Handout zum Übungsblatt Nr.4

Aufgabe 1

Die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation besagt zum Beispiel zwischen Ort und Impuls:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \,. \tag{1}$$

Schränken wir die Unbestimmtheit des Orts des Elektrons auf den Bereich des Kerns ein, so ist $\Delta x = 2r_K = 2,6 \cdot 10^{-15} A^{\frac{1}{3}}$ m mit der Nukleonenzahl A. Dann ist die Unbestimmtheit seines Impulses:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{8\pi \cdot 1,3 \cdot 10^{-15} A^{\frac{1}{3}}\,\mathrm{m}} \approx \frac{2,03 \cdot 10^{-20}}{A^{\frac{1}{3}}} \frac{\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}}{\mathrm{s}} \,. \tag{2}$$

Dies führt zu einer Unbestimmtheit der kinetischen Elektrons:

$$\Delta E_{\text{kin}} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\left(2,03 \cdot 10^{-20}\,\frac{\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}}{\mathrm{s}}\right)^2}{A^{\frac{2}{3}} \cdot 2 \cdot 9,10 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}} \cdot \frac{1}{1,602 \cdot 10^{-19}} \frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{J}} \approx \boxed{\frac{1,41 \cdot 10^9}{A^{\frac{2}{3}}}\,\mathrm{eV}\,.} \tag{3}$$

Um dafür zu sorgen, dass das Elektron auf diesen Bereich beschränkt bleibt, müsste die kinetische Energie durch eine ebenso große Bindungsenergie ausgeglichen werden, die auch für sehr schwere Kerne im Bereich von MeV liegen würde. Die Bindungsenergie von Elektronen im Atom liegt jedoch im eV-Bereich!

Aufgabe 2

Zunächst berechnen wir die Masse der Gasmoleküle über die mittlere kinetische Energie:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{3}{2} k_B T \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle \,. \tag{4}$$

Daraus folgt

$$m = \frac{3k_B T}{\langle v^2 \rangle} = \frac{3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}\,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} \cdot 320\,\mathrm{K}}{\left(499\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}\right)^2} \approx 5,32 \cdot 10^{-26}\,\mathrm{kg}\,. \tag{5}$$

Mit der atomaren Masseneinheit $1\,\mathrm{u} = 1,66 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg}$ ergibt sich dann eine Molekülmasse von $\boxed{32,1\,\mathrm{u}}$, also handelt es sich wahrscheinlich um O_2. Dann können wir noch die de-Broglie-Wellenlänge berechnen:

$$\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m\sqrt{\langle v^2 \rangle}} = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{\sqrt{3 \cdot 5,32 \cdot 10^{-26}\,\mathrm{kg} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}\,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}} \cdot 320\,\mathrm{K}}} \approx \boxed{2,50 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m}\,.} \tag{6}$$

Aufgabe 3

a)

Damit Beugungseffekte auftreten, sollte die de-Broglie-Wellenlänge des Körpers der Größe der Beugungsöffnung entsprechen:

$$\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{4 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{kg} \cdot 100\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}} \approx \boxed{1,66 \cdot 10^{-33}\,\mathrm{m}\,.} \tag{7}$$

Da die Größe von Atomen im Bereich von 10^{-10} m und die Atomkernen bei 10^{-15} m liegt, kann kein normaler Körper durch eine solche Öffnung passen.

b)

Da die kinetische Energie schon einen nicht unbedingt kleinen Bruchteil der Ruhemasse des Neutrons ausmacht, rechnen wir relