopy. Other applications include use in barcode scanners



Gas lasers

Laser gain medium and type	Operation wavelength(s)	Pump source	Applications and notes
Helium-neon gas laser	632.8 nm (543.5 nm, 593.9 nm, 611.8 nm, 1.1523 μ m, 1.52 μ m, 3.3913 μ m)	Electrical discharge	Interferometry , holography , spectroscopy , barcode scanning, alignment, optical demonstrations.
Argon ion gas laser	488.0 nm, 514.5 nm, (351 nm, 465.8 nm, 472.7 nm, 528.7 nm)	Electrical discharge	Retinal phototherapy (for diabetes), lithography , pumping other lasers.
Krypton ion gas laser	416 nm, 530.9 nm, 568.2 nm, 647.1 nm, 676.4 nm, 752.5 nm, 799.3 nm	Electrical discharge	Scientific research, mixed with argon for creation of "white-light" lasers, light shows.
Xenon ion gas laser	Many lines throughout entire visible spectrum extending into the UV and IR .	Electrical discharge	Scientific research.
Nitrogen gas laser	337.1 nm	Electrical discharge	Pumping of dye lasers, measurement of air pollution, scientific research, nitrogen lasers are capable of operating superradiantly (without a resonator cavity), amateur laser construction.
Hydrogen fluoride laser	2.7 to 2.9 μ m for (Hydrogen fluoride) 3.6 to 4.2 μ m for (Deuterium fluoride)	Chemical reaction in a burning jet of ethylene and nitrogen trifluoride (NF_3)	Used in research for laser weaponry by the U.S. DOD , operated in continuous wave mode and capable of extremely high powers in the megawatt range.
Chemical Oxygen-iodine Laser (COIL)	1.315 μ m	Chemical reaction in a jet of singlet delta oxygen and iodine	Laser weaponry, scientific and materials research, laser used in the U.S. military's Airborne laser , operated in continuous wave mode and capable of extremely high powers in the megawatt range.
Carbon dioxide (CO₂) gas laser	10.6 μ m, (9.4 μ m)	Transverse (high power) or longitudinal (low power) electrical discharge	Material processing (cutting , welding , etc.), surgery .

Juni 24, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

8



Festkörper Laser

Laser gain medium and type	Operation wavelength(s)	Pump source	Applications and notes
Ruby solid-state laser	694.3 nm	Flashlamp	Holography , tattoo removal. The first type of laser invented, in 1960 .
Neodymium YAG (Nd:YAG) solid-state laser	1.064 μ m, (1.32 μ m)	Flashlamp, laser diode	Material processing, rangefinding , laser target designation, surgery, research, pumping other lasers (in combination with frequency doubling). One of the most common high power lasers. Usually pulsed (down to fractions of a nanosecond)
Neodymium YLF (Nd:YLF) solid-state laser	1.047 and 1.053 μ m	Flashlamp, laser diode	Mostly used for pulsed pumping of certain types of pulsed Ti:sapphire lasers, in combination with frequency doubling .
Neodymium YVO₄ (Nd:YVO) solid-state laser	1.064 μ m	laser diode	Mostly used for continuous pumping of mode-locked Ti:sapphire lasers, in combination with frequency doubling .
Neodymium Glass (Nd:Glass) solid-state laser	~1.062 μ m (Silicate glasses), ~1.054 μ m (Phosphate glasses)	Flashlamp, laser diode	Used in extremely high power (Terawatt scale), high energy (Megajoules) multiple beam systems for inertial confinement fusion . Nd:Glass lasers are usually frequency tripled to the third harmonic at 351 nm in laser fusion devices.
Titanium sapphire (Ti:sapphire) solid-state laser	650-1100 nm	Other laser	Spectroscopy, LIDAR , research. This material is often used in highly-tunable mode-locked infrared lasers to produce ultrashort pulses and in amplifier lasers to produce ultrashort and ultra-intense pulses.
Thulium YAG (Tm:YAG) solid-state laser	2.0 μ m	Laser diode	Laser radar.
Ytterbium YAG (Yb:YAG) solid-state laser	1.03 μ m	Laser diode, flashlamp	Optical refrigeration , materials processing, ultrashort pulse research, multiphoton microscopy, LIDAR .
Holmium YAG (Ho:YAG) solid-state laser	2.1 μ m	Laser diode	Tissue ablation, kidney stone removal, dentistry .
Cerium doped lithium strontium(or calcium)	~280 to 316 nm	Frequency quadrupled Nd:YAG laser pumped,	Remote atmospheric sensing. LIDAR . optics research.

Juni 24, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Halbleiter Laser

Laser gain medium and type	Operation wavelength(s)	Pump source	Applications and notes
<u>Semiconductor laser diode</u>	wavelength depends on device material: 0.4 μm (GaN) or 0.63-1.55 μm (AlGaAs) or 3-20 μm (lead salt)	Electrical current	<u>Telecommunications, holography, laser pointers, printing, pump sources for other lasers.</u> The 780 nm AlGaAs laser diode, used in <u>compact disc players</u> , is the most common type of laser in the world.

When a diode is forward biased, holes from the p-region are injected into the n-region, and electrons from the n-region are injected into the p-region. If electrons and holes are present in the same region, they may radiatively recombine—that is, the electron "falls into" the hole and emits a photon with the energy of the band gap. This is called spontaneous emission, and is the main source of light in a light-emitting diode.

Under suitable conditions, the electron and the hole may coexist in the same area for quite some time (on the order of microseconds) before they recombine. If a photon of exactly the right frequency happens along within this time period, recombination may be stimulated by the photon. This causes another photon of the same frequency to be emitted, with exactly the same direction, polarization and phase as the first photon.



Halbleiter Laser

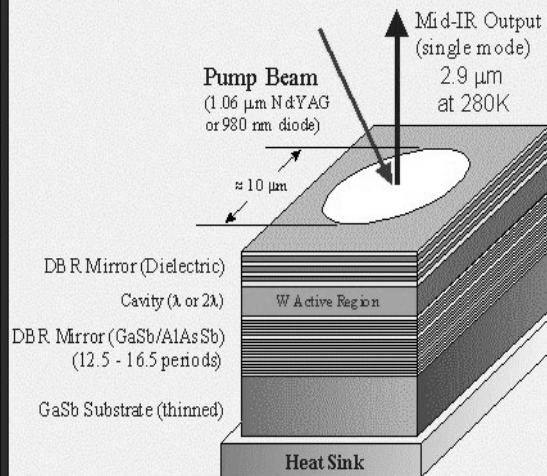
In a laser diode, the semiconductor crystal is fashioned into a shape somewhat like a piece of paper—very thin in one direction and rectangular in the other two. An optical waveguide is made on that piece of paper, such that the light is confined to a relatively narrow line. The top of the crystal is n-doped, and the bottom is p-doped, resulting in a large, flat p-n junction. The two ends of the crystal are cleaved so as to form perfectly smooth, parallel edges; two reflective parallel edges form a resonator called a Fabry-Perot cavity. Photons emitted in precisely the right direction will travel along the waveguide and be reflected several times from each end face before they are emitted. Each time they pass through the cavity, the light is amplified by stimulated emission. Hence, if there is more amplification than loss, the diode begins to "lase".



VCSEL Vertical Cavity Surface Emitting Laser

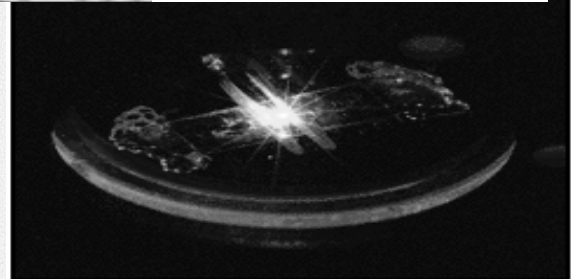
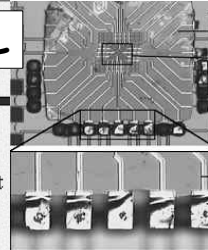
<http://en.wikipedia.org/wiki/VCSEL>

Simulations performed
using QSA Software



NRL / HUGHES

Telecommunication
AIDS detector
Cancer detector



LAB ON A CHIP COMES CLOSER - A biocavity laser - a VCSEL capped by a glass plate enclosing a blood sample, all about the size of a quarter - is excited by a pump laser in Paul Gourley's lab. The VCSEL device can produce information about the state of millions of blood cells in a few minutes.
[Download 150dpi jpg image, 'VCSEL.jpg', 1.5MB](#)



Geschichte des Lasers

Theoretically, the principle of the maser was described by Nikolay Basov and Alexander Prokhorov from Lebedev Institute of Physics at an *All-Union Conference on Radio-Spectroscopy* held by USSR Academy of Sciences in May 1958. They subsequently published their results in October 1958.

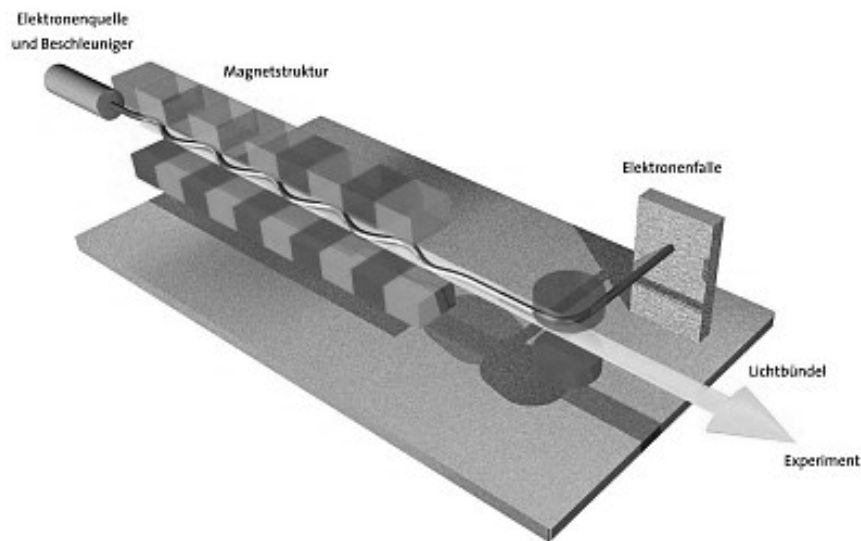
Independently, Charles H. Townes, J. P. Gordon, and H. J. Zeiger built the first maser at Columbia University in 1958. The device used stimulated emission in a stream of energized ammonia molecules to produce amplification of microwaves at a frequency of 24 gigahertz. For their research in this field Townes, Basov and Prokhorov were awarded the Nobel Prize in Physics in 1964.

Townes later worked with Arthur L. Schawlow to describe the principle of the optical maser, or laser, which Theodore H. Maiman first demonstrated in 1960.

Maser: Microwave Amplification by stimulated Emission
Microwellen Verstärker, Rauschen $\propto \nu^3$ durch spontane Emission kleiner als beim Laser, Freq. sehr stabil.



Free Electron Laser



Elektronen durch Wiggler -> kohärentes Röntgenlicht
 -> Amplituden der Photonen addieren
 -> Leistung $\propto N^2$ statt N .



Laserbedingung

Die Anzahl der Photonen ändert sich durch

- Stimulierte Emission $\rightarrow \dot{n} = +W N_2 n$
- Absorption $\rightarrow \dot{n} = -W N_1 n$
- spontane Emission $\rightarrow \dot{n} = W^1 N_2$
 (unkorrelierte Emission = "Rauschen" des Lasers)
- Verluste durch Austritt : $\dot{n} = -\frac{n}{t_0}$, wobei t_0 die Lebensdauer der Photonen im Laser ist

Ohne Rauschen :

$$\frac{dn}{dt} = W(N_2 - N_1)n - \frac{n}{t_0}$$

$$W = \frac{1}{V D(\nu) \Delta \nu \tau},$$

wobei :

$D(\nu) \Delta \nu$ = Anzahl der stehenden Wellen im Laservolumen V

τ = Lebensdauer des oberen Laserniveaus

$$D(\nu) = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} \text{ (Jeans)}$$

$\dot{n} > 0$, wenn

$$\frac{N_2 - N_1}{V} > \frac{8\pi \nu^2 \Delta \nu \tau}{c^3 t_0} \text{ notwendige Inversion pro Volumen}$$

Bei guten Lasermaterialien wird die rechte Seite recht klein.



Übergangswahrscheinlichkeiten

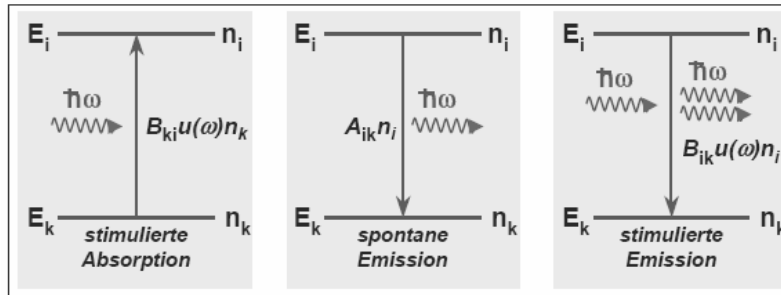


Abbildung 6.1: Strahlungsübergänge nach Einstein.

Hierbei ist die Zahl $g = 2j + 1$ das statistische Gewicht eines Zustands mit Quantenzahl j

Besetzung nach Boltzmann

$$\frac{n_i}{n_k} = \frac{g_i}{g_k} \exp\left(-\frac{E_i - E_k}{k_B T}\right) = \frac{g_i}{g_k} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_{ik}}{k_B T}\right)$$

Koeff. nach Einstein:

$$\frac{B_{ik}}{B_{ki}} = \frac{g_i}{g_k}$$

$$\frac{A_{ik}}{B_{ik}} = \frac{\hbar\omega_{ik}^3}{c^3\pi^2}$$

Energiedichte nach Planck:

$$u(\omega) = \frac{\hbar}{c^3\pi^2} \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$

der Ausdruck $\hbar\omega^3/c^3\pi^2$ gibt gerade die mittlere Zahl der Moden

Moden sind Anzahl der stehenden Wellen im Volumen

bei hohen Temp.

$$u(\omega) \gg \frac{\hbar\omega^3}{c^3\pi^2}$$

$$u(\omega) = (\hbar\omega^3/c^3\pi^2) \langle n \rangle$$

$\langle n \rangle$ Anzahl Photonen/Mode groß



Anzahl der Photonen als Fkt. der Temp. und Energie

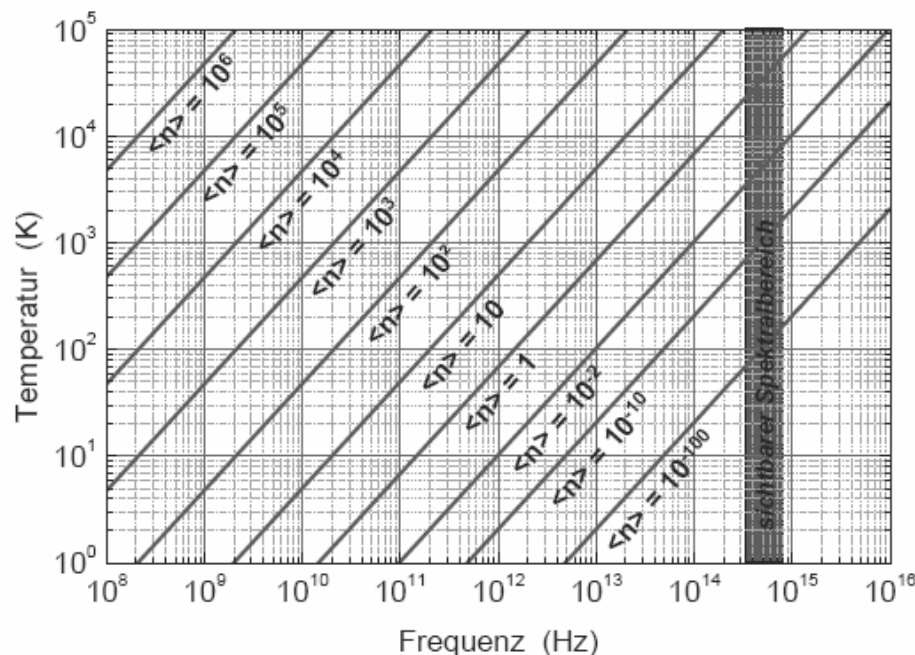


Abbildung 6.2: Mittlere Photonenzahl $\langle n \rangle$ pro Mode des Strahlungsfeldes im thermischen Gleichgewicht als Funktion der Temperatur und der Frequenz. Der sichtbare Spektralbereich ist farbig hinterlegt.



Lebensdauer angeregter Niveaus

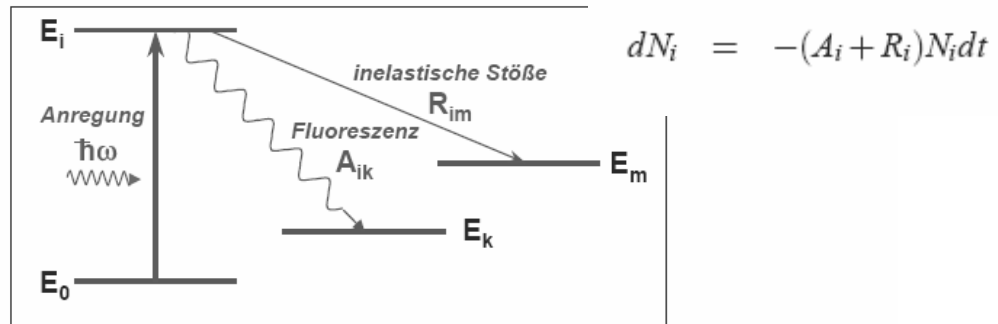


Abbildung 6.3: Entvölkerung des angeregten Zustands E_i durch spontane Emission und durch inelastische Stöße.

$$N_i(t) = N_i(0) \exp[-(A_i + R_i)t] \quad \tau_i^{\text{eff}} = \frac{1}{A_i + R_i}$$

$$A_i = \sum_{n_k < n_i} \sum_{l_k=0}^{n_k-1} \sum_{m_k=-l_k}^{+l_k} A_i^{n_k, l_k, m_k}$$

= Summe der Einsteinkoeff. (summiert über alle Q des Niveaus)



Lebensdauer und Linienbreite

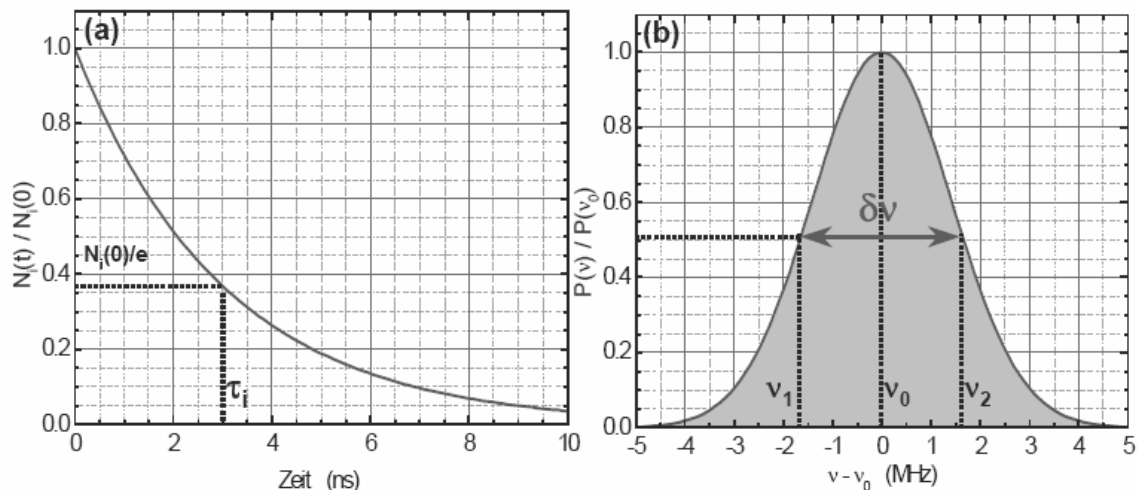


Abbildung 6.4: (a) Zeitliche Änderung der Besetzungszahl $N_i(t)$ eines angeregten Zustands bei zeitlich konstanter Zerfallswahrscheinlichkeit. (b) Linienprofil einer Spektrallinie.

Natürliche Linienbreite aus Unschärferelation: $\Delta E = \hbar/\tau$

Linienverbreiterung durch Dopplereffekt und Stoßverbreiterung bei mehreren Atomen



Linienform

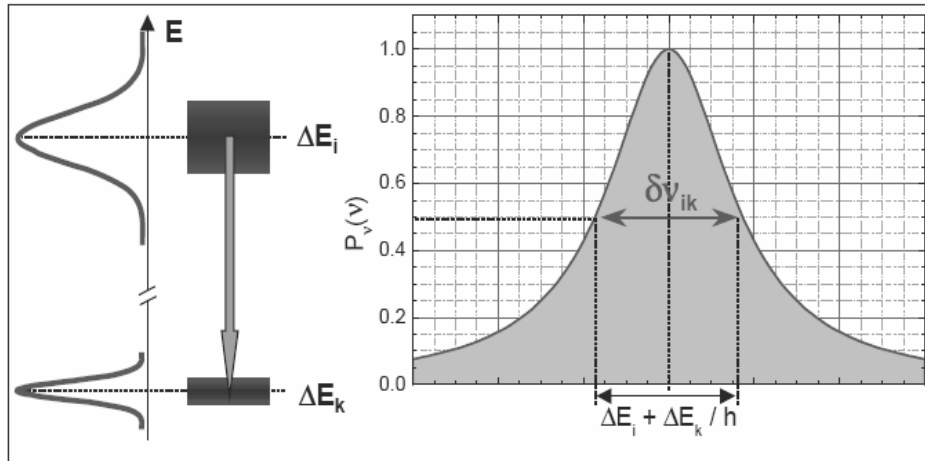


Abbildung 6.5: Schematische Darstellung der natürlichen Linienbreite als Folge der Energieunschärfe der am Übergang beteiligten Niveaus.

Natürliche Linienbreite ergibt Lorentzkurve:

$$P_{\omega}(\omega) = P_0 \frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$$



Dopplerverbreiterung durch thermische Bewegung der Atome

Molekülgeschwindigkeiten in Gas Gauss-verteilt:

$$n_i(v_x)dv_x = C \exp\left(\frac{-mv_x^2}{2k_B T}\right) dv_x$$

Daraus ergibt sich eine Dopplerverbreiterung:

$$\delta\omega_{\text{Doppler}} = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{8k_B T \ln 2}{m}}$$

Die Bewegung der Atome führt zu einer Dopplerverbreiterung der Spektrallinien, die linear mit der Frequenz und proportional zu $\sqrt{T}$ ansteigt, mit zunehmender Masse der Atome aber proportional zu $1/\sqrt{m}$ abnimmt. Typischerweise ist die Dopplerverbreiterung im sichtbaren Spektralbereich bei Raumtemperatur um etwa 2 Größenordnungen größer als die natürliche Linienbreite.

Hohe spektrale Auflösung nur bei tiefen Temp.



Stoßbreiterung

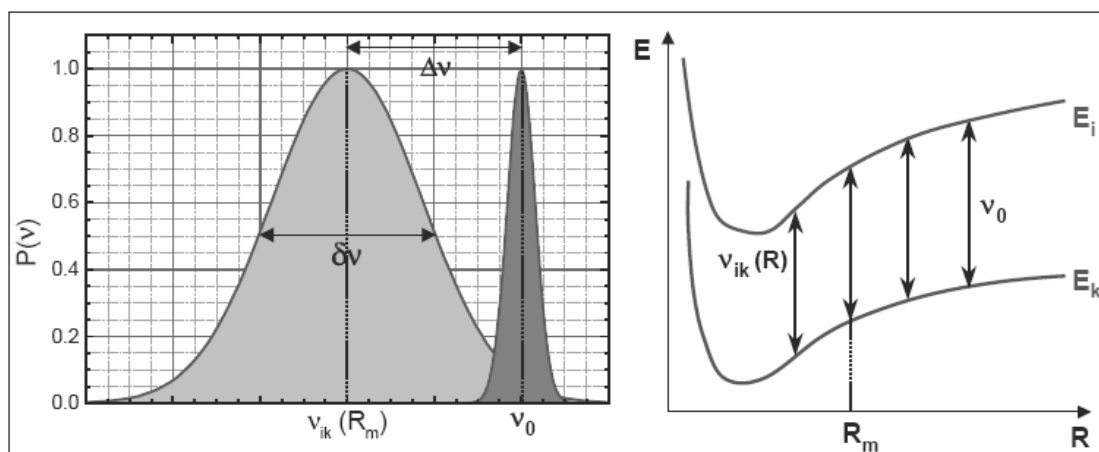


Abbildung 6.7: Zur Veranschaulichung der Stoßverbreiterung und Verschiebung von Spektrallinien durch elastische Stöße. Gezeigt sind die Potenzialkurven der Stoßpartner sowie die Linienform ohne Stöße und die um $\Delta\nu$ verschobene, verbreiterte Linie.

Hohe spektrale Auflösung nur bei geringen Druck

Rm mittlere Abstand $\propto 1/P$

**Bei Stoß verringert sich R und daher
potentielle Energie $\rightarrow$ Energieverschiebung**



Rydberg-Atome

Angeregte Atome mit Leuchtelektron bei sehr großen Hauptquantenzahl n . Sieht Zeff $Z - 1$, d.h. Wasserstoff-ähnlich. Jedoch sehr stabil, weil Energie zu benachbarten Niveaus sehr klein und spontane Emission $\propto \Delta E^3$. Ionisationsenergie sehr gering, jedoch im Weltall keine Abregung durch Stöße und Lebensdauer in ms Bereich. Strahlung im Mikrowellenbereich. Tatsächlich im Universum beobachtet.

Hüllendurchmesser für $n = 100$ bereits $\sim 10^4 a_B \simeq 0.5 \mu\text{m}$

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = E_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) = E_H \frac{(n+1)^2 - n^2}{(n+1)^2 n^2} \propto \frac{1}{n^3}$$

zwischen benachbarten Energieniveaus nimmt grob proportional zu $1/n^3$ ab und besitzt bereits für $n = 50$ Werte im Bereich von $100 \mu\text{eV}$, also weit unterhalb der thermischen Energie bei 300 K (25 meV). Da



Rydberg-Atome

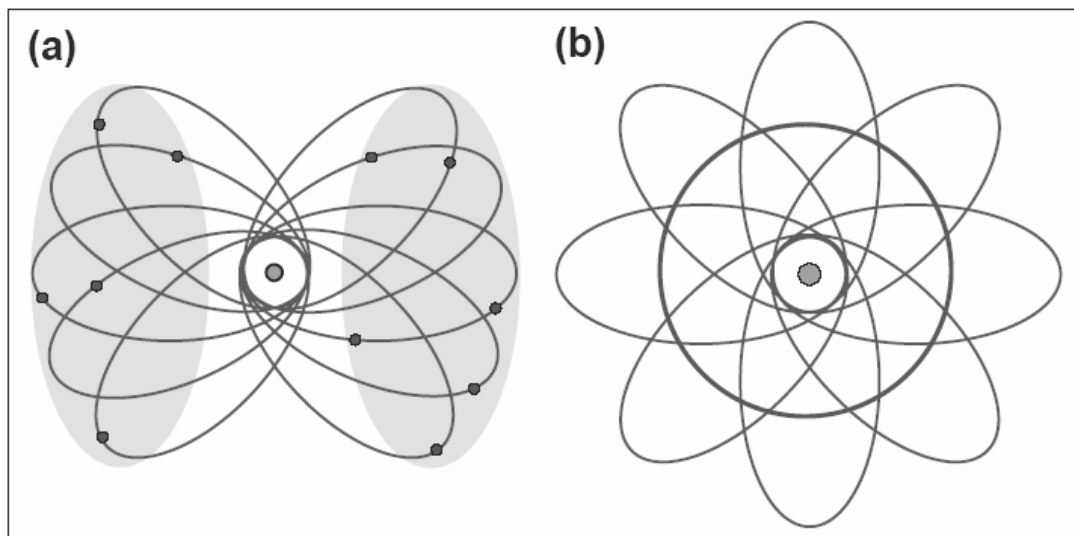


Abbildung 5.1: (a) Beschreibung eines Rydberg-Orbitals (gelb) durch ein Ensemble von Teilchen, das sich nach den Gesetzen der klassischen Mechanik auf Ellipsenbahnen bewegt. Die klassischen Teilchen halten sich hauptsächlich im äußeren Bereich auf, da die Geschwindigkeit in Kernnähe zunimmt. (b) Klassische Veranschaulichung von sphärischen $l = m = n - 1$ (blauer Kreis) und stark elliptischen $l \ll n$ Rydberg-Zuständen.



Myonische Atome

Da das Myon 206.76-mal schwerer als das Elektron ist, ergibt sich ein um diesen Faktor kleinerer Bohrscher Radius

$$a_\mu = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_\mu e^2} = a_B \frac{m_e}{m_\mu} = 256 \text{ fm} = 0.00256 \text{ \AA} . \quad (5.4.1)$$

Wir wollen uns daran erinnern, dass die intrinsische Längenskala der Wellenfunktionen a_μ/Z ist. Für einen schweren Kern wie Quecksilber $^{200}_{80}\text{Hg}$ erhalten wir damit differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, die ihr Maximum bei einigen wenigen Femtometern aufweisen. Dieser Sachverhalt ist in Abb. 5.2 explizit für den 1s-Grundzustand des Quecksilbers gezeigt. Der Kernradius beträgt in guter Näherung



Myonische Atome

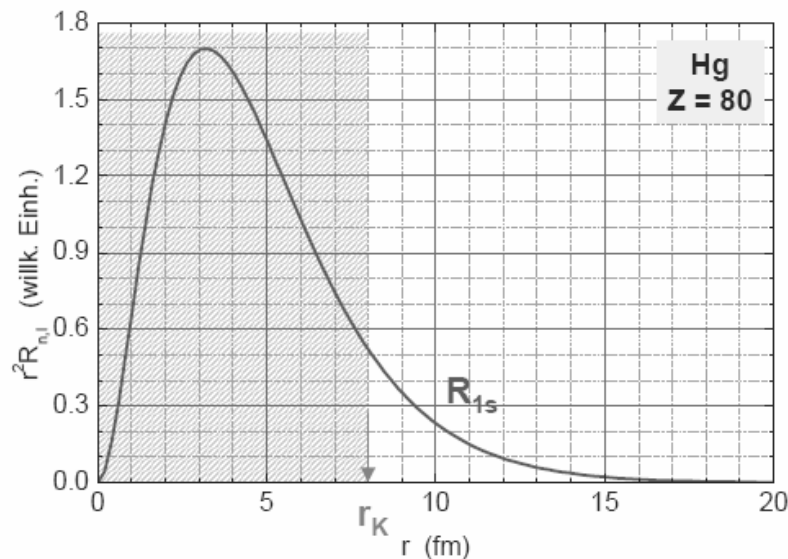


Abbildung 5.2: Differentielle radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Myon im $1s$ -Zustand. Beim Kern handelt es sich um Quecksilber. Der Radius wurde mit der Formel $r_K = 1.4 \cdot A^{1/3}$ mit $A = 200$ abgeschätzt und ist schraffiert dargestellt. Man erkennt, dass sich das Myon zu einem beträchtlichen Anteil im Kern befindet und deshalb dessen Struktur fühlt.



Myonische Atome

Hierbei ist r_0 der Nukleonradius und A die Massenzahl des Kerns, d.h. die Zahl der Nukleonen im Kern. Für Quecksilber ($A = 200$) führt diese Näherungsformel auf $r_{\text{Hg}} \simeq 8 \text{ fm}$. Wir erkennen, dass sich die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Myons zu einem merklichen Teil innerhalb des Kerns befindet. Dies hat zwei Konsequenzen:

- Die Wellenfunktionen des Myons decken praktisch keine Bereiche ab, in denen Elektronen anzu-treffen sind. Dies rechtfertigt nachträglich unsere Vorgehensweise, die Elektronen völlig zu vernachlässigen, da die Elektronen weit vom Myonenort entfernt sind.⁸
- Die einfache Annahme, dass der Kern für die Bewegung des Myons ein punktförmiges Gebilde darstellt, ist nicht länger gerechtfertigt. Das Myon fühlt die Struktur des Kerns und kann daher als Sonde zu dessen Erforschung herangezogen werden.⁹ Untersucht man z.B. der $2p \rightarrow 1s$ Übergang von myonischem Nd, so erkennt man für verschiedene Isotope des Nd eine Verschiebung der Spektrallinien, die durch eine unterschiedliche Größe und Masse der Isotope verursacht wird. Man nennt diese Verschiebung *Isotopie-Verschiebung* (genauer, der Kernvolumeneffekt der Isotopieverschiebung).



Antiwasserstoff

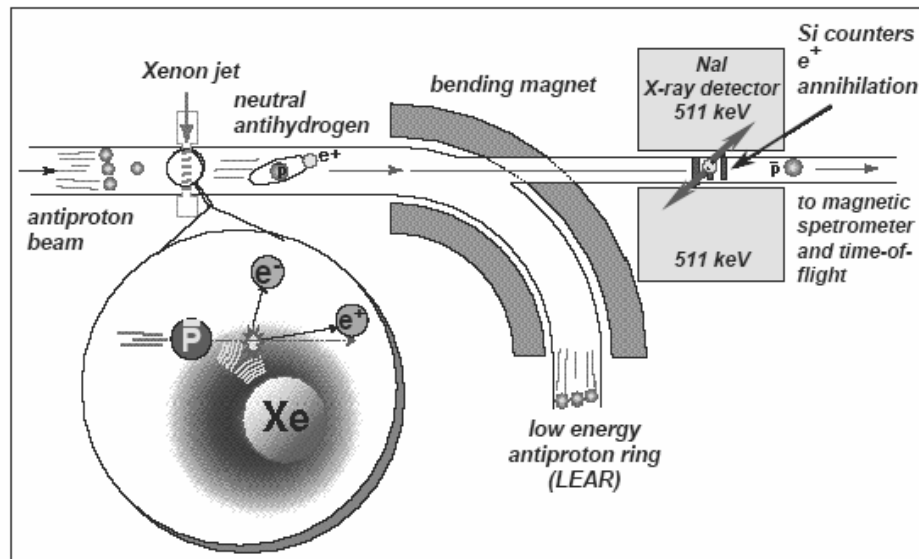


Abbildung 5.4: Prinzip des CERN Anti-Wasserstoff-Experiments. Ein Strahl von Anti-Protonen $\bar{p}$ trifft auf ein Xenon Target. Durch die Wechselwirkung mit den Kernfeldern, entstehen Positron-Elektron-Paare. Das Positron e^+ wird in einigen wenigen Fällen vom Anti-Proton eingefangen und bildet mit ihm ein Anti-Wasserstoffatom. Dies ist nur dann möglich, falls das Positron eine Energie besitzt, die kleiner als die Ionisierungsenergie ist. 1996 wurden während einer Dauer von 15 Stunden 8 Wasserstoffatome beobachtet.

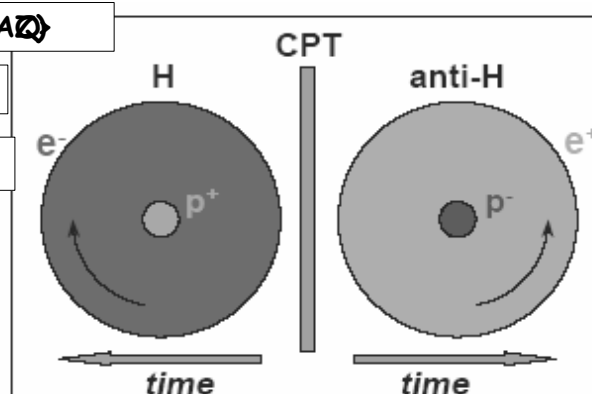


CPT Invarianz

$$C|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = |\Psi(\mathbf{r}, t, A)\rangle$$

$$P|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$$

$$T|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \pm |\Psi(\mathbf{r}, -t)\rangle$$



C-Operator ändert Teilchen in Antiteilchen

P-Operator spiegelt Ortskoordinaten gegenüber Ursprung

T-Operator ändert Zeitrichtung

Abbildung 5.5: Schematische Darstellung der CPT-Invarianz. Ein physikalisches System, bei dem Ladung, Zeit und Raum invertiert werden, sollte sich vom Ausgangszustand nicht unterscheiden. Der aus dem Wasserstoff hervorgehende Anti-Wasserstoff ist ein solches System.

Beobachtung: Spiegelinvarianz P verletzt, CP verletzt, Daher Zeitumkehr verletzt? Denn CPT sollte nach dem CPT Theorem streng erhalten sein. CPT Verletzung macht sich bemerkbar, wenn anti-H sich unterscheidet von H, z.B. in der Masse oder im Spektrum. In den bisherigen Experimenten konnte kein Unterschied zwischen Wasserstoff und Anti-Wasserstoff festgestellt werden.



Positronium

Mit Positronium (übliche Abkürzung: P^s) bezeichnet man ein gebundenes System eines Positrons (Anti-Elektrons) und eines Elektrons. Das Positronium hat eine Lebensdauer von etwa einer Nanosekunde. Es unterscheidet sich vom Wasserstoffatom in zwei wesentlichen Punkten:

- Da beide Teilchen dieselbe Masse aufweisen, halbiert der Schwerpunkt die Verbindungsgerade. Das heißt, beide Teilchen bewegen sich um den zwischen ihnen liegenden Schwerpunkt. Die reduzierte Masse

$$\mu_{P^s} = \frac{1}{2} m_e .$$

führt dazu, dass der Bohrsche Radius des Positroniums zweimal so groß ist wie beim Wasserstoff. Für den Grundzustand gilt:

$$r_{1s}^{P^s} = 2a_B .$$

Die Ionisierungsenergie

$$I_{P^s} = E_H/2 \simeq 6.8 \text{ eV} .$$

ist gegenüber dem Wasserstoffatom halbiert.

- Positron und Elektron besitzen das dem Betrag nach gleiche magnetische Moment, während beim Wasserstoffatom das Kernmoment etwa 650 mal kleiner ist als das des Hüllenelektrons. Dies hat zur Folge, dass die Hyperfeinstrukturkonstante entsprechend größer ist. Im Positronium werden dadurch Fein- und Hyperfeinaufspaltung etwa gleich groß.



Positronium Zerfall

In Umkehrung zum Paarerzeugungsprozess zerstrahlt das Positron mit einem Elektron in elektromagnetische Energie. Dabei muss die Impuls- und Drehimpulserhaltung berücksichtigt werden. Sind Impuls und Drehimpuls in Ausgangszustand Null, so entstehen, da das Photon einen Impuls $p = h\kappa$ besitzt, immer zwei Photonen mit entgegengesetzter Ausbreitungs- und Spin richtung. Jedes Photon besitzt die Ruheenergie eines der Teilchen: $E = mc^2 = 511 \text{ keV}$. Zur Zerstrahlung kommt es dadurch, dass sich die Wellenfunktionen von Positron und Elektron im $1s$ -Zustand etwas überlappen. Die mittlere Lebensdauer hängt davon ab, ob ein Singulett- oder ein Triplett-Zustand vorliegt. Im Singulett-Zustand ($s = 0$) führt die Impuls- und Drehimpulserhaltung zur Emission von zwei γ -Quanten mit entgegengesetztem Impuls und Drehimpuls. Die Lebensdauer beträgt hier $\tau = 125 \text{ ps}$. Im Triplett-Zustand ($s = 1$) müsste zur Drehimpulserhaltung eigentlich nur ein Quant entstehen. Damit lässt sich aber die Impulserhaltung nicht erfüllen. Daher muss das Triplett-Positronium in einem 3- γ -Prozess zerstrahlen. Dies ist ein Prozess höherer Ordnung und entsprechend weniger wahrscheinlich. Die Lebensdauer beträgt hier tatsächlich $\tau = 142 \text{ ns}$.



Quarkonium

In der modernen Theorie der Elementarteilchen, der Quantenchromodynamik (QCD), werden gebundene Systeme aus einem schweren Quark und Anti-Quark als Quarkonium bezeichnet. Am wichtigsten ist Charmonium, das aus dem Charm-Quark und seinem Anti-Teilchen besteht ($c\bar{c}$). Obwohl die Bindung hier über eine völlig andere Wechselwirkung erfolgt (starke Kraft statt Coulomb-Kraft) ist in den niedrigen Anregungszuständen eine starke Ähnlichkeit zum Positronium (Lepton-Anti-Lepton-Paar) vorhanden. Das sich aus dem Zerfall eines angeregten Charmoniums ergebende Termschema besitzt deutliche Ähnlichkeit zum Termschema atomarer Systeme.



Exzitonen

Unter Exzitonen versteht man gebundene Elektron-Loch-Paare in Festkörpern. Löst man z.B. aus einer geschlossenen Schale ein Elektron heraus, so verhält sich das zurückbleibende Loch in guter Näherung wie ein Positron. Insbesondere ähnelt das Spektrum des Teilchen-Loch-Systems dem des Wasserstoffs.

In Halbleitern kann der Übergang eines Elektrons vom Valenz- ins Leitungsband als Erzeugung eines Teilchen-Loch-Paares verstanden werden. Sind Teilchen und Loch nicht zu eng benachbart, bildet das Paar ein wasserstoffähnliches Gebilde, welches dann als Exziton bezeichnet wird. Da die Energiezustände des Exzitons in die Bandlücke fallen, beeinflussen sie die physikalischen Eigenschaften des Halbleiters wesentlich.



Zum Mitnehmen

**Laser high tech für Kommunikation,
Medizin, Technik, Spektroskopie.**

Exotische Atome:

**1) hohe Anregung,
2) statt (e, p, n) andere Kombinationen
von Elementarteilchen**



Vorlesung 21:

Roter Faden:

Auswahlregeln

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch:

<http://www.uni-stuttgart.de/ipf/lehre/online-skript/>



Auswahlregeln für Photonemission

Auswahlregel	Bemerkung
$\Delta l = \pm 1$ für Eielektronenatome	gilt streng
$\Delta(\sum l_i) = \pm 1$ für Mehrelektronenatome bei LS-Kopplung	gerade Zustände kombinieren nur mit ungeraden Zuständen und umgekehrt
$\Delta m = 0, \pm 1$	$\Delta m = 0$: linear polarisiertes Licht $\Delta m = \pm 1$: σ^+ bzw. σ^- zirkular polarisiertes Licht
$\Delta s = 0$	gilt für leichte Atome; bei schweren Atomen gibt es aufgrund der starken Spin-Bahn-Kopplung Ausnahmen: Interkombinationslinien.
$\Delta j = 0, \pm 1$	$j = 0 \rightarrow j = 0$ ist verboten



Photon Emission und Absorption

E.M Welle $\Psi \propto \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ zum Zeitpunkt $t=0$

$\Psi \propto \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \approx 1 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ mit $k \approx 0$ $5/\text{cm}$ für sichtbares Licht und $r \approx 0$ ^{-8}cm , so $kr \approx 10^{-3}$. D.h. e.m. Welle kann als konstantes Feld betrachtet werden.

Potential der Atome: $\Phi(\mathbf{r}) = \sum q_i / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|$ für neutrale Atome auf großm Abstand.

Jedoch bei kleinen Abständen spielt Abstand r_i der Ladungen eine Rolle. Mache Multipolentwicklung:

$e r_i$ = Dipolbeitrag

$e r_i^2$ = Quadrupolbeitrag usw.

Dipol dominant (wenn es kein verbotener Übergang ist) und der Erwartungswert des Dipoloperators gibt Wahrscheinlichkeit für Photon Absorption und Emission.



Dipolmoment eines stabilen Zustandes mit Wellenfkt. Ψ

Erwartungswert des Dipoloperators:

$$-\langle c | e \hat{\mathbf{r}} | c \rangle = -e \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) dV.$$

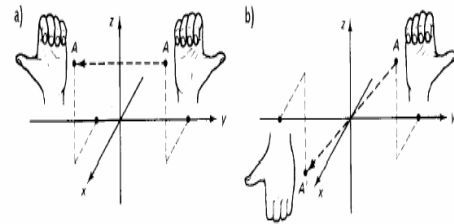
Erwartungswert des Dipoloperators im Spiegel:

$$\begin{aligned} C &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) dV \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(-\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{r}} \Psi(-\mathbf{r}) dV \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \alpha \Psi^*(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{r}} \alpha \Psi(\mathbf{r}) dV \\ &= -\alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) dV \\ &= -C \end{aligned}$$

Der Paritätsoperator $\hat{P}$ erzeugt eine Punktspiegelung der Ortskoordinaten am Ursprung:

$$\hat{P}\psi(\vec{x}, t) := \psi(-\vec{x}, t) \quad (4.1)$$

Man beachte den Unterschied von Spiegelung a) und Parität b)



Parität kann durch Spiegelung und anschließende Drehung ersetzt werden.

Daher $C \neq 0$ d.h. Dipolmoment einer Wellenfkt. mit Parität als guter $Q=0$
Daher keine Strahlung stabiler Atomzustände!



Parität der Wellenfunktion

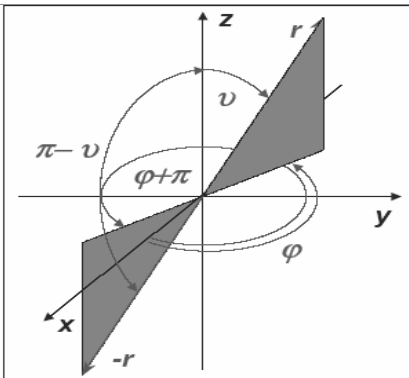


Abbildung 6.9: Veränderung der Polarkoordinaten bei Raumspiegelung.

$$\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

$$Y_l^m(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) \rightarrow (-1)^l Y_l^m(\vartheta, \varphi).$$

Parität der Wellenfkt. der
Einelektronenzustände daher $(-1)^l$

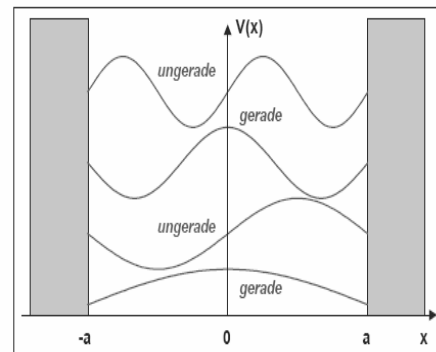


Abbildung 6.8: Eigenfunktionen gerader und ungerader Parität im Fall des eindimensionalen Potentialtopfs unendlicher Tiefe.

Erwartungswert des Dipoloperators
einer Wellenfkt. bedeutet keine
Strahlung, d.h. stationäre Zustände
strahlen nicht.
Jedoch Übergänge von Ψ_1 nach Ψ_2
möglich wenn die Parität sich ändert.
($\alpha_1 = -\alpha_2 \rightarrow C \neq 0$)



Paritätsauswahlregel

Ein Paritätswechsel ist daher nur dann möglich, wenn l_i gerade und l_k ungerade ist bzw. umgekehrt. Das bedeutet, dass sich die Bahndrehimpulsquantenzahl bei einem erlaubten Dipolübergang um eine ungerade Zahl ändern muss. Dieser Sachverhalt wurde von O. Laporte zum ersten Mal festgehalten. Er heißt deshalb auch *Laporte'sches Gesetz*.¹⁶ Da mit dem Übergang eine Veränderung des Bahndrehimpulses von $\hbar\Delta l$ mit $\Delta l = \dots, -5, -3, -1, 1, 3, 5, \dots$ einhergeht und der Drehimpuls eines einzelnen Photon $\pm\hbar$ ist, kann sich der Drehimpuls des Atoms bei Emission oder Absorption eines Photons um höchstens $\pm\hbar$ ändern. Damit erhalten wir die Paritätsauswahlregel:

Es sind nur solche Übergänge erlaubt, bei denen die Drehimpulsquantenzahl l die Auswahlregel

$$\Delta l = l_i - l_k = \pm 1 \quad (6.4.22)$$

erfüllt.



Andere Herleitung der Paritätsauswahlregel

Annahme: Parität ist gute $\mathbb{Z}_2$ (erwartet, da Paritätsoperator mit H kommutiert.)
Dies stimmt tatsächlich für elektromagn. Wechselwirkung, aber gilt nicht allgemein, z.B. nicht für schwache WW wie Zerfall radioaktiver Kerne oder Zerfall der Myonen.

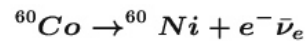
Wenn Parität erhalten, dann muss Parität_{vor} und nach Abstrahlung identisch sein, d.h. $P_{\text{vor}} = P_{\text{nach}} P_\gamma$
(multiplikative $\mathbb{Z}_2$)
Photon hat Parität -1 ($\vec{E}$ -Feld = Vektor, ändert Vorzeichen unter Spiegelung)

Daher muss Atom nach Abstrahlung Parität ändern.
Drehimpulserhaltung besagt dass $\Delta l \leq 1$, denn Bahndrehimpuls bei Dipolstrahlung und Spin des Photons max. $1\hbar$. (Bei höheren Multipolen auch Bahndrehimpuls!)

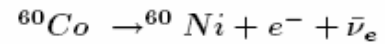
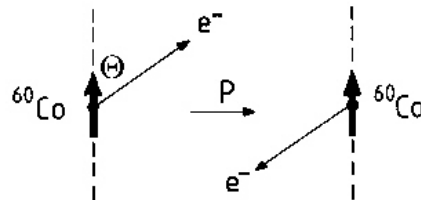


Frau Wu's Experiment

$\mathcal{P}$ -Verletzung der schwachen Wechselwirkung wurde 1957 von Wu et al. erstmals in der Reaktion:

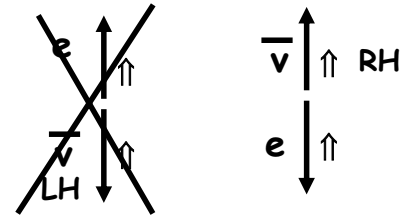


nachgewiesen.



$$j = 5 \quad j = 4 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

$$\vec{p} = 0 \quad \vec{p} = 0 + \vec{p}_e - \vec{p}_{\bar{\nu}_e}$$

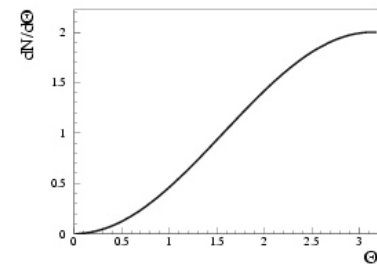


Die Winkel-Verteilung der Elektronen hat die Form:

$$I(\Theta) = 1 - \frac{v_e}{c} \cos \Theta$$

d.h. die Elektronen werden bevorzugt entgegengesetzt zur Spin-Richtung des ^{60}Co emittiert.

Diese "forward-backward asymmetry" verletzt die Paritäts-Erhaltung.



Extravaganzen der schwachen Wechselwirkung



Neutrinos sind Vampire,
d.h. sie haben kein Spiegelbild!
Oder anders gesagt:
Sie kommen nur linkshändig vor,
d.h. Spin antiparallel zur Flugrichtung.
Bei Spiegelung werden sie rechtshändig.

Antineutrinos sind immer rechtshändig.
Dies gilt nur für masselose Teilchen.
Bei massiven Teilchen kann man die
bei einem Lorenztrafo überholen und
dann ändern sie ihre Helizität oder
Händigkeit.



Auswahlregel für magnetische Q

Nachdem wir unter Benutzung der Paritätseigenschaften die Auswahlregel für den Bahndrehimpuls l abgeleitet haben, wollen wir uns jetzt den Auswahlregeln für die magnetische Quantenzahl m zuwenden. Dazu ist es sinnvoll, die der Kugelsymmetrie angepassten Matrixelemente

$$M_z = e \langle i | \hat{z} | k \rangle \quad (6.4.23)$$

$$M_+ = (M_x + iM_y) = e (\langle i | \hat{x} | k \rangle + i \langle i | \hat{y} | k \rangle) \quad (6.4.24)$$

$$M_- = (M_x - iM_y) = e (\langle i | \hat{x} | k \rangle - i \langle i | \hat{y} | k \rangle) \quad (6.4.25)$$

zu betrachten. Die Abhängigkeit der Eigenfunktionen des Hamilton-Operators vom Winkel φ ist für ein kugelsymmetrisches Potenzial gegeben durch¹⁸

$$\begin{aligned} \Psi(\varphi) &= e^{im\varphi} \longrightarrow M_z \propto \int_0^{2\pi} e^{i(m_k - m_l)\varphi} d\varphi \\ x &= r \sin \vartheta \cos \varphi \quad M_+ \propto \int_0^{2\pi} e^{i(m_k - m_l)\varphi} (\cos \varphi + i \sin \varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} e^{i(m_k - m_l + 1)\varphi} d\varphi \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi \quad M_- \propto \int_0^{2\pi} e^{i(m_k - m_l)\varphi} (\cos \varphi - i \sin \varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} e^{i(m_k - m_l - 1)\varphi} d\varphi \\ z &= r \cos \vartheta \end{aligned}$$

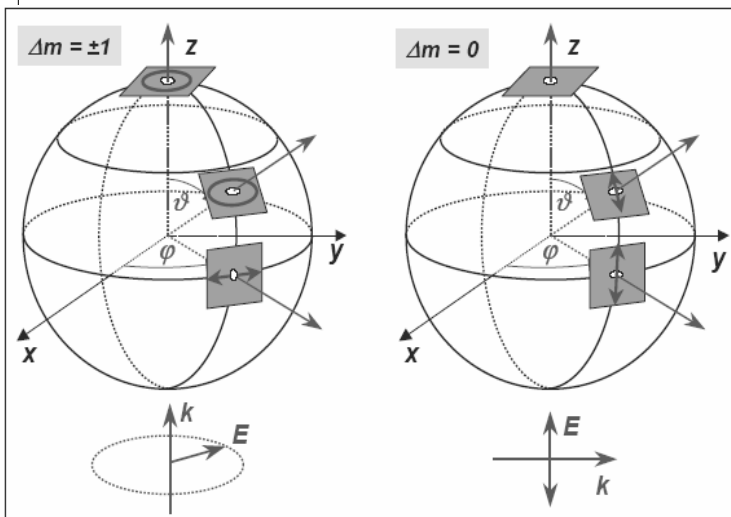


Polarisation des emittierten Lichts

$$M_z = 0 \quad \text{außer für } m_i = m_k \text{ d.h. } \Delta m = 0$$

$$M_+ = 0 \quad \text{außer für } m_i = m_k + 1 \text{ d.h. } \Delta m = +1$$

$$M_- = 0 \quad \text{außer für } m_i = m_k - 1 \text{ d.h. } \Delta m = -1$$



Im Falle von $\Delta m = \pm 1$ (links) erhalten wir eine Strahlungscharakteristik, wie sie von in der (x, y) -Ebene rotierenden Dipolen erzeugt wird. Entlang der z -Achse (longitudinale Beobachtungsrichtung) führt dies zu links bzw. rechtszirkular polarisiertem Licht. In transversaler Beobachtungsrichtung, d.h. in der (x, y) -Ebene, erhalten wir linear polarisiertes Licht.

Für $\Delta m = 0$ (rechts) haben wir es mit der Strahlungscharakteristik eines schwingenden Dipols parallel zur z -Achse zu tun. Das Licht ist linear entlang z polarisiert. Bei longitudinaler Beobachtung erfolgt keine Abstrahlung.

$\Delta m = \pm 1$ zirkular polarisiertes Licht
 $\Delta m = 0$ linear polarisiertes Licht



Winkelabhängigkeit des abgestrahlten Lichts

$\Delta m \pm 1$

$\Delta m \Theta$

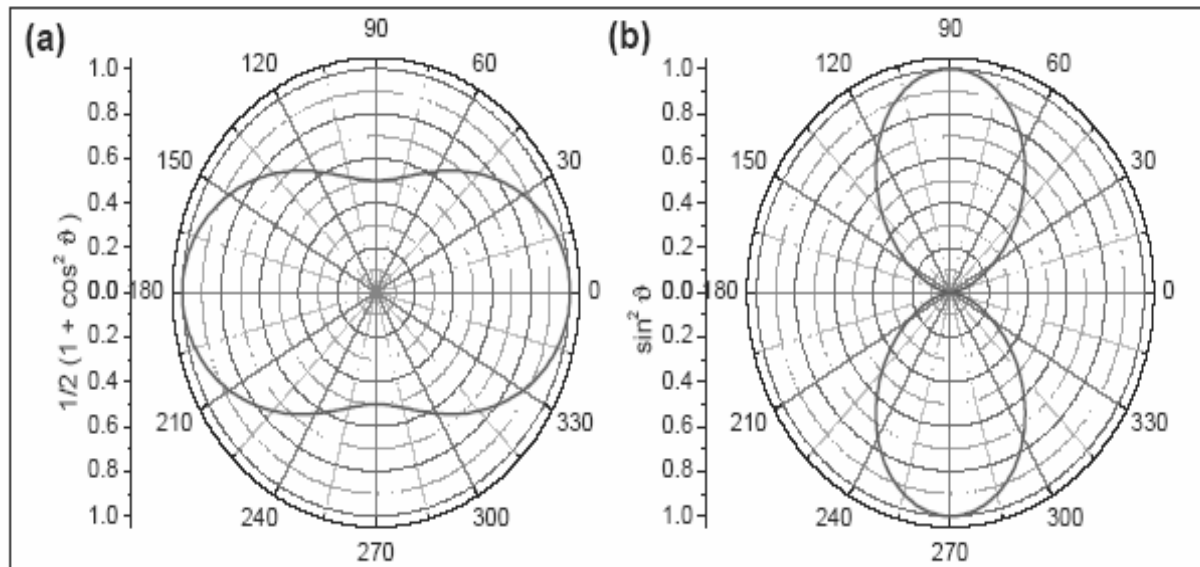


Abbildung 6.11: Intensität des abgestrahlten Lichts als Funktion des Winkels ϑ , den die Beobachtungsrichtung mit der Richtung des Magnetfelds einschließt. (a) Für senkrecht zur Feldrichtung rotierende Dipole und (b) für einen entlang der Feldrichtung oszillierenden Dipol.

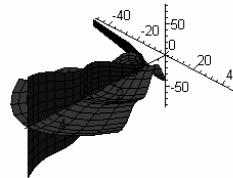
Juni 28, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Dipol strahlt senkrecht zur Achse



E-Feld

B-Feld

Juni 28, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

13



Polarisation beim Zeeman-Effekt

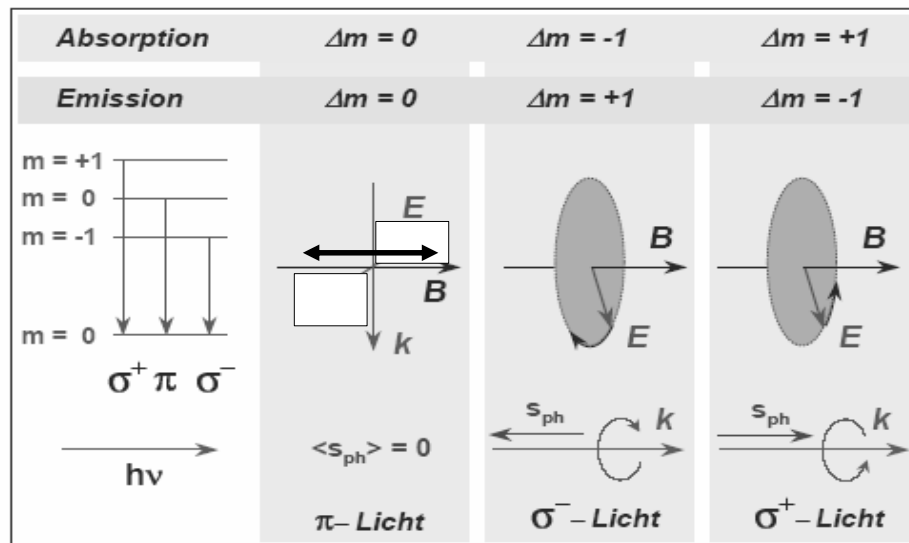


Abbildung 6.12: Emission und Absorption beim normalen Zeeman-Effekt. Links sind die möglichen Übergänge gezeigt, rechts sind die entsprechenden klassischen Dipole mit der Art des emittierten Lichts abgebildet. s_{ph} und k bezeichnen den Spin und Ausbreitungsvektor des Photons. Bei Beobachtung parallel zur Magnetfeldrichtung kann man nur σ^+ und σ^- Licht beobachten. Bei Beobachtung senkrecht zur Magnetfeldrichtung beobachtet man drei linear polarisierte Komponenten, wobei sich für $\Delta m = \pm 1$ das linear polarisierte Licht aus einer Überlagerung von σ^+ und σ^- Licht ergibt.



Auswahlregel für den Spin- $\mathcal{Q}$ bei einem Elektron

Bisher haben wir den Elektronenspin außer Acht gelassen. Bei Atomen mit nur einem Elektron in einer nicht gefüllten Schale (z.B. Wasserstoffatom oder Alkalimetalle) ist der Betrag des Spins immer $|s| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3/4}\hbar$ und deshalb kann sich auch bei optischen Übergängen dieser Betrag nicht ändern. Wir erhalten deshalb für die Spinquantenzahl die Auswahlregel

Für Übergänge $E_i \rightarrow E_k$ erhalten wir folgende Auswahlregel für die Spinquantenzahl s :

$$\Delta s = s_i - s_k = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0. \quad (6.4.40)$$

Das gleiche Ergebnis erhält man, wenn man zugrunde legt, dass das Übergangsmatrixelement keinen Spin-Operator enthält. Es ist deshalb null, es sei denn der Spinanfangs- und Spinendzustand sind identisch. Dies folgt unmittelbar aus der Orthogonalität der Spin-Funktionen. Optische Übergänge können den Spin also nicht flippen.



Auswahlregel für den Spin- $\mathcal{Q}$ bei mehr Elektronen

Bei Atomen mit zwei Elektronen (z.B. Helium-Atom) hängen die Wellenfunktionen von den Koordinaten $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ der beiden Elektronen ab. Das Dipolmatrixelement kann damit als

$$M_{ik} = e \int \Psi_i^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \Psi_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) dV_1 dV_2 \quad (6.4.41)$$

definiert werden, wobei jetzt über die 6 Koordinaten der beiden Elektronen integriert werden muss. Weil die beiden Elektronen ununterscheidbar sind, darf sich das Dipolmatrixelement nicht ändern, wenn wir die Koordinaten der beiden Elektronen vertauschen. Bei einem Singulettzustand ist der Ortsanteil $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ der Wellenfunktion symmetrisch gegen Elektronenvertauschung, bei einem Triplettzustand antisymmetrisch (siehe Kapitel 7). Das Matrixelement ist deshalb nur dann unabhängig von einer Vertauschung der Koordinaten, wenn Anfangs- und Endzustand entweder beide symmetrische oder beide antisymmetrische Ortsfunktionen besitzen. Übergänge zwischen Singulett- und Triplettzustand sind also verboten, d.h. wir erhalten die Auswahlregel $\Delta s = 0$.¹⁹



Auswahlregel für den Spin- $\mathcal{Q}$ bei mehr Elektronen

Obwohl sich der Betrag des Gesamtspins bei einem erlaubten Dipolübergang nicht ändert, so kann sich seine Richtung relativ zum Bahndrehimpuls ändern. Für die Quantenzahl j des Gesamtdrehimpulses $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ erhält man daher die erweiterte Auswahlregel

Für Übergänge $E_i \rightarrow E_k$ mit $\Delta j = j_i - j_k$ erhalten wir folgende Auswahlregeln für die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses j :

$$\Delta j = 0, \pm 1 \quad \text{aber} \quad j = 0 \nrightarrow j = 0. \quad (6.4.42)$$

weil bei $\Delta s = 0$ die notwendige Änderung $\Delta l = \pm 1$ durch eine entgegengesetzte Änderung $\Delta m_s = \mp 1$ kompensiert werden kann (siehe Abb. 6.13).

Es gibt also z.B. einen erlaubten Übergang mit $\Delta j = 0$ vom Zustand $p_{3/2} (l = 1, m_s = +1/2)$ nach $d_{3/2} (l = 2, m_s = -1/2)$.

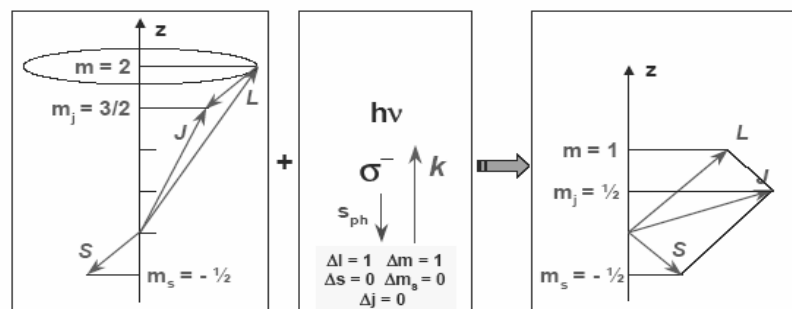


Abbildung 6.13: Bei optischen Übergängen bleibt bei LS-Kopplung die Spinquantenzahl s erhalten. Gezeigt ist ein Übergang, bei dem $\Delta j = 0$.



Zusammenfassung

- Die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand E_i nach E_k ist gegeben durch das Dipolmatrixelement

$$M_{ik} = e \int \Psi_i^* \mathbf{r} \Psi_k dV,$$

das die Wellenfunktionen der beteiligten Atomzustände enthält. M_{ik} stellt den quantenmechanischen Mittelwert des klassischen Dipolmoments $\mathbf{p}_{el} = e \cdot \mathbf{r}$ dar.

- Für elektrische Dipolübergänge gelten folgende Auswahlregeln:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1 \ (j = 0 \nleftrightarrow j = 0), \quad \Delta s = 0.$$

- Neben den elektrischen Dipolübergängen gibt es noch Übergänge höherer Ordnung (z.B. elektrische Quadrupolübergänge, magnetische Dipolübergänge) und Mehrphotonen-Übergänge, deren Wahrscheinlichkeiten allerdings um mehrere Größenordnungen kleiner sind.



Zum Mitnehmen

Auswahlregeln für Absorption und Emission von Photonen bestimmt durch Ladungsverteilung im Atom. Dipolstrahlung ergibt erlaubte Übergänge und Übergangsregeln bestimmt durch Paritäts- und Drehimpulserhaltung



Vorlesung 22:

Roter Faden:

Moleküle

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch:

<http://www.uni-stuttgart.de/ipf/lehre/online-skript/>



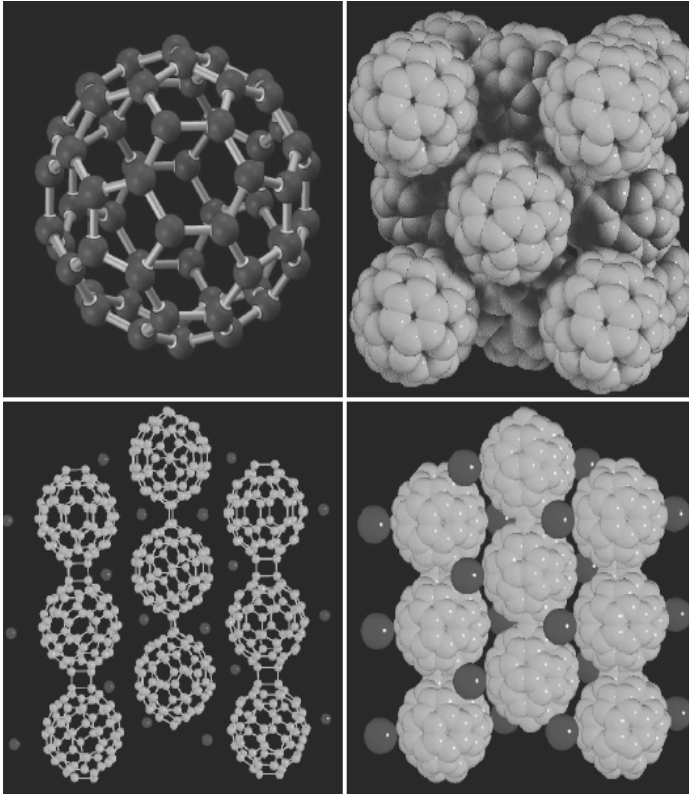
Moleküle

Moleküle sind Atomverbände, wobei zwischen den Atomen genügend starke Bindungskräfte herrschen, damit das Molekül nach außen als abgeschlossene Einheit betrachtet werden kann. Andererseits ist die Bindung der Atome zu einem Molekül schwächer als die Bindungskraft innerhalb eines einzelnen Atoms, so dass die elektronische Struktur der einzelnen Atome weitgehend erhalten bleibt. Die Bindung der Atome zu einem Molekül beeinflusst in der Regel nur die Elektronen in der äußersten Schale der beteiligten Atome, die so genannten *Valenzelektronen*, die für die chemischen Eigenschaften der Atome von zentraler Bedeutung sind. Die Bindung der Atome zu einem Molekül beeinflusst daher maßgebend die chemischen Eigenschaften, so dass wir bei Molekülen hinsichtlich der chemischen Eigenschaften von einer neuen Substanz sprechen können.

- Warum verbinden sich neutrale Atome zu Molekülen?
- Wie sieht die Energieniveaustuktur von Molekülen aus?
- Wie kann man chemische Reaktionen auf einer molekularen Basis verstehen?



Moleküle



Fullerene als typische Vertreter molekularer Festkörper. Das C_{60} Molekül ist im Bild oben links gezeigt. Es ähnelt strukturell einem Fußball. C_{60} Moleküle bilden bei Abkühlung aus der Gasphase kristalline Festkörper. Die Wechselwirkung der C-Atome auf dem Ball sind auf Grund der kovalenten Bindungen um Größenordnungen stärker als die van der Waals Wechselwirkungen der Bälle untereinander. Diese Separation der Energieskalen spiegelt sich in allen physikalischen Eigenschaften von Fullerenen wieder. Unter geeigneten Bedingungen, z.B. Dotierung mit Alkali-Atomen (z.B. Rb) können sich die C_{60} Moleküle kovalent aneinanderketten. Es entstehen Makromoleküle (Polymere) die im Festkörper hochsymmetrisch angeordnet sind. Neben den im unteren Bild gezeigten Ketten beobachtet man auch 2-dimensionale Schichtpolymere.

Juni 30, 2005

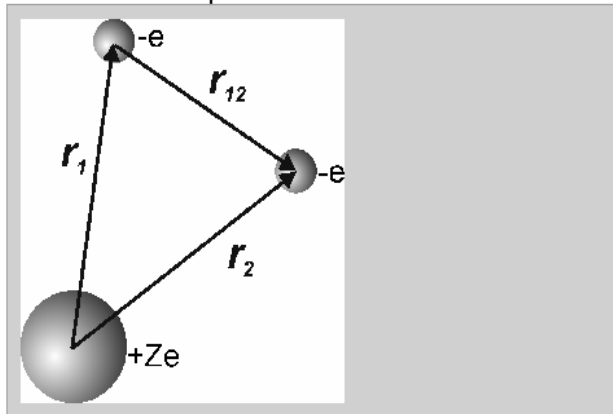
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

3



Helium-Atom

Atomkern mit Ladungszahl Z wird als unendlich schwerer Massenpunkt betrachtet.



Die potentielle Energie aller Elektronen ist:

$$E_{pot} = -\sum_i \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{j>i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

wobei der 2. Term die Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt.

Die Schrödinger-Gleichung des Helium-Atoms

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Delta_1 + \Delta_2) + E_{pot} \right) \psi = E_{ges} \psi$$

mit der potentiellen Energie

$$E_{pot} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Modell unabhängiger Teilchen:

- Vernachlässige Elektron-Elektron-Wechselwirkung
- Lösungen wie im H-Atom

Bindungsenergie, je 1 Elektron in Zuständen a und b :

$$E = E_a + E_b = -R_H hc Z^2 \left(\frac{1}{n_a^2} + \frac{1}{n_b^2} \right)$$

Bei Helium im Grundzustand (beide Elektronen in 1S) ist $E = -2 \times 2^2 \times 13.6 = -2 \times 54.4 = -108.8$ eV.

Tatsächliche Bindungsenergie: -24,6 eV für erstes Elektron, -54.4 eV für das zweite. Die Differenz folgt aus Abschirmung des Kerns durch das erste Elektron.

Juni 30, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

4



Wellenfunktion des Heliumatoms

Bahnanteil der Wellenfunktion

Wahrscheinlichkeit, Elektron 1 bei r_1 und Elektron 2 bei r_2 zu finden, wenn e_1 im Zustand a und e_2 in b ist:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \equiv \psi_a(1)\psi_b(2)$$

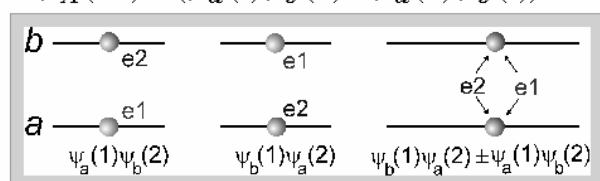
Elektronen sind aber ununterscheidbar, die Wellenfunktion muss symmetrisiert werden.

Symmetrische Wellenfunktion

$$\psi_S(1,2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)) / \sqrt{2}$$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\psi_A(1,2) = (\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)) / \sqrt{2}$$



Die antisymmetrische Wellenfunktion verschwindet für
 ▶ $a = b$ oder $r_1 = r_2$

daher geringere Abstoßung der Elektronen als bei ψ_S und stärker Bindung

Spinanteil der Wellenfunktion

Symmetrische Wellenfunktion

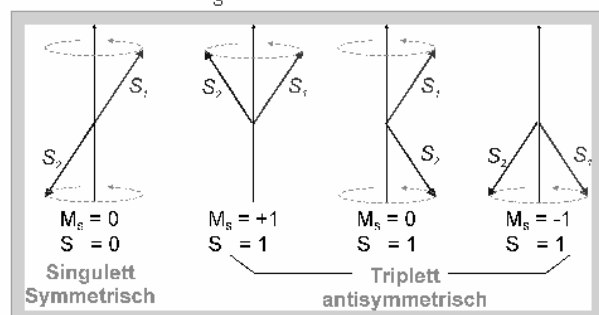
$$\chi_S(1,2)\sqrt{2} = \begin{cases} \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) \\ \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\uparrow}(2)\chi_{\downarrow}(1) \\ \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) \end{cases}$$

Gesamtspin $S = 1$, Projektion $M_S = 1, 0, -1$

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\chi_A(1,2)\sqrt{2} = \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\uparrow}(2)\chi_{\downarrow}(1)$$

mit $S = 0$ und $M_S = 0$



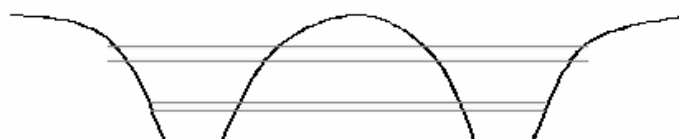
Energieniveaus bei mehreren Atomen -> Bandstruktur

ein Atom



zwei Atome (Molekül):

Aufspaltung symmetrisch / antisymmetrisch
 bonding / antibonding



$$\Psi = \Psi_1 \pm \Psi_2$$

(CAE)near
 Combination of
 Atomic Orbitals)

viele Atome (Festkörper):

unendlich-fache Aufspaltung $\Rightarrow$ Bänder



Tunneln
 erlaubt
 Transport
 von Elektr.



Wasserstoff-Moleklion

Besteht aus H-Atom und einem Proton.

Approximation der Moleklwellenfunktion: LCAO
(Linear Combination of Atomic Orbitals)

Gerade Wellenfunktion

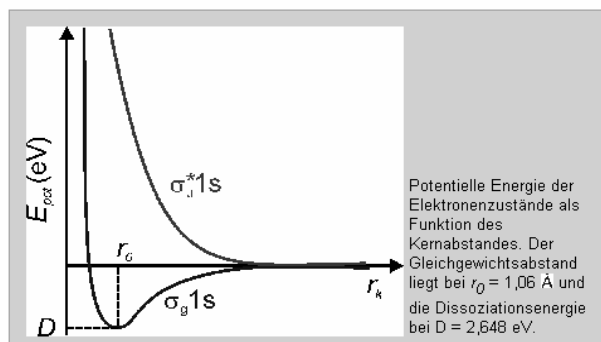
$$\psi_g = C_g (\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})): \sigma_g 1s$$

- Elektronendichte zwischen Kernen
- Bindendes Orbital

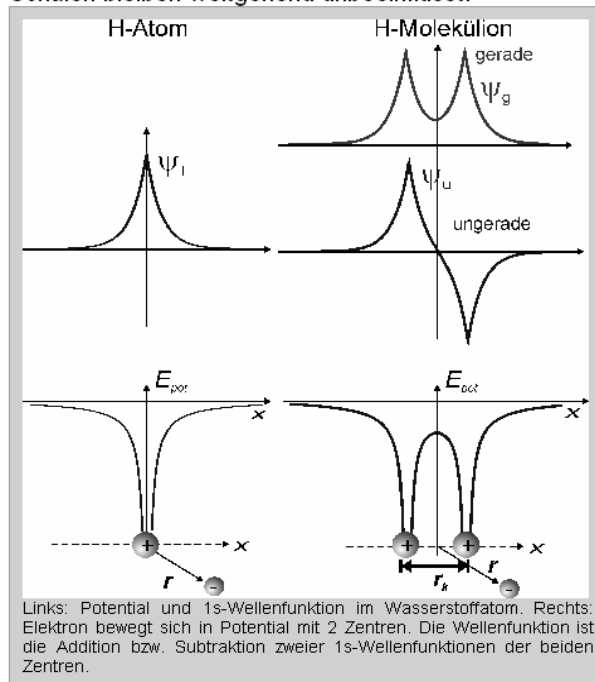
Ungerade Wellenfunktion

$$\psi_u = C_g (\psi_1(\vec{r}) - \psi_2(\vec{r})): \sigma_u^* 1s$$

- Keine Elektronendichte zwischen Kernen
- Nicht bindendes Orbital



Moleküle: Valenzelektronen bilden ein gemeinsames Elektronensystem. Elektronen in abgeschlossenen Schalen bleiben weitgehend unbeeinflusst.



Juni 30, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

7



Wasserstoff-Moleklion

Besteht aus H-Atom und einem Proton.

Approximation der Moleklwellenfunktion: LCAO
(Linear Combination of Atomic Orbitals)

Gerade Wellenfunktion

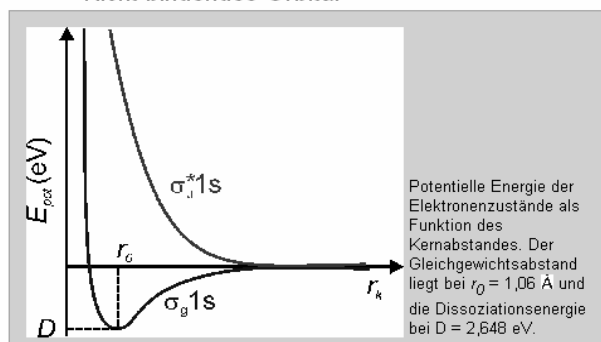
$$\psi_g = C_g (\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})): \sigma_g 1s$$

- Elektronendichte zwischen Kernen
- Bindendes Orbital

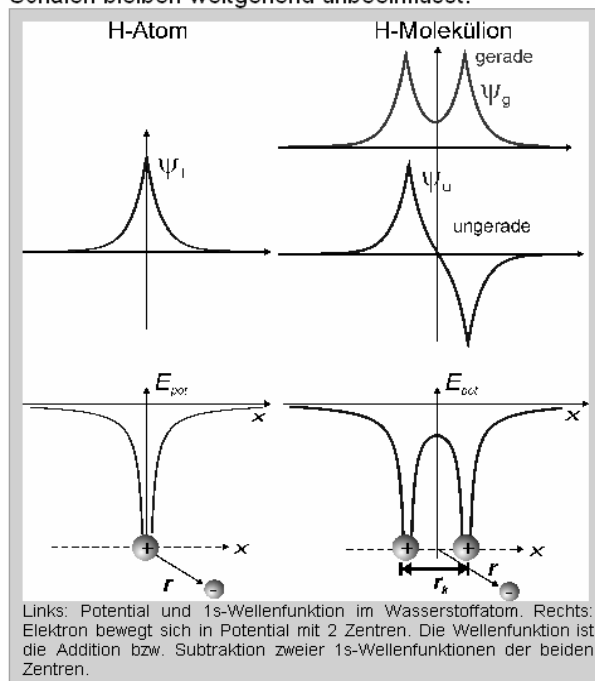
Ungerade Wellenfunktion

$$\psi_u = C_g (\psi_1(\vec{r}) - \psi_2(\vec{r})): \sigma_u^* 1s$$

- Keine Elektronendichte zwischen Kernen
- Nicht bindendes Orbital



Moleküle: Valenzelektronen bilden ein gemeinsames Elektronensystem. Elektronen in abgeschlossenen Schalen bleiben weitgehend unbeeinflusst.



Juni 30, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

8



Bestehen aus Atomen der gleichen Sorte.

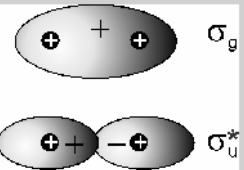
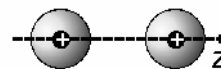
- Wegen axialer Symmetrie ist nur die Projektion L_z des Bahndrehimpulses, nicht der Betrag definiert.
- Es gibt gerade und ungerade Orbitale.
- Notation: $\lambda = |m| = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ ($\sigma, \pi, \delta \dots$)
- Die Ladungsverteilung ist symmetrisch.
- Die Bindung ist kovalent.

Atom	Molekül	Entartung
p	σ_u^*	2
	π_u^*	4
	σ_g	2
	π_g	4
s	σ_u^*	2
	σ_g	2

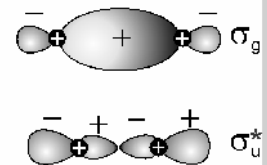
Beispiele für kovalente Bindungen(vgl.):

	D (eV)	r_K (Å)	p (mC)
H ₂	4,5	0,7	0,0
O ₂	5,1	1,2	0,0
CO	11	1,1	0,1

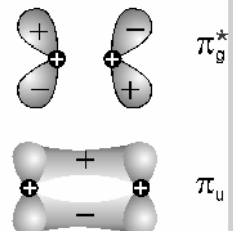
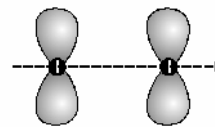
S-Orbitale



P_z-Orbitale



P_x- oder P_y-Orbitale



Links: Atomorbitale, die sich zu den Molekülorbitalen rechts verbinden. Die Vorzeichen deuten positive (+) und negative (-) Amplitude der Wellenfunktion an.

Juni 30, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Homonukleare Moleküle

Bestehen aus Atomen der gleichen Sorte.

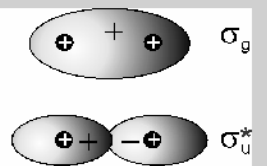
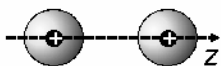
- Wegen axialer Symmetrie ist nur die Projektion L_z des Bahndrehimpulses, nicht der Betrag definiert.
- Es gibt gerade und ungerade Orbitale.
- Notation: $\lambda = |m| = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ ($\sigma, \pi, \delta \dots$)
- Die Ladungsverteilung ist symmetrisch.
- Die Bindung ist kovalent.

Atom	Molekül	Entartung
p	σ_u^*	2
	π_u^*	4
	σ_g	2
	π_g	4
s	σ_u^*	2
	σ_g	2

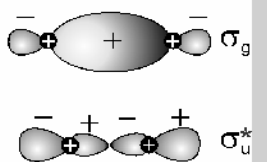
Beispiele für kovalente Bindungen(vgl.):

	D (eV)	r_K (Å)	p (mC)
H ₂	4,5	0,7	0,0
O ₂	5,1	1,2	0,0
CO	11	1,1	0,1

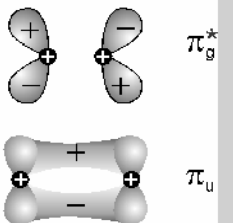
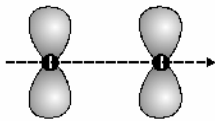
S-Orbitale



P_z-Orbitale



P_x- oder P_y-Orbitale



Links: Atomorbitale, die sich zu den Molekülorbitalen rechts verbinden. Die Vorzeichen deuten positive (+) und negative (-) Amplitude der Wellenfunktion an.

Juni 30, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

10



Homonukleare Moleküle

Das Molekül ist bestimmt durch die Molekülzustände besetzt durch die Valenzelektronen.

Projektion des Gesamtdrehimpulses $\langle L_z \rangle = M\hbar$.

mit

$$M = \sum_{\text{Elektronen}} m_l$$

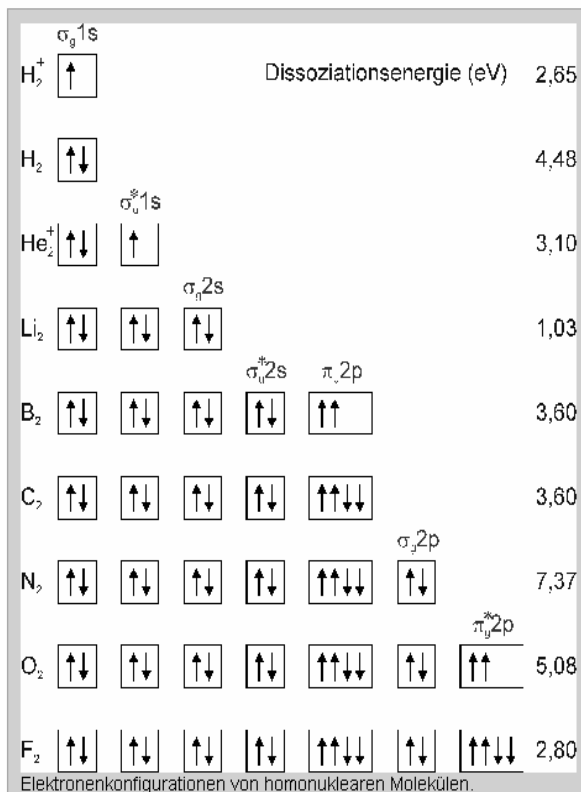
Gesamtmolekülspin: S

Notation

Gesamtmolekülzustand beschrieben durch $^{2S+1}\Lambda$

Zusammenfassend:

- Einzelne Atome: $1s, 2s, 2p \dots$
- Molekülorbitale für einzelne Elektronen: $\sigma_g 1s, \sigma_u 1s, \pi_g 2p \dots$
- Gesamtmolekül: $^1\Sigma, ^3\Sigma, ^1\Pi, ^3\Pi$



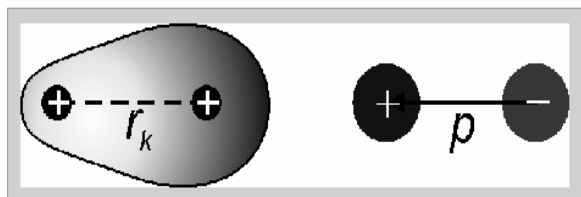
Heteronukleare Moleküle

Bestehen aus ungleichen Atomen

- Keine räumliche Symmetrie.
- Keine gerade und ungerade Wellenfunktionen.
- Auftreten von Ionenbindungen ist möglich.

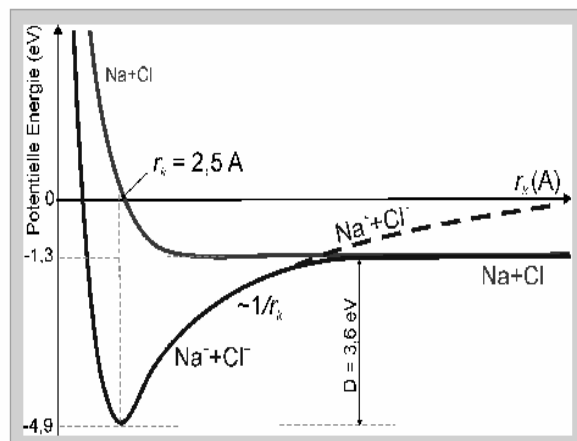
Ionenbindung

- Tritt auf, wenn Elektronenverteilung asymmetrisch zu einem Kern hin verlagert ist.
- Übergang zu zwei Ionen ist leicht möglich.
- Haben elektrisches Dipolmoment p .
- Sind meist Verbindungen zwischen Elementen aus 1. bzw. 2. und 2.- bzw. 3.-letzter Spalte des Periodensystems.



Beispiel: NaCl bestehend aus

- Na mit einem 3s-Elektron
- Cl mit einem 3s-Loch



Beispiele für Ionenbindungen (vgl. [1])

	D (eV)	r_K (Å)	p (mC)
NaCl	3,6	2,5	8,0
HCL	4,4	1,3	1,0



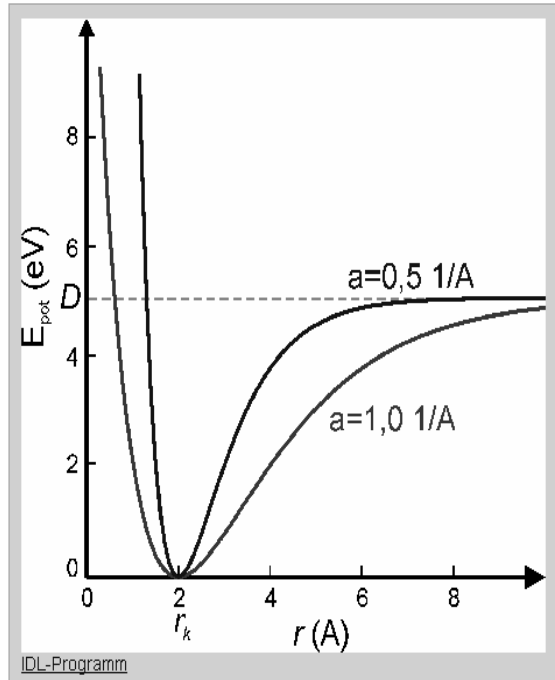
Ist eine empirische Form, die das Potential von Molekülen beschreibt.

$$E_{\text{pot}}(r) = D \left(1 - e^{-a(r-r_k)} \right)^2$$

Die Parameter hängen vom Molekül ab:

- Dissoziationsenergie D (eV)
- Gleichgewichtsabstand r_k Å
- Steife parameter a (1/Å)

Morse-Potential

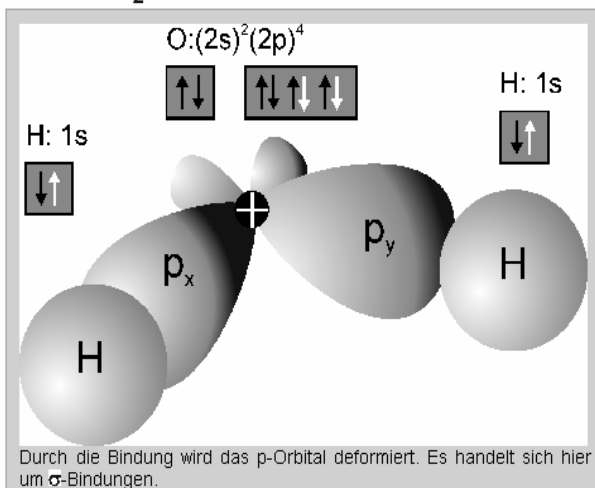


Vielatomige Moleküle

Wichtige Eigenschaften:

- Molekulare Symmetrie
- Geometrische Anordnung
- Bindung durch überlappende nicht voll besetzte Orbitale

Beispiel: H_2O (Wasser)



Eigenschaften:

- 2 σ -Bindungen
- Öffnungswinkel: $104,5^\circ$
- Dipolmoment: $p = 6 \cdot 10^{-30} \text{ mC}$

Beispiel: NH_3 (Amoniak)

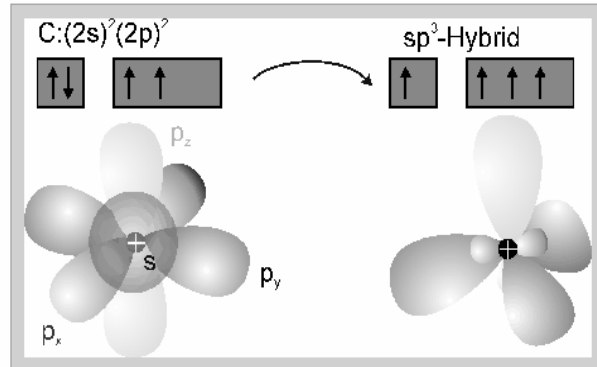
Eigenschaften:

- 3 σ -Bindungen
- Pyramidenform mit Öffnungswinkel von 107°
- Dipolmoment: $p = 5 \cdot 10^{-30} \text{ mC}$

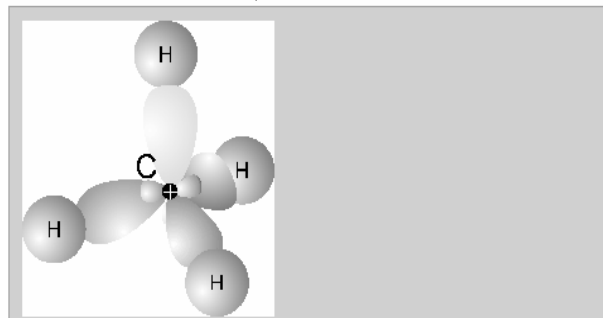


sp³-Hybridwellenfunktion

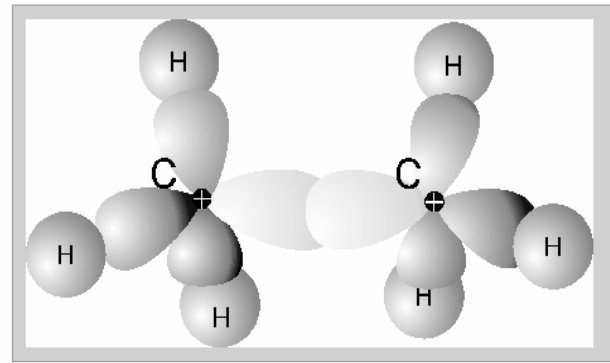
Hybridisierung von einem s- und drei p-Orbitalen bei Kontakt z.B. mit vier H-Atomen.



Beispiel: Methan (CH₄)



Beispiel: Äthan (C₂H₆)

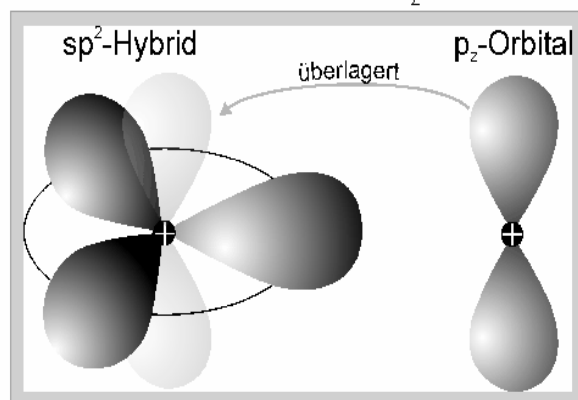


In beiden Fällen liegen 4 σ-Bindungen vor.



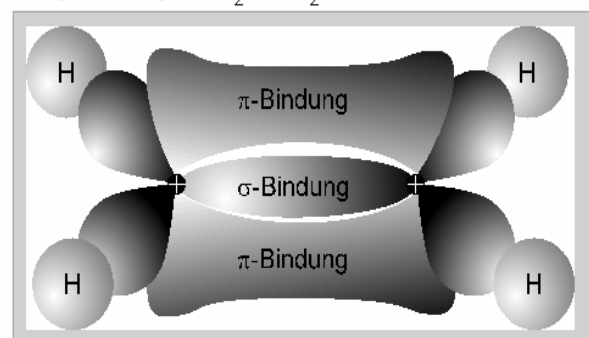
Weitere Hybridwellenfkt.

sp²-Hybridwellenfunktion besteht von einem s- und zwei p-Orbitalen. Überlagert ist das p_z-Orbital.



- ▶ sp²-Orbitale liegen in einer Fläche
- ▶ Schließen Winkel von 120° ein
- ▶ Ein Elektron besetzt p-Orbital

Beispiel: Äthylen (H₂C=CH₂)



Doppelbindung aus

- ▶ einer π-Bindung aus p_z-Orbital
- ▶ σ-Bindung aus sp²-Orbital.
- ▶ Molekül ist starr gegen Verdrerhung der Atome.

Weiterhin gibt es die **sp-Hybridwellenfunktion** bestehend aus einem s- und einem p-Orbital.
Beispiel: Acetylen (HC≡CH) mit 3-fach-Bindung

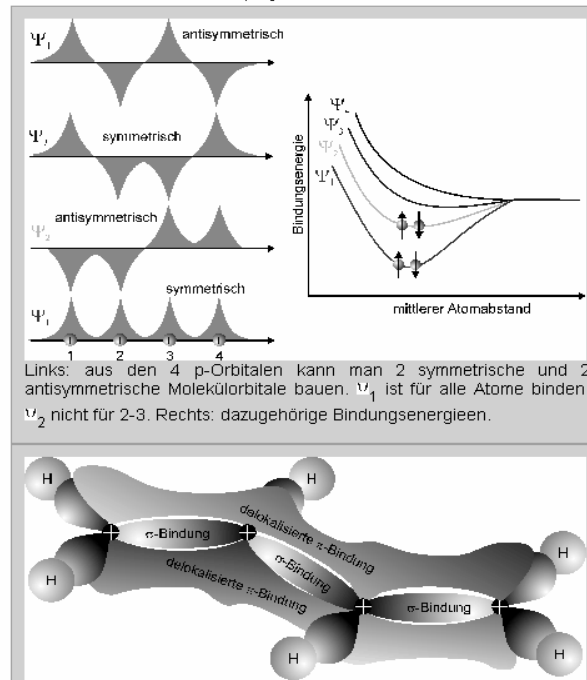
- ▶ aus 2 π-Bindungen aus p-Orbitalen
- ▶ und 1 σ-Bindung aus 1s-Orbitalen.



Konjugierte Moleküle

π -Bindungen bilden über viele Atome hinweg gemeinsame (delokalisierte) Molekülorbitale.

Beispiel: Butadien (C_4H_6)

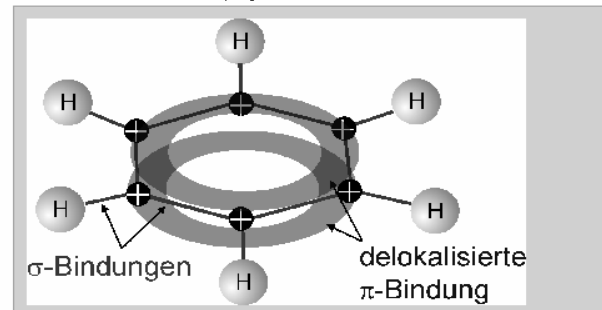


Bindungen im Butadien:

- σ -Bindungen über sp^2 -Hybriden.
- π -Bindung mit 4 delokalisierten Elektronen.

4 Elektronen in dem π -Orbital können sich entlang der Kette frei bewegen $\Rightarrow$ gute Polarisierbarkeit.

Beispiel: Benzol (C_6H_6)



Bindungen im Benzol:

- σ -Bindungen aus sp^2 -Hybriden.
- π -Bindung mit 6 delokalisierten Elektronen

6 Elektronen in dem π -Orbital können sich im Ring frei bewegen $\Rightarrow$ starker Diamagnetismus.

Juni 30, 2005

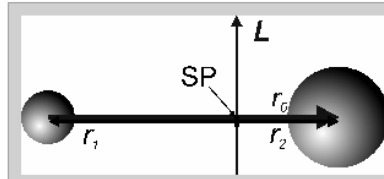
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



Molekulare Rotation

Starre Rotation eines Moleküls mit 2 Atomen



Das Trägheitsmoment ist

$$I = \sum_{\text{Ionen}} M_i r_i^2 = \mu r_0^2$$

und die Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} L^2 = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) = B h c l(l+1)$$

Das Trägheitsmoment wird angegeben als

$$B = \frac{\hbar}{4\pi c I}$$

Für Übergänge mit $\Delta l = 1$ gilt:

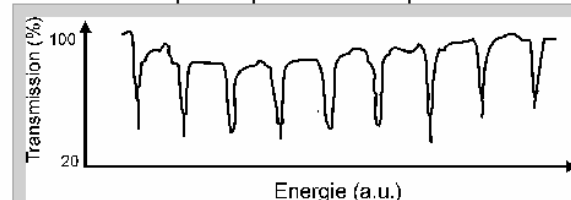
$$\Delta E_{\text{rot}} = 2B h c l(l+1)$$

Rotationsniveaus und charakteristische Werte

l		$\hbar^2/2I$ (eV)	B (1/cm)
3	H_2	$8.0 \cdot 10^{-3}$	60,8
2	O_2	$1.8 \cdot 10^{-4}$	1,4
1	CO	$2.4 \cdot 10^{-4}$	1,9
0			

- Rotationszustände sind bei Zimmertemperatur (1/40 eV) angeregt.
- Übergänge im Infraroten bis Mikrowellenbereich
- Auswahlregel für elektrische Übergänge: $\Delta l = \pm 1$
- Elektrische Übergänge gibt es nur wenn ein Dipolmoment vorhanden ist
- Also keine reinen Rotationspektren bei homonuklearen Molekülen.

Rotationsabsorptionsspektrum mit äquidistante Linien:



Juni 30, 2005

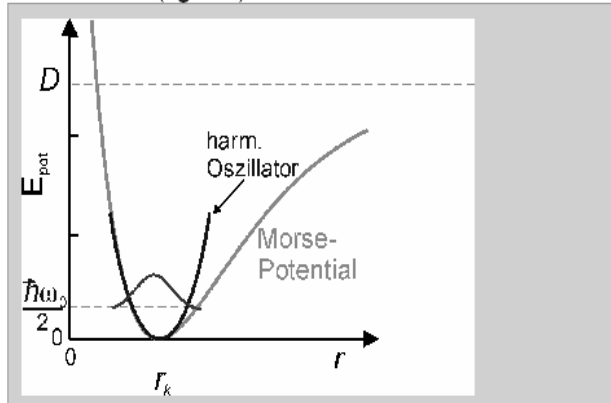
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

18



Molekulare Schwingungen

Atome können um ihre Gleichgewichtslage schwingen. Nähere Morse-Potential durch harmonischen Oszillator an (vgl.).



Der quantenmechanische Oszillator bestimmt die Schwingungsniveaus:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

Die Dissoziationsenergie muss um die Nullpunktsenergie korrigiert werden:

$$D_e = D - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

Für Übergänge mit $\Delta n = \pm 1$ gilt

$$\Delta E = \hbar\omega_0$$

Beispiele sind

	$\hbar\omega_0$ (eV)
H ₂	0,543
O ₂	0,194
CO	0,268

Für Vibrationsspektren gilt:

- Übergänge liegen im Infraroten.
- Auswahlregel für elektrische Übergänge: $\Delta n = \pm 1$
- Elektrische Übergänge gibt es nur wenn ein Dipolmoment vorhanden ist
- Also keine reinen Vibrationsspektren bei homonuklearen Molekülen.

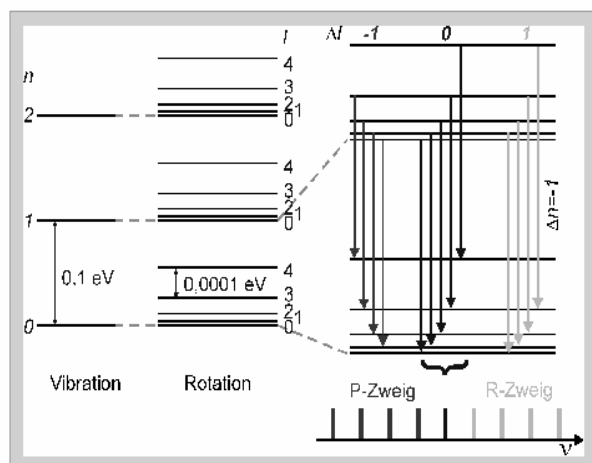


Rotation- und Vibrationsspektren

Rotations- und Vibrations-Spektren treten gemeinsam auf:

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

Sie sind aber wegen $E_n/E_{rot} \approx 1000$ spektral getrennt.



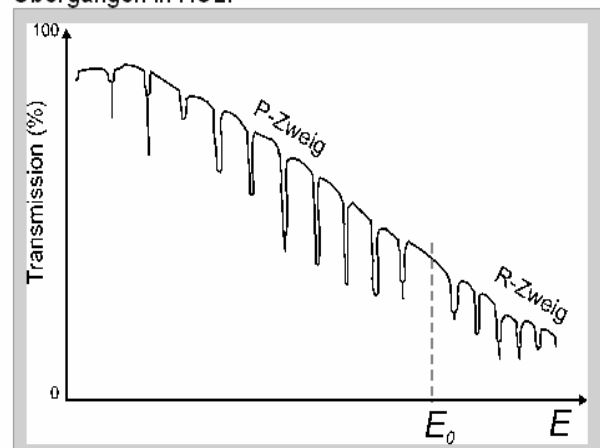
Zu jedem Vibrationsübergang gehört eine Rotationsbande

$$E = \hbar\omega_0 + 2Bc(l+1)$$

mit

- R-Zweig für $\Delta l = +1$
- L-Zweig für $\Delta l = -1$

Transmissionsspektrum von Vibrations-Rotations-Übergängen in HCL.





Elektronische Übergänge

Übergänge zwischen Zuständen mit verschiedenen Molekülorbits.

- ▶ Atomabstand ändert sich
- ▶ Trägheitsmoment ändert sich
- ▶ Vibrationsenergie $\hbar\omega_0$ ändert sich

Energie Niveaus insgesamt:

$$E = E_e + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

Für die Übergänge gilt:

$$\Delta E = \Delta E_e + \Delta E_n + \Delta E_{rot}$$

mit:

$$\Delta E_n = (n_2 + \frac{1}{2})\hbar\omega_2 - (n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1$$

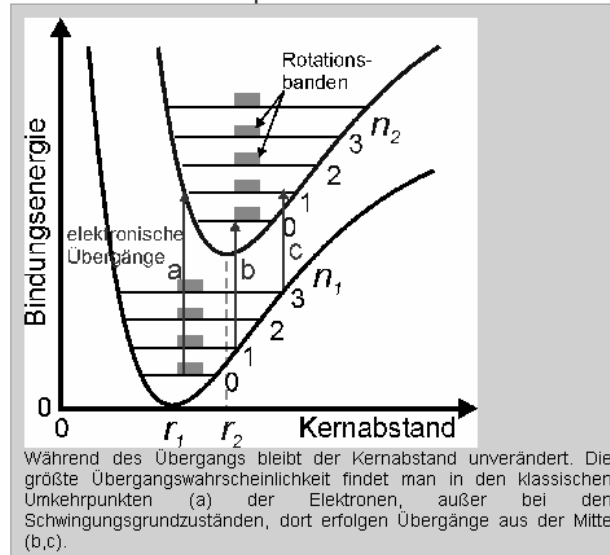
$$\Delta E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I_2}l_2(l_2+1) - \frac{\hbar^2}{2I_1}l_1(l_1+1)$$

Jeder Übergang ist Folge von Banden bestimmt durch $n_a \rightarrow n_b$ und allen $l_a \rightarrow l_b$.

Auswahlregeln:

- ▶ $\Delta l = 0, \pm 1$
- ▶ $\Delta s = 0$
- ▶ Δv nach Franck-Condon-Prinzip

Übergang zwischen elektronischen Zuständen nach Franck-Condon-Prinzip



Zum Mitnehmen

Moleküle: Wellenfunktion aus Linearkombinationen der Produkte der Wellenfkt. der Einzelatome (wie bei Mehrelektronenatome: Wellenfkt. ist Linearkomb. der Wellenfkt. der Einzelelektr.)

Parität wieder eine gute $\mathbb{Q}$ d.h. bei identischen Atome die Ununterscheidbarkeit wieder Rechnung tragen durch Symmetriesierung der Produkte -> bindende und nicht-bindende Kombinationen abhängig von der Elektronendichte zwischen den positiv geladenen Kernen.
positive Parität = symmetr. Wellenfkt. = max. AW der Elektronen zwischen Kernen = bindende Kombination)



Vorlesung 23:

Roter Faden:

Mehratomige Moleküle

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch:

<http://www.uni-stuttgart.de/ipf/lehre/online-skript/>



Moleküle

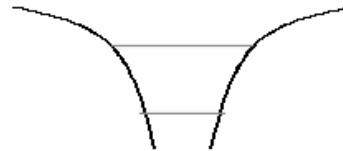
Moleküle sind Atomverbände, wobei zwischen den Atomen genügend starke Bindungskräfte herrschen, damit das Molekül nach außen als abgeschlossene Einheit betrachtet werden kann. Andererseits ist die Bindung der Atome zu einem Molekül schwächer als die Bindungskraft innerhalb eines einzelnen Atoms, so dass die elektronische Struktur der einzelnen Atome weitgehend erhalten bleibt. Die Bindung der Atome zu einem Molekül beeinflusst in der Regel nur die Elektronen in der äußersten Schale der beteiligten Atome, die so genannten *Valenzelektronen*, die für die chemischen Eigenschaften der Atome von zentraler Bedeutung sind. Die Bindung der Atome zu einem Molekül beeinflusst daher maßgebend die chemischen Eigenschaften, so dass wir bei Molekülen hinsichtlich der chemischen Eigenschaften von einer neuen Substanz sprechen können.

- Warum verbinden sich neutrale Atome zu Molekülen?
- Wie sieht die Energieniveaustuktur von Molekülen aus?
- Wie kann man chemische Reaktionen auf einer molekularen Basis verstehen?



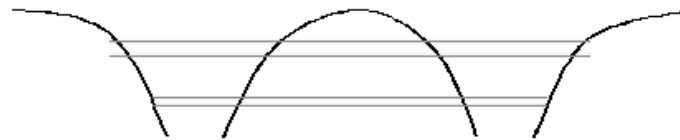
Energieniveaus bei mehreren Atomen -> Bandstruktur

ein Atom



zwei Atome (Molekül):

Aufspaltung symmetrisch / antisymmetrisch
bonding / antibonding



$$\Psi = \Psi_1 \pm \Psi_2$$

(CAO) Linear
Combination of
Atomic Orbitals

viele Atome (Festkörper):

unendlich-fache Aufspaltung $\Rightarrow$ Bänder



Tunneln
erlaubt
Transport
von Elektr.

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

3



Wasserstoff-Molekölion: Bindung durch "Austausch" des Elektrons, das zwischen Protonen hin- und her tunnelt.

Besteht aus H-Atom und einem Proton.

Approximation der Molekülwellenfunktion: LCAO
(Linear Combination of Atomic Orbitals)

Gerade Wellenfunktion

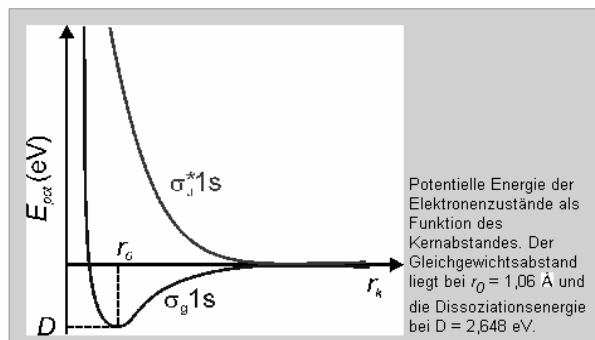
$$\psi_g = C_g (\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})): \sigma_g 1s$$

- Elektronendichte zwischen Kernen
- Bindendes Orbital

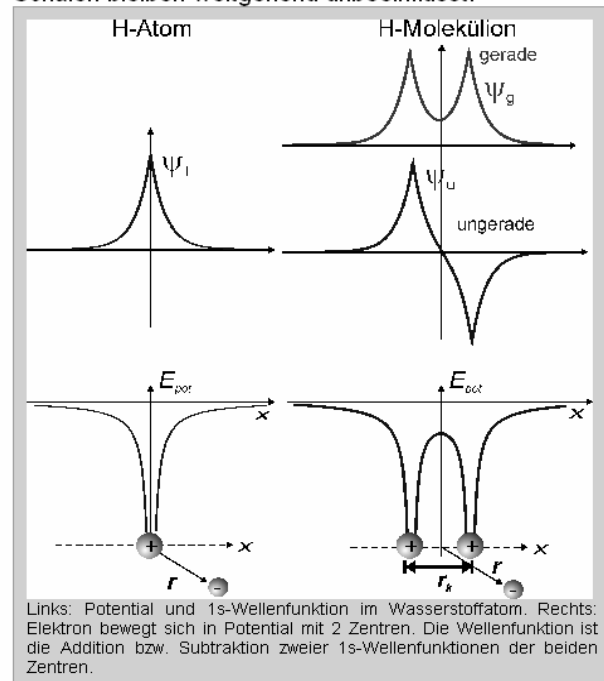
Ungerade Wellenfunktion

$$\psi_u = C_g (\psi_1(\vec{r}) - \psi_2(\vec{r})): \sigma_u^* 1s$$

- Keine Elektronendichte zwischen Kernen
- Nicht bindendes Orbital



Moleküle: Valenzelektronen bilden ein gemeinsames Elektronensystem. Elektronen in abgeschlossenen Schalen bleiben weitgehend unbeeinflusst.



Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

4



Lösung der 3-D Schrödingergleichung

Einsetzen in Schrödingergl. in Kugelkoordinaten

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{E} - \mathbf{V}(\mathbf{r})) r^2 \sin \vartheta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}$$

Separationsansatz

Linke Seite hängt nur von r und ϑ ab, rechte nur von φ
Gleichung muß für ALLE Werte von r, ϑ, φ gelten $\Rightarrow$

Beide Seiten müssen gleich einer Konstanten C_1 sein $\Rightarrow$

Für rechte Seite: $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -C_1 \cdot \Phi$

Lösungsfunktion: $\Phi = A \cdot e^{\pm i \sqrt{C_1} \varphi}$

m ganzzahlig
"magnetische"
Quantenzahl durch
Randbedingung in Φ

Φ muß im ganzen Raum eindeutig sein $\Rightarrow$

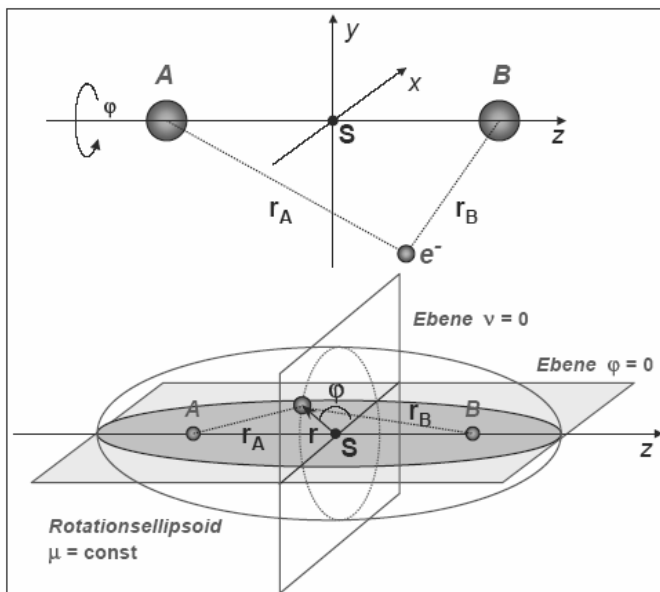
$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + n \cdot 2\pi) \Rightarrow e^{\pm i \sqrt{C_1} \cdot 2n\pi} = 1 \Rightarrow \sqrt{C_1} = m$ mit $m \in \mathbb{Z}$

Damit ergibt sich für die Lösungsfunktionen $\Phi_m(\varphi) = A \cdot e^{im\varphi}$

Normierung: $\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \cdot \Phi_m(\varphi) d\varphi = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$



Zylindersymmetrie -> Drehimpuls $\mathbb{Q}$ entlang z erhalten



$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ nur von φ ,
abhängig.

$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi}$

Randbedingungen für Φ .
führt zur Quantisierung
von $l_z \rightarrow$ Drehimpuls
entlang Verbindungsachse
gute $\mathbb{Q}$.

Abbildung 9.4: Zur Definition der elliptischen Koordinaten. Die beiden Kerne befinden sich in den Brennpunkten des Rotationsellipsoids. Der durch den Vektor $\mathbf{r}$ charakterisierte Ort P des Elektrons wird bezüglich eines über $\mu = (r_A + r_B)/R$ definierten Ellipsoids festgelegt. P liegt somit auf der Oberfläche des Ellipsoids. Die weitere Festlegung der Position von P auf der Oberfläche (2-D Mannigfaltigkeit) verlangt nach zwei weiteren Koordinaten v und φ . $v = (r_A - r_B)/R$ entspricht Schnitten des Ellipsoids senkrecht zur Verbindungsachse der Brennpunkte. Die Grenzflächen dieser Schnitte sind Kreisbahnen. Der Winkel $\varphi = \arctan(y/x)$ gibt den Ort P auf dem Kreis an.



Gesamt-Drehimpuls $\rightarrow j_z = \tau \hbar$

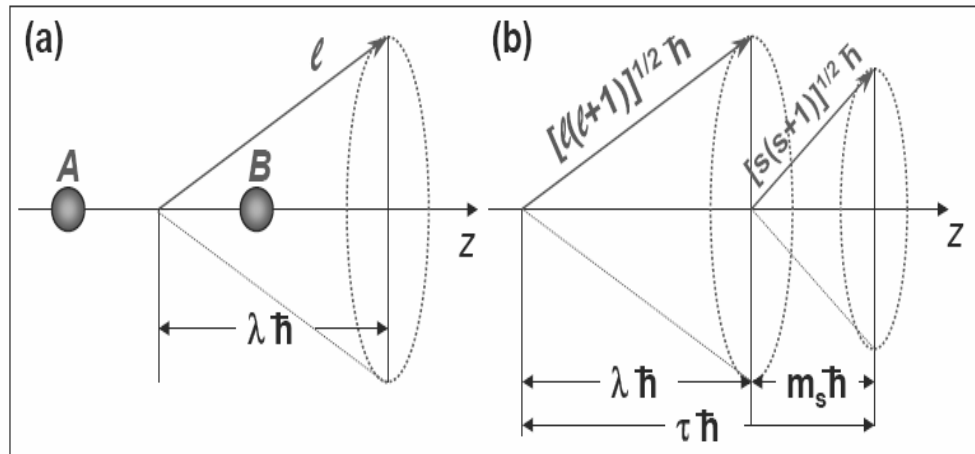


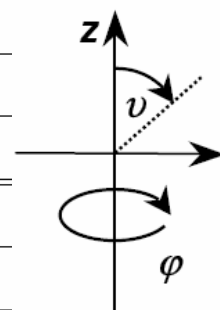
Abbildung 9.6: (a) Präzession des Bahndrehimpulses l des Elektrons um seine zeitlich konstante Projektion $l_z = \lambda \hbar$. (b) Die Projektionen $l_z = \lambda \hbar$ und $s_z = m_s \hbar$ addieren sich zur Gesamtprojektion $j_z = \tau \hbar$.

Der Zustand eines Elektrons in einem zweiatomigen Molekül ist durch die beiden Hauptquantenzahlen n_μ und n_ν , die Bahndrehimpuls-Projektionsquantenzahl λ und die Spin-Projektionsquantenzahl m_s eindeutig bestimmt. Wir charakterisieren den Zustand also mit den vier Quantenzahlen $(n_\mu, n_\nu, \lambda, m_s)$.



H-Atom: Kugelflächenfunktionen für $l=1,2,3$

l	m	$Y_l^m(\vartheta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta$
2	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2 \cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta)$
3	± 3	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$
	± 2	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cos \vartheta \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$
	± 1	$\mp \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$
	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$



Das Absolutquadrat der Kugelflächenfunktionen $|Y_l^m(\vartheta, \varphi)|^2$ gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens im kugelsymmetrischen Potenzial als Funktion der Winkel ϑ und φ an.



Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2$

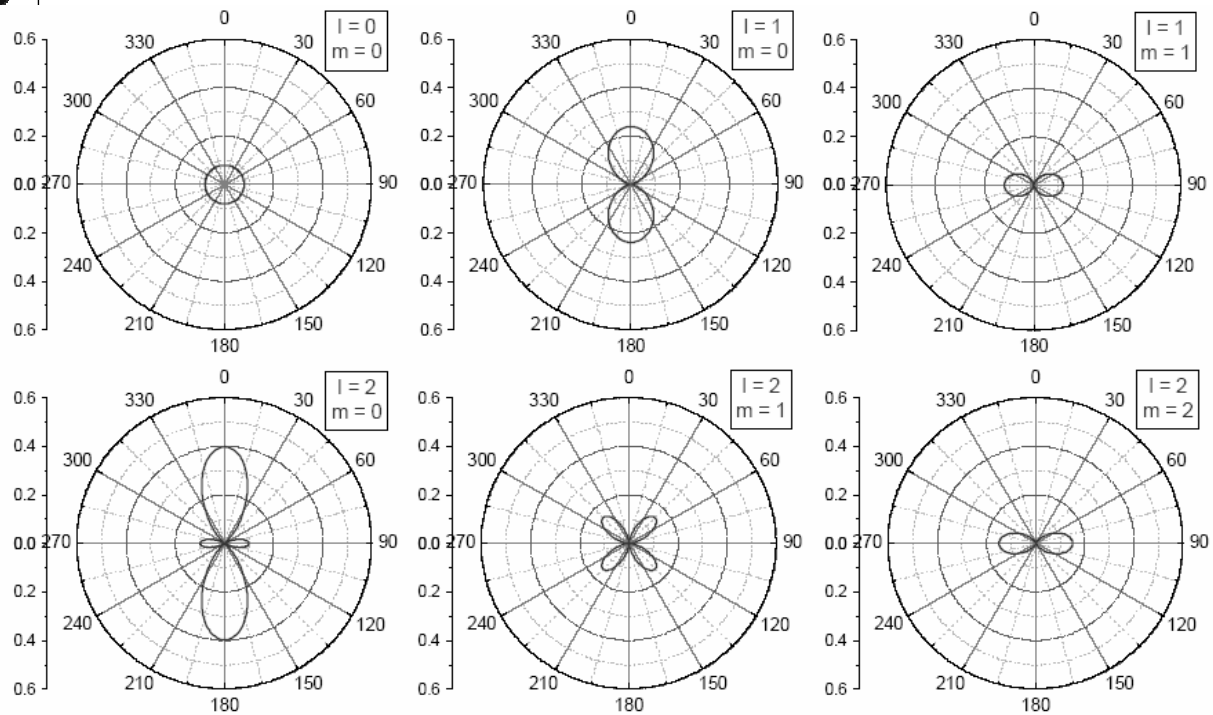


Abbildung 3.7: Polardarstellung des Absolutquadrats der normierten Kugelflächenfunktionen. Die Länge des Vektors vom Ursprung zu den Kurven gibt $|Y_l^m(\cos \vartheta)|^2$ für die verschiedenen Winkel ϑ an. Alle Diagramme sind rotationssymmetrisch um die z -Achse, die hier als vertikale Achse gewählt wurde.

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

9



Quadrat der Kugelflächenfunktionen für $l=0,1,2$

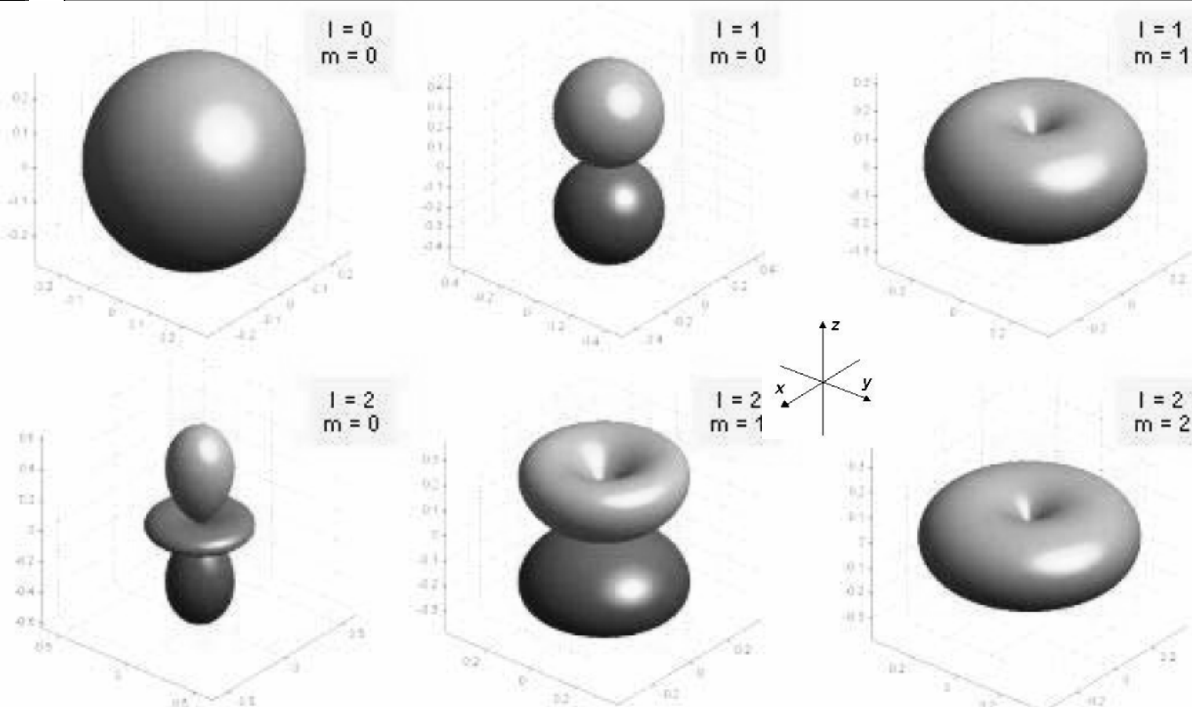


Abbildung 3.8: Dreidimensionale Darstellung der Quadrate der normierten Kugelflächenfunktionen $|Y_l^m|^2$ für $l = 0, 1, 2$ und 3 . Zeichnet man einen Vektor vom Zentrum der betreffenden Figur in eine bestimmte Richtung, so gibt die Länge eines Vektors vom Ursprung zum Schnittpunkt mit der Oberfläche der Figur den Wert von $|Y_l^m|^2$ an.

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

10



Molekularorbitale des H_2^+ -Ions

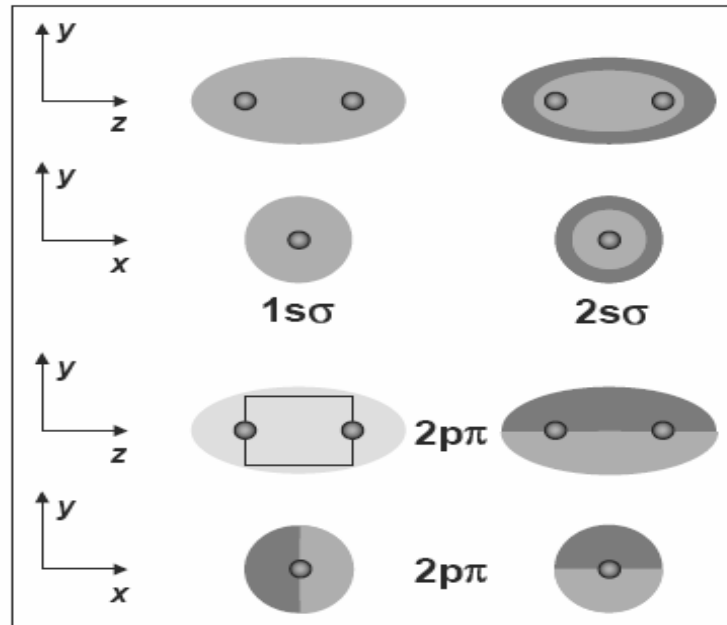


Abbildung 9.7: Beispiele für Molekularorbitale des Elektrons. In den blauen Bereichen ist $\psi > 0$, in den roten $\psi < 0$. Das gestrichelte Rechteck deutet an, dass die yz -Ebene die Knotenebene ($\psi = 0$) ist. Zur Charakterisierung des Zustandes (ohne Spin) benötigt man 3 Quantenzahlen. Üblicherweise werden die beiden Hauptquantenzahlen wie bei den Atomorbitalen mit einer ganzen Zahl ($n_\mu \geq 1$) und einem Buchstaben ($s, p, d, \dots$), die Bahndrehimpuls-Projektionsquantenzahl wie oben diskutiert mit einem griechischen Buchstaben ($\sigma, \pi, \delta, \dots$) beschrieben.

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

11



Homonukleare Moleküle

Bestehen aus Atomen der gleichen Sorte.

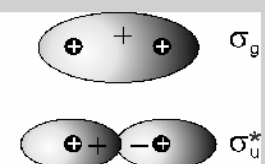
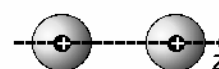
- Wegen axialer Symmetrie ist nur die Projektion L_z des Bahndrehimpulses, nicht der Betrag definiert.
- Es gibt gerade und ungerade Orbitale.
- Notation: $\lambda = |m| = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ($\sigma, \pi, \delta, \dots$)
- Die Ladungsverteilung ist symmetrisch.
- Die Bindung ist kovalent.

Atom	Molekül	Entartung
p	σ_u^*	2
	π_g^*	4
	σ_g	2
	π_u	4
s	σ_u^*	2
	σ_g	2

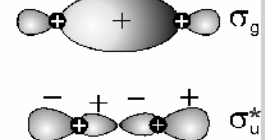
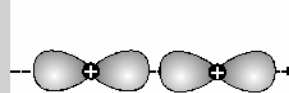
Beispiele für kovalente Bindungen (vgl. $\Rightarrow$):

	D (eV)	r_K (Å)	p (mC)
H_2	4,5	0,7	0,0
O_2	5,1	1,2	0,0
CO	11	1,1	0,1

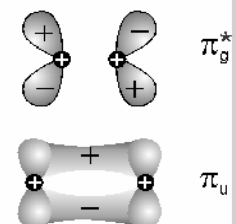
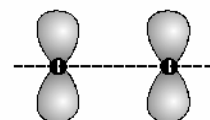
S-Orbitale



P_z -Orbitale



P_x - oder P_y -Orbitale



Links: Atomorbitale, die sich zu den Molekularorbitalen rechts verbinden. Die Vorzeichen deuten positive (+) und negative (-) Amplitude der Wellenfunktion an.

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

12



Homonukleare Moleküle

Das Molekül ist bestimmt durch die Molekülzustände besetzt durch die Valenzelektronen.

Projektion des Gesamtdrehimpulses $\langle L_z \rangle = M\hbar$.

mit

$$M = \sum_{\text{Elektronen}} m_l$$

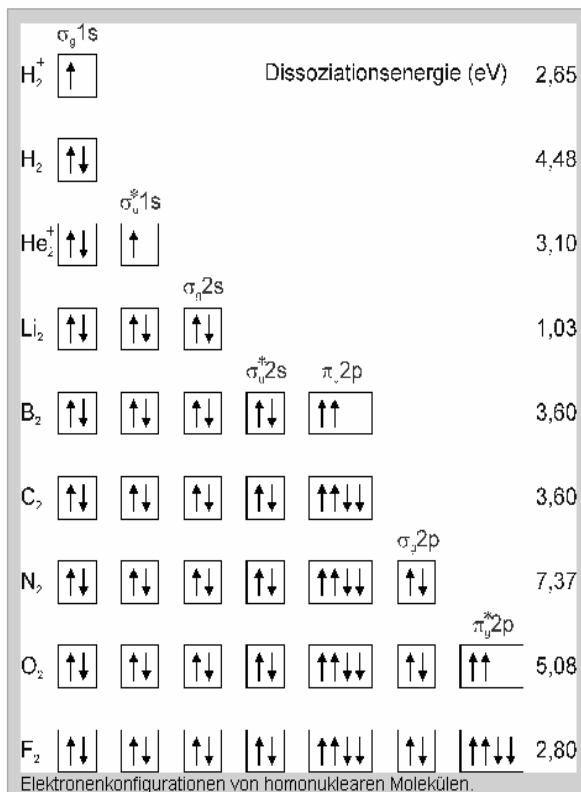
Gesamtmolekülspin: S

Notation

Gesamtmolekülzustand beschrieben durch $^{2S+1}\Lambda$

Zusammenfassend:

- Einzelne Atome: $1s, 2s, 2p \dots$
- Molekülorbitale für einzelne Elektronen: $\sigma_g 1s, \sigma_u 1s, \pi_g 2p \dots$
- Gesamtmolekül: $^1\Sigma, ^3\Sigma, ^1\Pi, ^3\Pi$



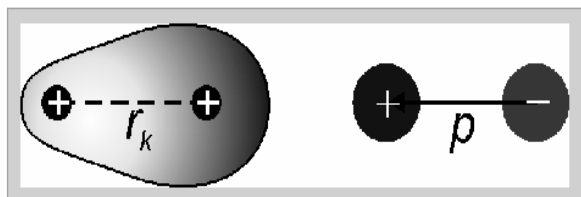
Heteronukleare Moleküle

Bestehen aus ungleichen Atomen

- Keine räumliche Symmetrie.
- Keine gerade und ungerade Wellenfunktionen.
- Auftreten von Ionenbindungen ist möglich.

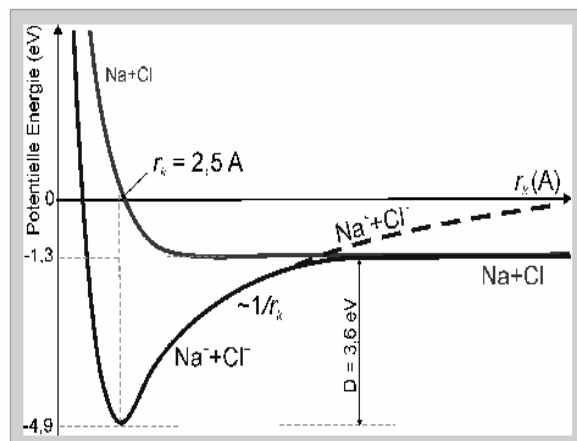
Ionenbindung

- Tritt auf, wenn Elektronenverteilung asymmetrisch zu einem Kern hin verlagert ist.
- Übergang zu zwei Ionen ist leicht möglich.
- Haben elektrisches Dipolmoment p .
- Sind meist Verbindungen zwischen Elementen aus 1. bzw. 2. und 2.- bzw. 3.-letzter Spalte des Periodensystems.



Beispiel: NaCl bestehend aus

- Na mit einem 3s-Elektron
- Cl mit einem 3s-Loch



Beispiele für Ionenbindungen (vgl. [1])

	D (eV)	r_K (Å)	p (mC)
NaCl	3,6	2,5	8,0
HCL	4,4	1,3	1,0



Periodensystem

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Ha													
58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

15



Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale			K	L			M			N	Schale			K	L			M			N			O
Z		Element	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	Z		Element	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	5s	5p	
1	H	Wasserstoff	1							28	Ni	Nickel	2	2	6	2	6	8	2					
2	He	Helium	2							29	Cu	Kupfer	2	2	6	2	6	10	1					
										30	Zn	Zink	2	2	6	2	6	10	2					
3	Li	Lithium	2	1						31	Ga	Gallium	2	2	6	2	6	10	2	1				
4	Be	Beryllium	2	2						32	Ge	Germanium	2	2	6	2	6	10	2	2				
5	B	Bor	2	2	1					33	Ar	Arsen	2	2	6	2	6	10	2	3				
6	C	Kohlenstoff	2	2	2					34	Se	Selen	2	2	6	2	6	10	2	4				
7	N	Stickstoff	2	2	3					35	Br	Brom	2	2	6	2	6	10	2	5				
8	O	Sauerstoff	2	2	4					36	Kr	Krypton	2	2	6	2	6	10	2	6				
9	F	Fluor	2	2	5																			
10	Ne	Neon	2	2	6																			
11	Na	Natrium	2	2	6	1				37	Rb	Rubidium	2	2	6	2	6	10	2	6		1		
12	Mg	Magnesium	2	2	6	2				38	Sr	Strontium	2	2	6	2	6	10	2	6		2		
13	Al	Aluminium	2	2	6	2	1			39	Y	Yttrium	2	2	6	2	6	10	2	6	1	2		
14	Si	Silizium	2	2	6	2	2			40	Zr	Zirkonium	2	2	6	2	6	10	2	6	2	2		
15	P	Phosphor	2	2	6	2	3			41	Nb	Niob	2	2	6	2	6	10	2	6	4	1		
16	S	Schwefel	2	2	6	2	4			42	Mo	Molybdän	2	2	6	2	6	10	2	6	5	1		
17	Cl	Chlor	2	2	6	2	5			43	Tc	Technetium	2	2	6	2	6	10	2	6	6	1		
18	Ar	Argon	2	2	6	2	6			44	Ru	Ruthenium	2	2	6	2	6	10	2	6	7	1		
										45	Rh	Rhodium	2	2	6	2	6	10	2	6	8	1		
										46	Pd	Palladium	2	2	6	2	6	10	2	6	10			
										47	Ag	Silber	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1		
										48	Cd	Cadmium	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2		
19	K	Kalium	2	2	6	2	6		1	49	In	Indium	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	1	
20	Ca	Calcium	2	2	6	2	6		2	50	Sn	Zinn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	
21	Sc	Scandium	2	2	6	2	6	1	2	51	Sb	Antimon	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	3	
22	Ti	Titan	2	2	6	2	6	2	2	52	Te	Tellur	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	4	
23	V	Vanadium	2	2	6	2	6	3	2	53	I	Iod	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	5	
24	Cr	Chrom	2	2	6	2	6	5	1	54	Xe	Xenon	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	6	
25	Mn	Mangan	2	2	6	2	6	5	2															
26	Fe	Eisen	2	2	6	2	6	6	2															
27	Co	Kobalt	2	2	6	2	6	7	2															

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

16



sp-Hybridisierung

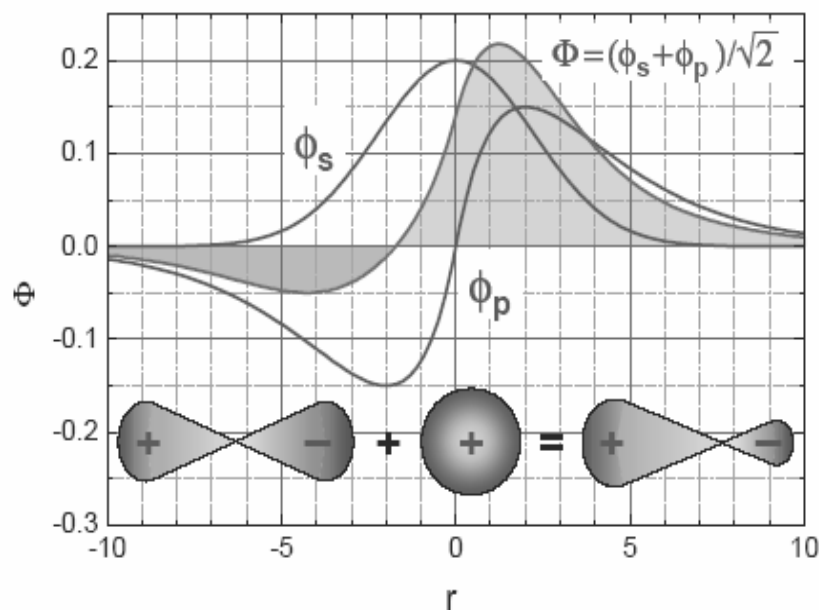


Abbildung 9.19: Schematische Darstellung der Bildung einer Linearkombination von s - und p -Orbitalen zur Bildung eines sp -Hybridorbitals.

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



sp-Hybridisierung

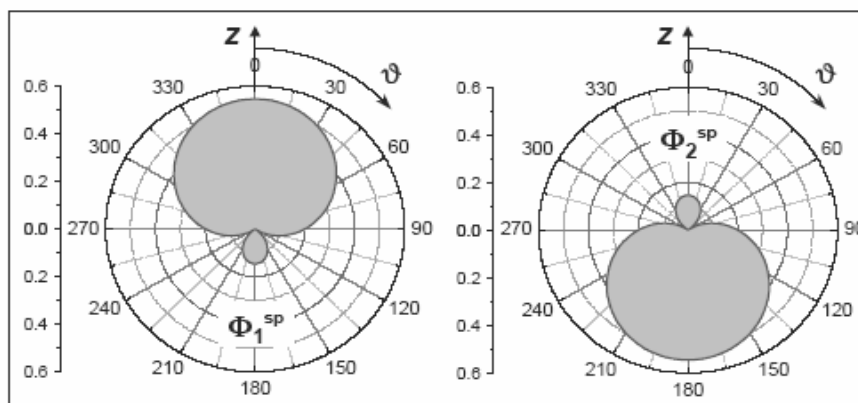


Abbildung 9.20: Polardarstellung der Orbitale der sp -Hybridisierung. Der Winkel ϑ wird gegen die z -Achse gemessen.

$$\begin{aligned}
 \Phi_1 &= c_1 \phi(s) + c_2 \phi(p_z) \quad \int |\Phi_i|^2 dV = 1 \\
 \Phi_2 &= c_3 \phi(s) + c_4 \phi(p_z) \quad \int \Phi_i^* \Phi_k dV = \delta_{ik} \quad c_1 = c_2 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad c_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \Phi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(s) + \phi(p_z)) \\
 \Phi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(s) - \phi(p_z)) \quad p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \quad \Phi_{1,2}^{sp}(\vartheta) = \sqrt{\frac{1}{8\pi}} (1 \pm \sqrt{3} \cos \vartheta)
 \end{aligned}$$

Juli 5, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

18

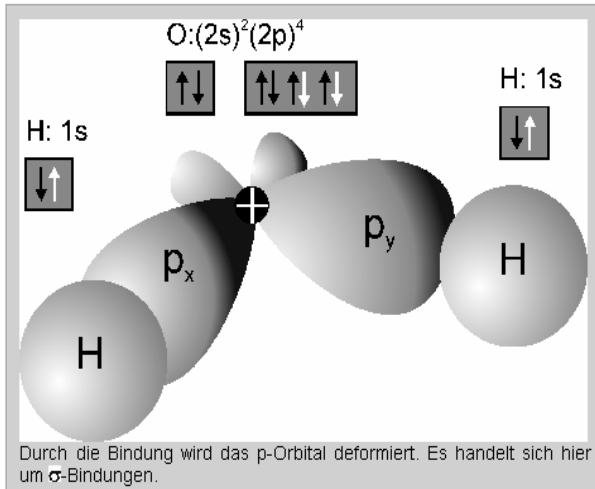


Vielatomige Moleküle

Wichtige Eigenschaften:

- Molekulare Symmetrie
- Geometrische Anordnung
- Bindung durch überlappende nicht voll besetzte Orbitale

Beispiel: H_2O (Wasser)



Eigenschaften:

- 2 σ -Bindungen
- Öffnungswinkel: $104,5^\circ$
- Dipolmoment: $p = 6 \cdot 10^{-30} \text{ mC}$

Beispiel: NH_3 (Ammoniak)

Eigenschaften:

- 3 σ -Bindungen
- Pyramidenform mit Öffnungswinkel von 107°
- Dipolmoment: $p = 5 \cdot 10^{-30} \text{ mC}$

Juli 5, 2005

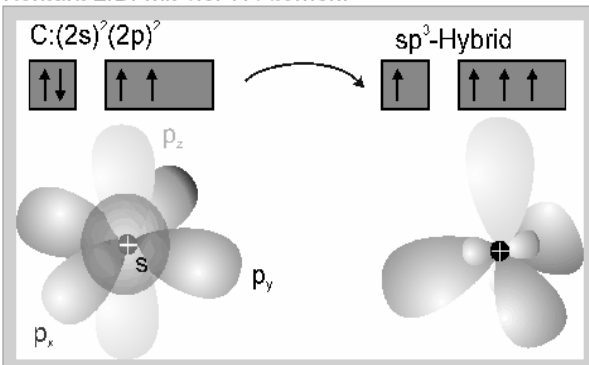
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

19

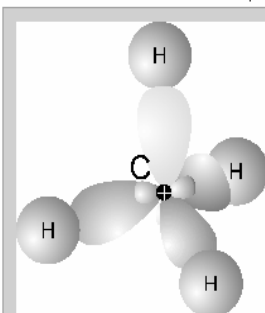


sp^3 -Hybridwellenfunktion

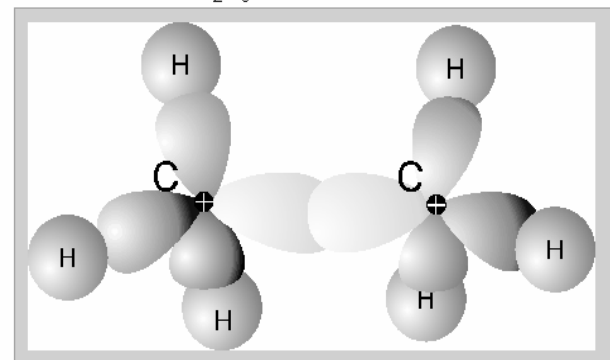
Hybridisierung von einem s- und drei p-Orbitalen bei Kontakt z.B. mit vier H-Atomen.



Beispiel: Methan (CH_4)



Beispiel: Äthan (C_2H_6)



In beiden Fällen liegen 4 σ -Bindungen vor.

Juli 5, 2005

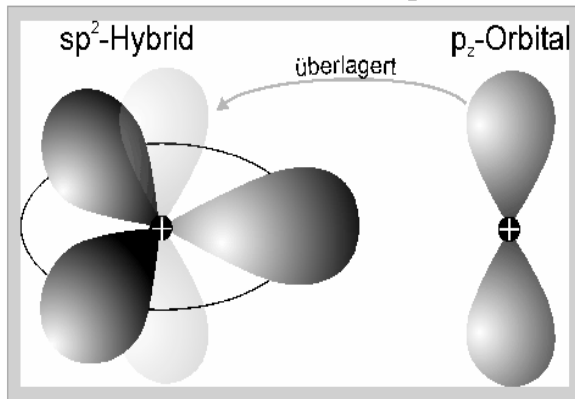
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

20



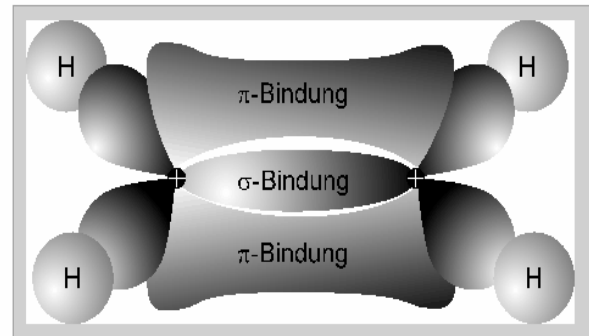
Weitere Hybridwellenfkt.

sp^2 -Hybridwellenfunktion besteht von einem s- und zwei p-Orbitalen. Überlagert ist das p_z -Orbital.



- ▶ sp^2 -Orbitale liegen in einer Fläche
- ▶ Schließen Winkel von 120° ein
- ▶ Ein Elektron besetzt p-Orbital

Beispiel: Aethylen ($H_2C=CH_2$)



Doppelbindung aus

- ▶ einer π -Bindung aus p_z -Orbital
- ▶ σ -Bindung aus sp^2 -Orbital.
- ▶ Molekül ist starr gegen Verderhung der Atome.

Weiterhin gibt es die **sp -Hybridwellenfunktion** bestehend aus einem s- und einem p-Orbital.

Beispiel: Acetylen ($HC\equiv CH$) mit 3-fach-Bindung

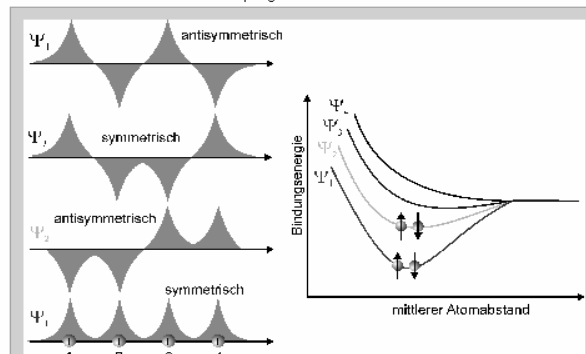
- ▶ aus 2 π -Bindungen aus p-Orbitalen
- ▶ und 1 σ -Bindung aus 1s-Orbitalen.



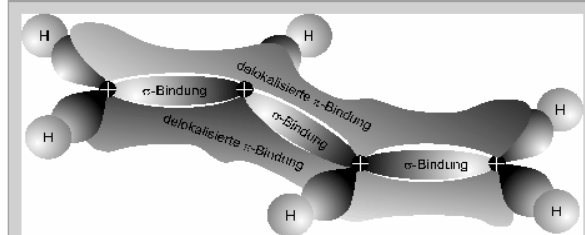
Konjugierte Moleküle

π -Bindungen bilden über viele Atome hinweg gemeinsame (delokalisierte) Molekülorbitale.

Beispiel: Butadien (C_4H_6)



Links: aus den 4 p-Orbitalen kann man 2 symmetrische und 2 antisymmetrische Molekülorbitale bauen. ψ_1 ist für alle Atome binden, ψ_2 nicht für 2-3. Rechts: dazugehörige Bindungsenergien.

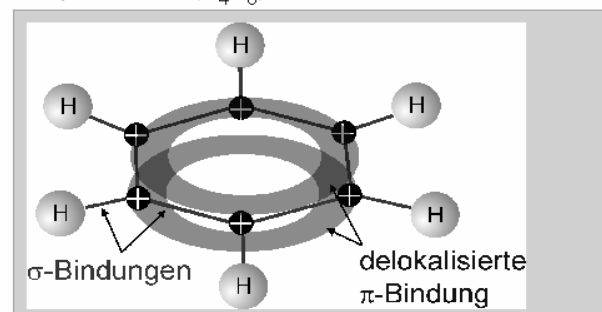


Bindungen im Butadien:

- ▶ σ -Bindungen über sp^2 -Hybriden.
- ▶ π -Bindung mit 4 delokalisierten Elektronen.

4 Elektronen in dem π -Orbital können sich entlang der Kette frei bewegen => gute Polarisierbarkeit.

Beispiel: Benzol (C_6H_6)



Bindungen im Benzol:

- ▶ σ -Bindungen aus sp^2 -Hybriden.
- ▶ π -Bindung mit 6 delokalisierten Elektronen

6 Elektronen in dem π -Orbital können sich im Ring frei bewegen => starker Diamagnetismus.



Zum Mitnehmen

Moleküle: Wellenfunktion aus Linearkombinationen der Produkte der Wellenfkt. der Einzelatome (wie bei Mehrelektronenatome: Wellenfkt. ist Linearkomb. der Wellenfkt. der Einzelelektr.)

Homonukleare Moleküle:

alle Atomorbitale gleich berechtigt

Heteronukleare Moleküle:

Atomorbitale nicht gleich berechtigt - >

Kovalenzbindung

Ionenbindung

v.d. Waals Bindung

Hybridisierung der Atomorbitale



Vorlesung 24:

Roter Faden:

Molekülbindungen

Hybridisierung

Vibration und Rotation der Moleküle

Folien auf dem Web:

<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>

Siehe auch: Demtröder, Experimentalphysik 3,
Springerverlag



Kovalente Bindungen

Die *kovalente* oder *homöopolare Bindung* erfolgt durch den Austausch gemeinsamer Elektronen zwischen zwei Atomen und die dadurch erfolgte Umordnung der Dichteverteilung der Elektronen, die zu einer Erhöhung der Dichte der Elektronen zwischen den beiden Kernen und damit einer gerichteten elektrostatischen Anziehung führt. Sie spielt nur dann eine Rolle, wenn $R < r_A + r_B$, d.h. wenn der Abstand der Kerne klein gegenüber der Summe der Atomradien der beiden Atome ist. Dieser Effekt schlägt sich im *Valenzbindungsmodell* der Chemie nieder.

Ferner teilen sich, wie oben bereits diskutiert wurde, bei der kovalenten Bindung beide Atome ein oder mehrere Elektronen. Die im Vergleich zum Atomorbital größere räumliche Ausdehnung des Molekülorbitals verringert die mittlere kinetische Energie der an der Bindung beteiligten Valenzelektronen. Dieser Effekt trägt zum Minimum in der Potenzialkurve bei, in der ja die mittlere kinetische Energie enthalten ist. Dieser Beitrag zu Molekülbindung wird auch *Austauschwechselwirkung* genannt, weil er auf dem Austausch ununterscheidbarer Elektronen resultiert, und ist rein quantenmechanischer Natur.

Beide zur Bindung führenden Effekte spielen für $R < r_A + r_B$, also für Abstände, bei denen sich die beiden Elektronenhüllen der Atome überlagern, eine Rolle. Es gibt also hier gemeinsame Elektronen.

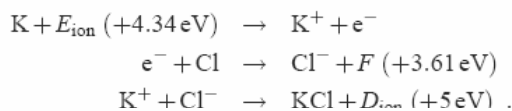


Ionische Bindungen

Die ionische Bindung erfolgt zwischen positiven und negativen Ionen. Sie tritt dann auf, wenn der Elektronenaustausch zwischen zwei Atomen zu einer erhöhten Dichte am Atom *A* und zu einer reduzierten Dichte am Atom *B* führt. Dies resultiert dann in einer gerichteten elektrostatischen Anziehung. Die Wechselwirkungsenergie der ionischen Bindung fällt mit $1/R$ ab, sie ist also langreichweitig.

Die ionische Bindung ist immer dann sehr effektiv, wenn durch den Elektronentransfer die Partneratome eine stabile Edelgaskonfiguration erreichen können. Typische Vertreter sind also Verbindungen zwischen Atomen der ersten Hauptgruppe (mit einem Valenzelektron) und solchen der siebten Hauptgruppe (mit einem freien Platz in der Valenzschale). Für die Elemente der ersten Hauptgruppe ist die Ionisierungsenergie E_{ion} besonders klein (z.B. $E_{\text{ion}} = 4.34 \text{ eV}$ für Kalium), da diese Atome durch Abgabe des einen Valenzelektrons eine Edelgaskonfiguration erreichen können. Andererseits führt das Auffüllen der Valenzschale des Elements der siebten Hauptgruppe zu einer Energieabsenkung. Diese Energieabsenkung nennt man *Elektronenaffinität* F . Ist F positiv (z.B. $F = +3.61 \text{ eV}$ für Chlor), so ist das negative Ion stabil.

Die bei der ionischen Bindung ablaufenden Prozesse können wir wie folgt anhand der Bildung von KCl darstellen:



Hierbei ist D_{ion} die Dissoziationsenergie, die man aufbringen muss, um das KCl-Molekül wieder in die beiden Ionen zu trennen. Will man das Molekül nicht in K^+ und Cl^- dissoziieren, sondern in die beiden Atome K und CL, so muss man die Dissoziationsenergie $D_{\text{Atom}} = F - E_{\text{ion}} + D_{\text{ion}}$ aufbringen.



Die van der Waals Bindung

Die van der Waals Bindung tritt zwischen zwei neutralen, polarisierbaren Atomen auf. Sie beruht auf der anziehenden Wechselwirkung elektrischer Dipole. Sie tritt nur dann zu Tage, wenn die kovalente oder ionische Bindung nicht vorhanden oder sehr schwach sind. Dies ist z.B. bei den Edelgasen der Fall. Die ionische Bindung tritt hier nicht auf, da beide Atome bereits in der stabilen Edelgaskonfiguration sind. Ebenso kann die kovalente Bindung nicht wirksam werden. Die beiden Edelgasatome können kein Elektron teilen, da keine gemeinsamen Elektronenorbitale existieren können. Die van der Waals Bindung ist demnach bei Edelgasatomen vorherrschend. Allerdings besitzen die Edelgasatome nicht von vornherein ein Dipolmoment. Ein solches kann aber durch die Nachbarschaft eines anderen Atoms induziert werden. Also ist auch bei der van der Waals Bindung die Ladungsverschiebung der eigentliche Grund für die Bindung.

Wird ein neutrales Atom A in ein elektrisches Feld $\mathbf{E}$ gebracht, so entsteht durch die entgegengesetzte Kraft auf negative und positive Ladungen ein *induziertes Dipolmoment*

$$\mathbf{p}_A^{\text{ind}} = \alpha_A \cdot \mathbf{E} , \quad (9.4.1)$$

das von der Polarisierbarkeit α_A des Atoms A und der Feldstärke $\mathbf{E}$ abhängt. Wird das elektrische Feld z.B. durch die Ladung q_B eines Ions B im Abstand R erzeugt (siehe Abb. 9.15b), so gilt

$$\mathbf{p}_A^{\text{ind}} = \frac{\alpha_A \cdot q_B}{4\pi\epsilon_0 R^2} \hat{\mathbf{R}} . \quad (9.4.2)$$



Anziehendes van der Waal Potential

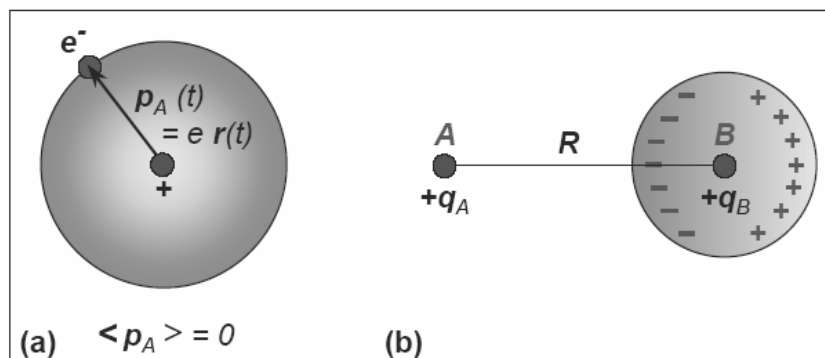


Abbildung 9.15: (a) Momentanes elektrisches Dipolmoment einer kugelsymmetrischen Ladungsverteilung. (b) Induziertes Dipolmoment durch Polarisierung der Elektronenhülle.

$$\mathbf{p}_A^{\text{ind}} = \alpha_A \cdot \mathbf{E}_B \text{ und } \mathbf{p}_B^{\text{ind}} = \alpha_B \cdot \mathbf{E}_A$$

$$E_{\text{pot}}(R) \propto -\mathbf{p}_A^{\text{ind}} \cdot \mathbf{p}_B^{\text{ind}} = -\alpha_A \alpha_B \cdot |\mathbf{E}|^2$$

$$E_{\text{pot}}(R) = -C \frac{\alpha_A \alpha_B}{R^6} .$$



sp-Hybridisierung

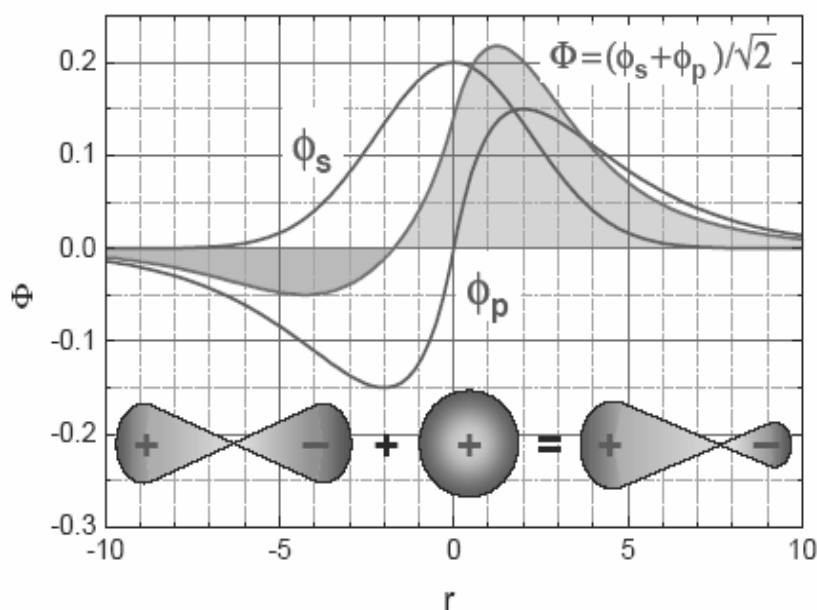


Abbildung 9.19: Schematische Darstellung der Bildung einer Linearkombination von s - und p -Orbitalen zur Bildung eines sp -Hybridorbitals.

Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

6



sp-Hybridisierung

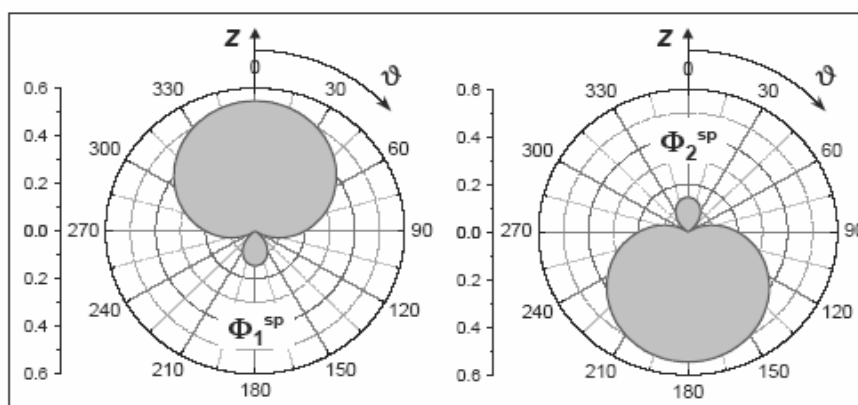


Abbildung 9.20: Polardarstellung der Orbitale der sp -Hybridisierung. Der Winkel ϑ wird gegen die z -Achse gemessen.

$$\begin{aligned}
 \Phi_1 &= c_1 \phi(s) + c_2 \phi(p_z) \quad \int |\Phi_i|^2 dV = 1 \\
 \Phi_2 &= c_3 \phi(s) + c_4 \phi(p_z) \quad \int \Phi_i^* \Phi_k dV = \delta_{ik} \quad c_1 = c_2 = c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad c_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \Phi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(s) + \phi(p_z)) \\
 \Phi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi(s) - \phi(p_z)) \quad p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \quad \Phi_{1,2}^{sp}(\vartheta) = \sqrt{\frac{1}{8\pi}} (1 \pm \sqrt{3} \cos \vartheta)
 \end{aligned}$$

Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

7

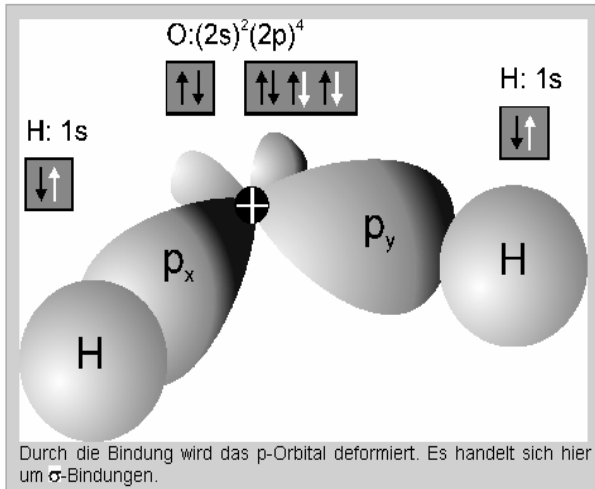


Vielatomige Moleküle

Wichtige Eigenschaften:

- Molekulare Symmetrie
- Geometrische Anordnung
- Bindung durch überlappende nicht voll besetzte Orbitale

Beispiel: H_2O (Wasser)



Eigenschaften:

- 2 σ -Bindungen
- Öffnungswinkel: $104,5^\circ$
- Dipolmoment: $p = 6 \cdot 10^{-30} \text{ mC}$

Beispiel: NH_3 (Amoniak)

Eigenschaften:

- 3 σ -Bindungen
- Pyramidenform mit Öffnungswinkel von 107°
- Dipolmoment: $p = 5 \cdot 10^{-30} \text{ mC}$



Wassermolekül mit und ohne Hybridisierung

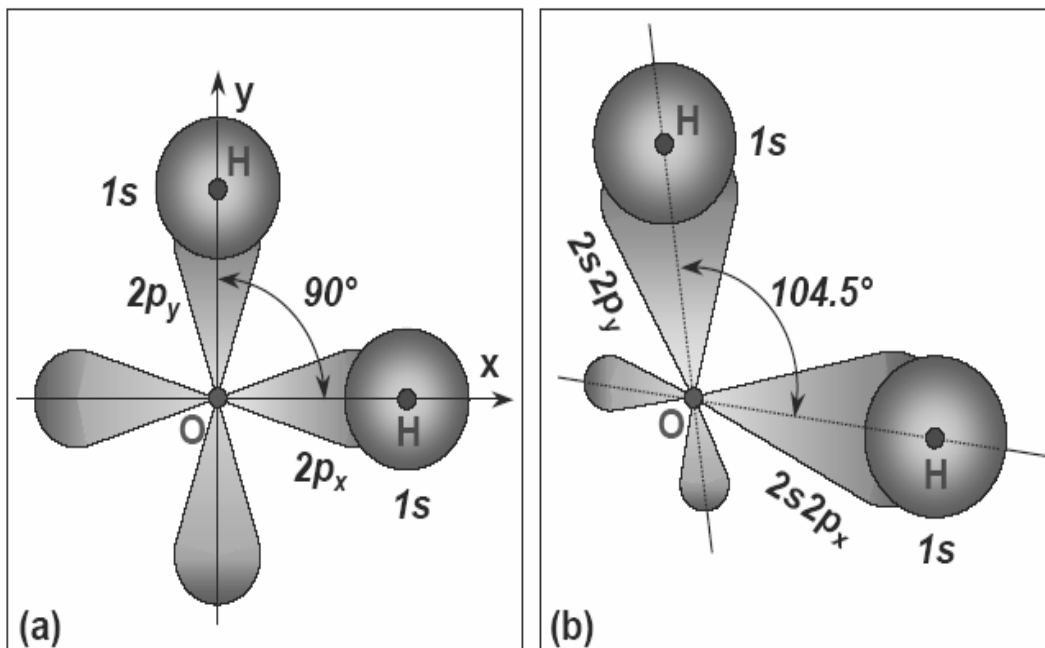
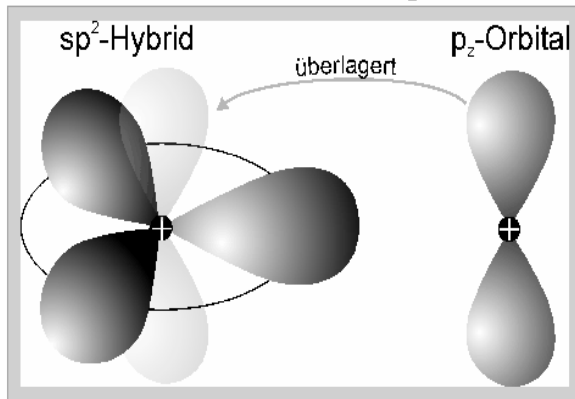


Abbildung 9.18: (a) Bindung zwischen den $1s$ -Orbitalen der H-Atome und den $2p_x$ - und $2p_y$ -Orbitalen des Sauerstoffatoms ohne Hybridisierung. (b) Bildung des Wassermoleküls mit hybridisierten Orbitalen.



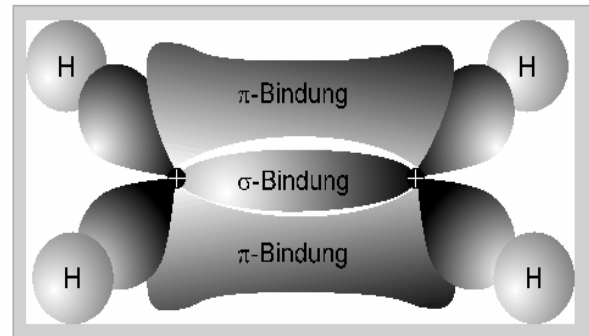
sp²-Hybridisierung

sp²-Hybridwellenfunktion besteht von einem s- und zwei p-Orbitalen. Überlagert ist das p_z-Orbital.



- sp²-Orbitale liegen in einer Fläche
- Schließen Winkel von 120° ein
- Ein Elektron besetzt p-Orbital

Beispiel: Aethylen (H₂C=CH₂)



Doppelbindung aus

- einer π-Bindung aus p_z-Orbital
- σ-Bindung aus sp²-Orbital.
- Molekül ist starr gegen Verdrehung der Atome.

Weiterhin gibt es die **sp-Hybridwellenfunktion** bestehend aus einem s- und einem p-Orbital.

Beispiel: Acetylen (HC≡CH) mit 3-fach-Bindung

- aus 2 π-Bindungen aus p-Orbitalen
- und 1 σ-Bindung aus 1s-Orbitalen.



sp²-Hybridisierung

$$\Phi_1^{sp^2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\phi(s) + \sqrt{2}\phi(p_x) \right) \quad (9.6.12)$$

$$\Phi_2^{sp^2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\phi(s) - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi(p_x) + \sqrt{\frac{3}{2}}\phi(p_y) \right) \quad (9.6.13)$$

$$\Phi_3^{sp^2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\phi(s) - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi(p_x) - \sqrt{\frac{3}{2}}\phi(p_y) \right) . \quad (9.6.14)$$

Die Winkelanteile dieser Funktionen sind durch (vergleiche hierzu Tabelle 3.3)

$$\Phi_1^{sp^2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} + \sqrt{2}\cos\varphi \right) \quad (9.6.15)$$

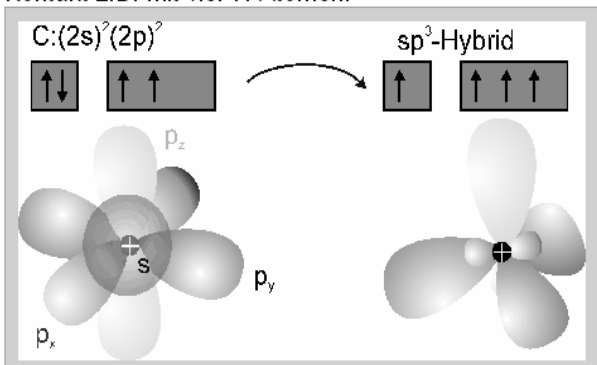
$$\Phi_2^{sp^2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\varphi + \sqrt{\frac{3}{2}}\cos\varphi \right) \quad (9.6.16)$$

$$\Phi_3^{sp^2} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\varphi - \sqrt{\frac{3}{2}}\cos\varphi \right) \quad (9.6.17)$$

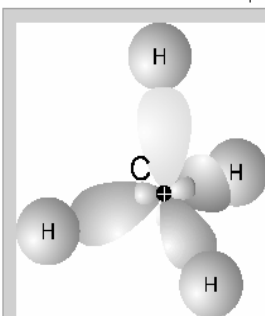


sp³-Hybridwellenfunktion

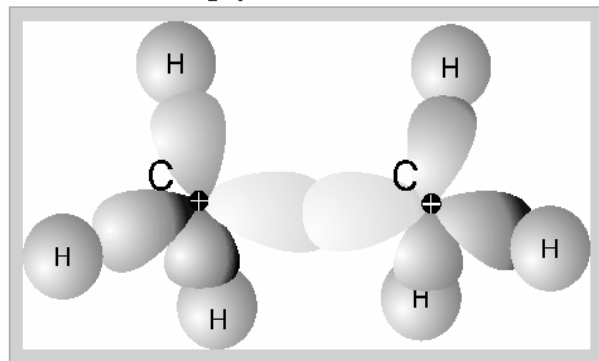
Hybridisierung von einem s- und drei p-Orbitalen bei Kontakt z.B. mit vier H-Atomen.



Beispiel: Methan (CH_4)



Beispiel: Äthan (C_2H_6)



In beiden Fällen liegen 4 σ -Bindungen vor.



sp³-Hybridisierung

Ganz analog zur sp - und sp^2 -Hybridisierung lässt sich die sp^3 -Hybridisierung behandeln, die z.B. beim Methanmolekül CH_4 vorliegt. Im Falle einer sp^3 -Hybridisierung mischen wir das s -Orbital mit allen 3 p -Orbitalen. Die daraus entstehenden normierten und orthogonalen Hybridorbitale sind

$$\Phi_1^{sp^3} = \frac{1}{2} \left(\phi(s) + \sqrt{3} \phi(p_z) \right) \quad (9.6.18)$$

$$\Phi_2^{sp^3} = \frac{1}{2} \left(\phi(s) + \sqrt{\frac{8}{3}} \phi(p_x) - \sqrt{\frac{1}{3}} \phi(p_z) \right) \quad (9.6.19)$$

$$\Phi_3^{sp^3} = \frac{1}{2} \left(\phi(s) - \sqrt{\frac{2}{3}} \phi(p_x) + \sqrt{2} \phi(p_y) - \sqrt{\frac{1}{3}} \phi(p_z) \right) \quad (9.6.20)$$

$$\Phi_4^{sp^3} = \frac{1}{2} \left(\phi(s) - \sqrt{\frac{2}{3}} \phi(p_x) - \sqrt{2} \phi(p_y) - \sqrt{\frac{1}{3}} \phi(p_z) \right) \quad (9.6.21)$$

Setzen wir in diese Ausdrücke die Winkelanteile ein, so erhalten wir für die 4 sp^3 -Hybridorbitale Maxima, die in den Ecken eines Tetraeders liegen. Der Tetraederwinkel θ beträgt $109,47^\circ$ (siehe Abb. 9.22b).



sp³-Hybridisierung

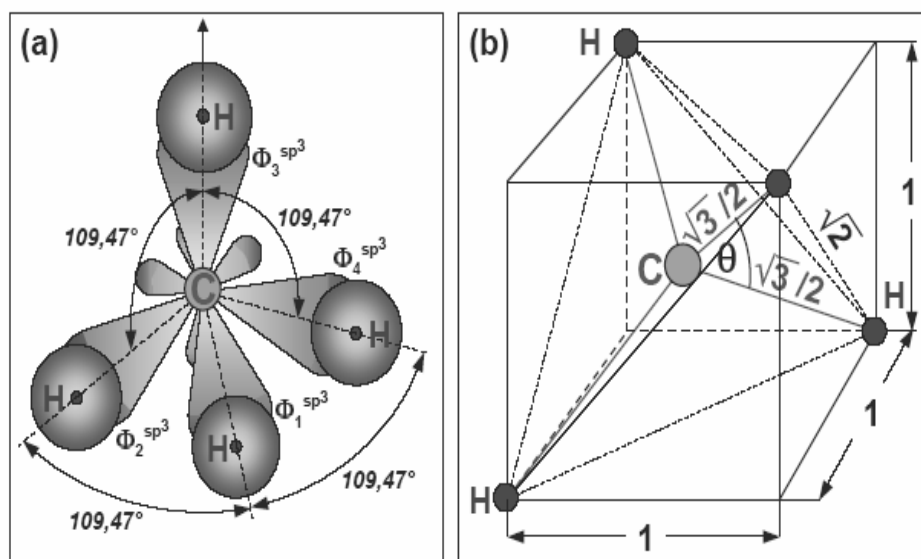


Abbildung 9.22: (a) Orientierung der vier sp^3 -Hybridorbitale bei der Bindung im CH₄-Molekül. (b) Die aus der sp^3 -Hybridisierung resultierende Tetraederstruktur.



Zusammenfassung Hybridtypen

Hybridtyp	Anzahl	Geometrie	Beispiel
sp	2	linear	C ₂ H ₂
sp^2	3	eben, 120°	C ₂ H ₄
sp^3	4	tetraedrisch	CH ₄
sp^2d	4	eben, quadratisch	XeF ₄
sp^3d	5	dreiseitige Doppelpyramide	SF ₄
sp^3d^2	6	Oktaeder	SF ₆

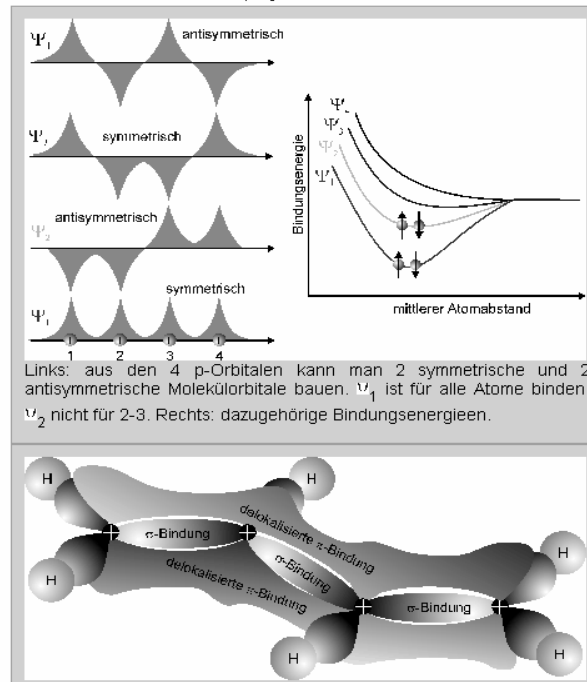
Tabelle 9.1: Hybridisierungstypen, Anzahl der Hybridorbitale und resultierende Molekülgeometrie.



Konjugierte Moleküle

π -Bindungen bilden über viele Atome hinweg gemeinsame (delokalisierte) Molekülorbitale.

Beispiel: Butadien (C_4H_6)

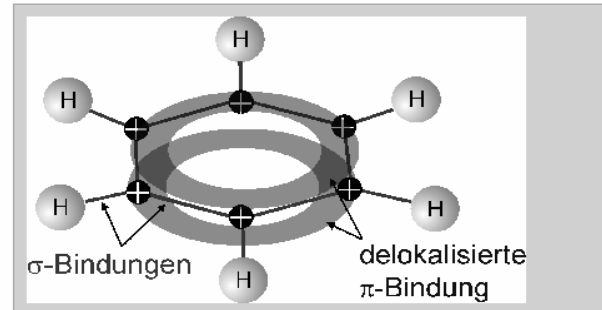


Bindungen im Butadien:

- σ -Bindungen über sp^2 -Hybriden.
- π -Bindung mit 4 delokalisierten Elektronen.

4 Elektronen in dem π -Orbital können sich entlang der Kette frei bewegen => gute Polarisierbarkeit.

Beispiel: Benzol (C_6H_6)



Bindungen im Benzol:

- σ -Bindungen aus sp^2 -Hybriden.
- π -Bindung mit 6 delokalisierten Elektronen

6 Elektronen in dem π -Orbital können sich im Ring frei bewegen => starker Diamagnetismus.

Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

16



Molekülbewegungen

Translation: Die Bewegung des gesamten Moleküls in die drei Raumrichtungen.

Rotation: Drehung des gesamten Moleküls um die drei Drehachsen.

Schwingung: Periodische Bewegung einzelner Atome oder Atomgruppen eines Moleküls relativ zueinander.

Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

17



Molekülschwingungen

Moleküle schwingen, da die Atome nicht starr sondern elastisch, vergleichbar mit Federn in der Mechanik, miteinander verbunden sind.



Wie in der Mechanik gilt auch hier das Hookesche Gesetz:

$$\mathbf{F} = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$$



Freiheitsgrade

Allgemein gilt für **Schwingungsfreiheitsgrade**, wenn N die Anzahl der Atome eines Moleküls ist:

Für lineare Moleküle:

Zahl der Schwingungsfreiheitsgrade = $3N-5$

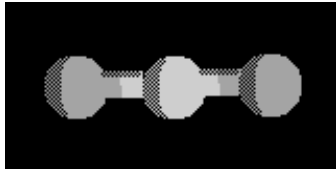
Für nichtlineare Moleküle:

Zahl der Schwingungsfreiheitsgrade = $3N-6$

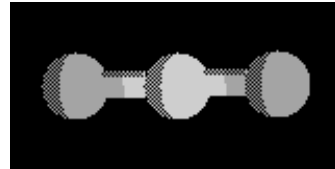


Arten von Molekülschwingungen

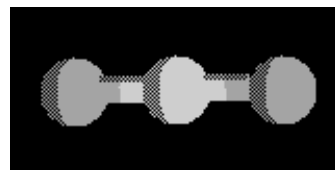
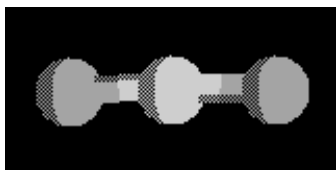
Am Beispiel des CO₂ (Freiheitsgrade der Schwingung: 4)



Symmetrische Valenzschwingung



Asymmetrische Valenzschwingung

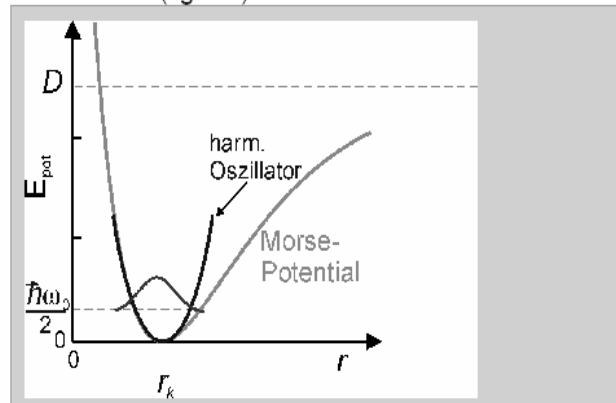


Deformationsschwingungen



Energieniveaus der Schwingungen

Atome können um ihre Gleichgewichtslage schwingen. Näheres Morse-Potential durch harmonischen Oszillator an (vgl.).



Der quantenmechanische Oszillator bestimmt die Schwingungsniveaus:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

Die Dissoziationsenergie muss um die Nullpunktsenergie korrigiert werden:

$$D_e = D - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

Für Übergänge mit $\Delta n = \pm 1$ gilt

$$\Delta E = \hbar\omega_0$$

Beispiele sind

	$\hbar\omega_0$ (eV)
H ₂	0,543
O ₂	0,194
CO	0,268

Für Vibrationsspektren gilt:

- Übergänge liegen im Infraroten.
- Auswahlregel für elektrische Übergänge: $\Delta n = \pm 1$
- Elektrische Übergänge gibt es nur wenn ein Dipolmoment vorhanden ist
- Also keine reinen Vibrationsspektren bei homonuklearen Molekülen.



Morse Potential

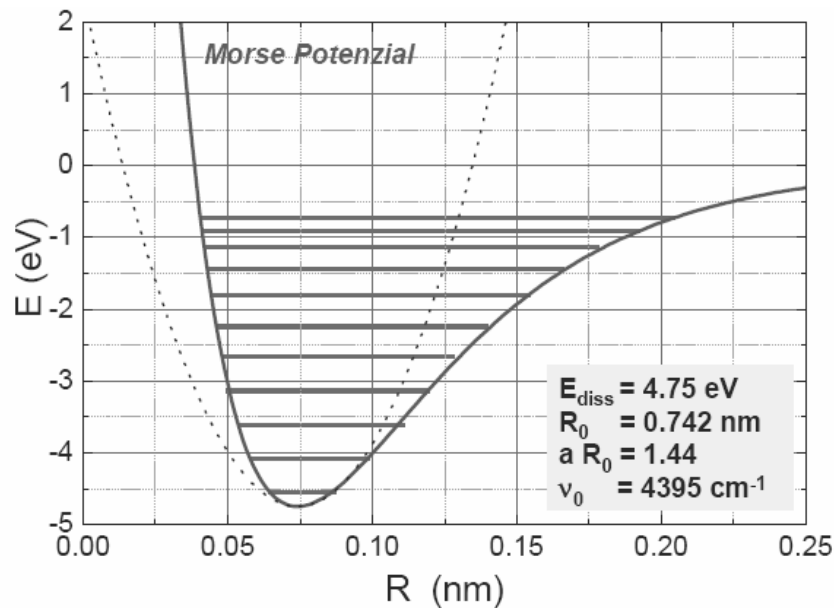
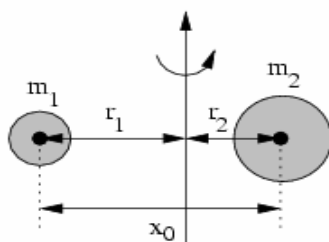


Abbildung 9.17: Das Morse Potenzial. Die angegebenen Parameter entsprechen dem Wasserstoffmolekül. Die parabolische Näherung des Potenzials nach (9.5.21) ist ebenfalls gestrichelt gezeigt. Die Schwingungsniveaus nach (9.5.22) sind als horizontale Linien angedeutet. Für größere v variiert der Abstand zwischen aufeinanderfolgenden Niveaus in Folge der Anharmonizität des Morse Potenzials. Die Dissoziationsenergie stimmt wegen der immer präsenten Nullpunktsfluktuationen nicht mit der Tiefe E_{diss} des Potenzialtopfs überein.



Molekulare Rotation

Energie eines **klassischen starren Rotators** mit Rotationsfrequenz ω , Trägheitsmoment J und Drehimpuls $L = J\omega$



$$E_R = \frac{1}{2} J \omega^2 = \frac{L^2}{2J} = \frac{L^2}{2\mu x_0^2}$$

dabei $J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu x_0^2$

mit $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ wie früher

Erinnere bei Atomen: Gesamtmasse im nahezu punktförmigen Kern konzentriert

Freier Rotator in der Quantenmechanik: direkte Übernahme der Resultate zum Ein-Elektron-System (4.3.2) für $\vec{L}^2$ und ψ_{lm}

$$\vec{L}^2 = l(l+1)\hbar^2$$

Eigenwerte des Drehimpulses; $l = 1, 2, \dots$

$$\psi_{lm} = \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\varphi)$$

Eigenfunktionen der Rotation

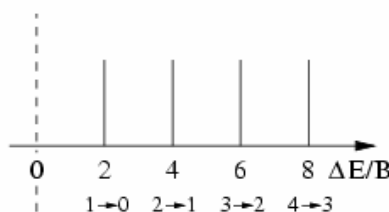
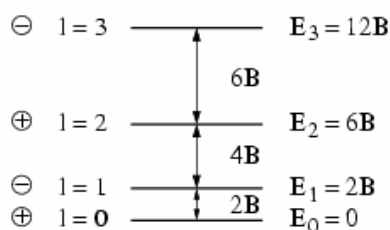
$$\Rightarrow E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} l(l+1)$$

Eigenwerte der Rotationsenergie
(aus $E_R = L^2 / (2\mu r_0^2)$)



Molekulare Rotation

Illustration des Termschemas der Rotation (Abkürzung $B = \hbar^2 / 2\mu x_0^2$)

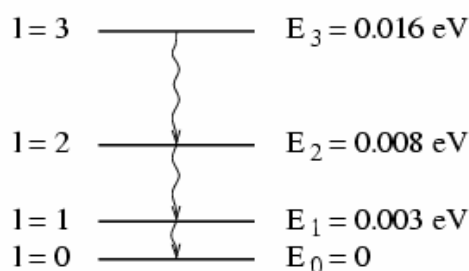


Termenergien $\sim$ quadratisch mit l zunehmend

Termdifferenzen (Übergangsenergien) linear mit l zunehmend

1. Beispiel: HCl-Molekül

Permanentes Dipolmoment (s. 4.4.2) $\Rightarrow$ alle Rotationszustände sind realisiert



$$B = \frac{\hbar^2}{2J} = \frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} \approx 1.3 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

Übergänge mit *Auswahlregel* $\Delta l = \pm 1$ zwischen benachbarten Zuständen (wie im H-Atom); Emission oder Absorption *elektrischer Dipolstrahlung*, dabei Änderung der Parität der Wellenfunktion (wie im H-Atom und bei der Vibration)

Juli 7, 2005

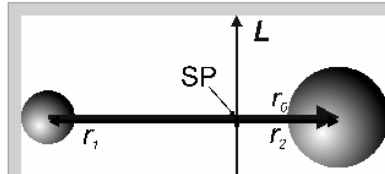
Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

24



Zusammenfassung: Molekulare Rotation

Starre Rotation eines Moleküls mit 2 Atomen



Das Trägheitsmoment ist $I = \sum m_i r_i^2 = \mu r_0^2$

$$I = \sum_{\text{Ionen}} m_i r_i^2 = \mu r_0^2$$

und die Rotationsenergie

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} L^2 = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) = B h c l(l+1)$$

Das Trägheitsmoment wird angegeben als

$$B = \frac{\hbar^2}{4\pi c I}$$

Für Übergänge mit $\Delta l = 1$ gilt:

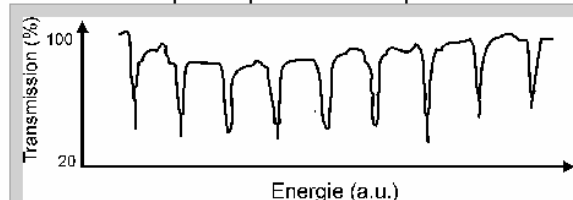
$$\Delta E_{\text{rot}} = 2B h c (l+1)$$

Rotationsniveaus und charakteristische Werte

l		$\hbar^2/2I$ (eV)	B (1/cm)
3	H_2	$8.0 \cdot 10^{-3}$	60,8
2	O_2	$1.8 \cdot 10^{-4}$	1,4
1	CO	$2.4 \cdot 10^{-4}$	1,9
0			

- ▶ Rotationszustände sind bei Zimmertemperatur (1/40 eV) angeregt.
- ▶ Übergänge im Infraroten bis Mikrowellenbereich
- ▶ Auswahlregel für elektrische Übergänge: $\Delta l = \pm 1$
- ▶ Elektrische Übergänge gibt es nur wenn ein Dipolmoment vorhanden ist
- ▶ Also keine reinen Rotationspektren bei homonuklearen Molekülen.

Rotationsabsorptionsspektrum mit äquidistante Linien:



Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

25



Elektronische Übergänge

Übergänge zwischen Zuständen mit verschiedenen Molekülorbits.

- ▶ Atomabstand ändert sich
- ▶ Trägheitsmoment ändert sich
- ▶ Vibrationsenergie $\hbar\omega_0$ ändert sich

Energie Niveaus insgesamt:

$$E = E_e + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

Für die Übergänge gilt:

$$\Delta E = \Delta E_e + \Delta E_n + \Delta E_{rot}$$

mit:

$$\Delta E_n = (n_2 + \frac{1}{2})\hbar\omega_2 - (n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1$$

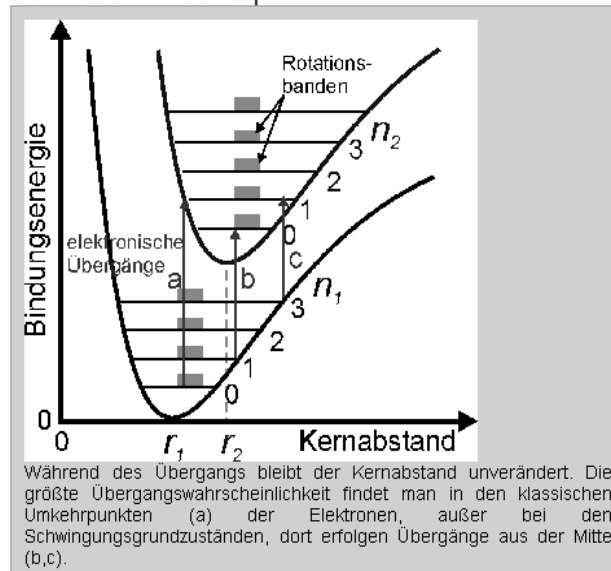
$$\Delta E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I_2}l_2(l_2+1) - \frac{\hbar^2}{2I_1}l_1(l_1+1)$$

Jeder Übergang ist Folge von Banden bestimmt durch $n_a \rightarrow n_b$ und allen $l_a \rightarrow l_b$.

Auswahlregeln:

- ▶ $\Delta l = 0, \pm 1$
- ▶ $\Delta s = 0$
- ▶ Δv nach Franck-Condon-Prinzip

Übergang zwischen elektronischen Zuständen nach Franck-Condon-Prinzip

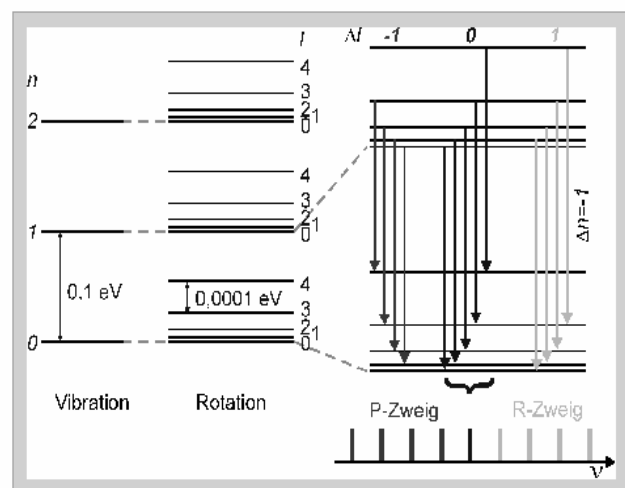


Rotation- und Vibrationspektren

Rotations- und Vibrations-Spektren treten gemeinsam auf:

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

Sie sind aber wegen $E_{rot}/E_{vib} \approx 1000$ spektral getrennt.



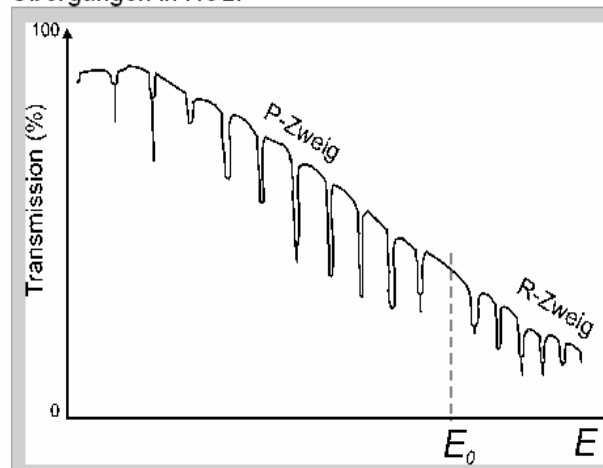
Zu jedem Vibrationsübergang gehört eine Rotationsbande

$$E = \hbar\omega_0 + 2Bc(l+1)$$

mit

- ▶ R-Zweig für $\Delta l = +1$
- ▶ L-Zweig für $\Delta l = -1$

Transmissionsspektrum von Vibrations-Rotations-Übergängen in HCL.



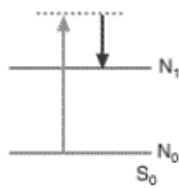


Raman-Streuung

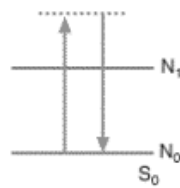
Bestrahlt man Moleküle mit monochromatischem Licht, so wird das eingestrahlte Licht gestreut. Nach Zerlegung des Streulichts zeigen sich neben der intensiven Spektrallinie der Lichtquelle zusätzliche Spektrallinien, die gegenüber der Frequenz der Lichtquelle verschoben sind. Die letzteren Linien nennt man Raman-Linien. Sie sind nach dem indischen Physiker Chandrasekhara Venkata Raman benannt, der im Jahr 1928 als erster über die experimentelle Entdeckung dieser Linien berichtete.

Mol. vorher
im Grundzust.

Dipolanregung

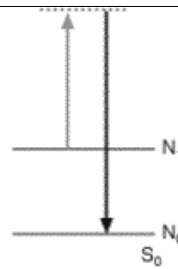


Stokes-
Raman-Streuung



Rayleigh-Streuung

Mol. vorher
nicht im GZ



anti-Stokes-
Raman-Streuung

Raman Spektroskopie
sehr hilfreich bei
Identifizierung von
Kohlenwasserstoff-
Verbindungen ->
Umweltverschmutzung
feststellen durch Laser
auf Schornstein zu
richten!



Beispiel IR Spektrum





Auswahlregeln bei Schwingungen

Anhand von Auswahlregeln kann vorhergesagt werden, welche Schwingungen Infrarot- bzw. Raman-aktiv sind. Da bei der Wechselwirkung von Molekülen mit Photonen der Gesamtdrehimpuls im elektronischen Grundzustand konstant bleiben muß, können nur bestimmte Übergänge induziert werden. Allgemein gilt, daß für ein Molekül mit Symmetriezentrum alle Schwingungen, die symmetrisch zum Symmetriezentrum erfolgen, im IR-Spektrum verboten sind, und alle Schwingungen, die antisymmetrisch sind, im Raman-Spektrum verboten sind. Diese Regel ist als Alternativ-Verbot bekannt.

Eine Infrarot-Absorption wird dann beobachtet, wenn durch die Normalschwingung eine Änderung des Dipolmoments μ im Molekül eintritt. Die Intensität der IR-Schwingungsbande I_{IR} ist proportional zum Quadrat der Änderung des Dipolmoments μ mit der Normalkoordinaten q .

$$I_{IR} \propto \left(\frac{\partial \mu}{\partial q} \right)_0^2$$

Eine Normalschwingung ist Raman-aktiv, wenn während der Schwingung die Polarisierbarkeit α des Moleküls sich ändert. Die Intensität I_{Raman} einer Raman-Bande ist proportional zum Quadrat der Änderung der Polarisierbarkeit α mit der Normalkoordinaten q .

$$I_{Raman} \propto \left(\frac{\partial \alpha}{\partial q} \right)_0^2$$

Als Folge der Auswahlregeln kann für organische und biochemisch interessante Moleküle gesagt werden, daß die Infrarot-Spektroskopie mehr über funktionelle Gruppen aussagt und die Raman-Spektroskopie besonders hilfreich für die Charakterisierung des Kohlenstoffgerüsts ist.



Wärmekapazität

Spezifische Wärme/Molekül bei konstantem Volumen

$$C_V = \left(\frac{\partial E_{\text{ges}}}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{2} f k$$

2-atomige Moleküle

3 Freiheitsgrade der Translation: $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$

2 Freiheitsgrade der Vibration: $E_{\text{vib}} = \frac{1}{2\mu} p_{\text{rel}}^2 + \frac{1}{2} c x_{\text{rel}}^2$

2 Freiheitsgrade der Rotation: $E_{\text{rot}} = \frac{L_x^2}{2J_x}$ sowie $\frac{L_y^2}{2J_y}$

(Rotation um die Symmetrieachse entfällt, da sie quantenmechanisch nicht definierbar ist: keine Randbedingungen für $\Phi(\varphi)$)

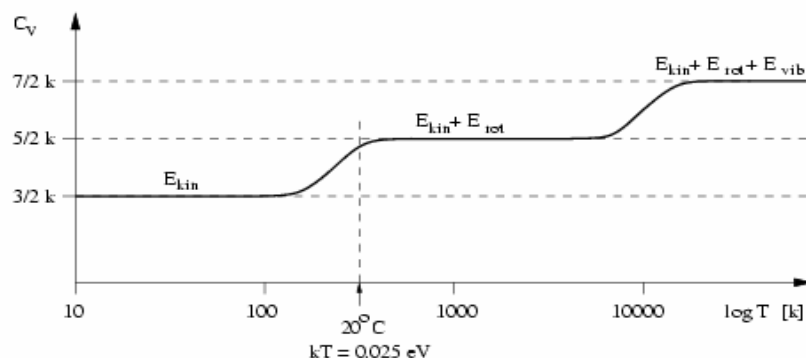
Somit zu erwarten: $C_V = \frac{7}{2} k$



Temperaturabh. der Wärmekapazität

Beobachtung stattdessen: $7/2k$ nur als Grenzfall bei sehr hohen Temperaturen, darunter weniger: **“Einfrieren von Freiheitsgraden”** möglich (bekannt bereits vor 1900, doch damals rätselhaft)

Beispiel: H_2 -Molekül



Empirischer Verlauf von $C_V = C_V(T)$

Interpretation

Im *thermischen Gleichgewicht* bei Temperaturen $>10^4$ K freier Austausch aller Energieformen (kinetisch, Rotation, Vibration) in *inelastischen* Stößen zwischen den Molekülen. Bei kleineren Temperaturen jedoch: Behinderung des Austausches wegen *Quantelung* von Rotation und Vibration.

Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

32



Zusammenfassung

- Bei einem schwingenden und rotierende Molekül ist die kinetische Energie der Kernbewegung im Allgemeinen klein gegenüber der elektronischen Energie. Dies erlaubt eine Separation der Gesamtwellenfunktion (adiabatische Näherung) in ein Produkt aus elektronischer Wellenfunktion und einer Funktion, die die Kernbewegung beschreibt. Die Gesamtenergie eines Moleküls ist in dieser Näherung durch die Summe

$$E = E_{el} + E_{rot} + E_{vib}$$

aus elektronischer, Schwingungs- und Rotationsenergie gegeben.

- Für ein starres Einelektronen-Molekül lassen sich die elektronischen Wellenfunktionen $\Psi(\mathbf{r}, R)$ analytisch bestimmen. In elliptischen Koordinaten faktorisiert die Wellenfunktion in

$$\Psi(\mathbf{r}, R) = M(\mu) \cdot N(\nu) \cdot \Phi(\varphi) .$$

Der Zustand des Elektrons ist durch die beiden Hauptquantenzahlen n_μ und n_ν , die Bahndrehimpuls-Projektionsquantenzahl λ und die Spin-Projektionsquantenzahl m_s eindeutig bestimmt. Wir charakterisieren den Zustand also mit den vier Quantenzahlen:

$$n_\mu, n_\nu, \lambda, m_s$$

Juli 7, 2005

Atomphysik SS 05, Prof. W. de Boer

33



Zusammenfassung

- Die Potenzialkurve $E(R)$ eines zweiatomigen Einelektronen-Moleküls gibt die Summe der mittleren kinetischen Energie $\langle E_{\text{kin}} \rangle$ des Elektrons, seiner mittleren potentiellen Energie und der Kernabstoßung als Funktion des Kernabstandes an. Besitzt $E(R)$ ein Minimum, so ist das Molekül in diesem Zustand stabil (bindender Zustand). Fällt $E(R)$ mit wachsendem R monoton ab, so dissoziiert der Zustand.
- Für ein starres Einelektronen-Molekül lassen sich die elektronischen Wellenfunktionen und die Potenzialkurve $E(R)$ näherungsweise durch Linearkombinationen atomarer Wellenfunktionen bestimmen: LCAO-Methode.

Das symmetrische Molekülorbital Ψ^s ergibt einen bindenden Zustand, während das antisymmetrische Molekülorbital Ψ^a einen abstoßenden, antibindenden Zustand ergibt.

- Das Vielelektronen-Molekül kann näherungsweise mit der Molekülorbital-Näherung oder der Heitler-London-Näherung beschrieben werden. Erstere überbewertet den ionischen Anteil der Molekülbindung, während letztere den kovalenten Anteil überbewertet.

In einer verbesserten Näherung kann das Molekülorbital $\Psi^{s,MO}$ durch eine Wichtung des ionischen und kovalenten Anteils erzielt werden:

$$\Psi^{s,MO} = (1 + \lambda) \Psi_{\text{ionisch}}^s + (1 - \lambda) \Psi_{\text{kovalent}}^s \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$



Zusammenfassung

- Die Rotationsenergie eines zweiatomigen Moleküls kann näherungsweise durch das Trägheitsmoment $I = MR^2$ und die Rotationsquantenzahl J beschrieben werden:

$$E_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}.$$

Durch die Zentrifugalaufweitung des Kernabstandes nimmt I zu und deshalb E_{rot} ab.

- Die Schwingung der Kerne erfolgt in dem Potenzial $E_{\text{pot}}(R)$, das für niedrige Schwingungsenergien durch ein harmonisches Potenzial angenähert werden kann, wodurch das schwingende Molekül als harmonischer Oszillator mit der Schwingungsenergie

$$E_{\text{vib}} = \hbar\omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots$$

behandelt werden kann.

Bei hohen Anregungsenergien versagt die harmonische Näherung. Der Potenzialverlauf lässt sich qualitativ gut mit dem Morse-Potenzial

beschreiben. Durch die Anharmonizität nimmt der Abstand der Schwingungsniveaus mit steigender Schwingungsquantenzahl ab.



Zum Mitnehmen

Moleküle:

Hybridisierung der Atomorbitale
Rotation und Schwingungen
quantisiert und charakteristisch
für jedes Molekül
Übergänge im Mikrowellenbereich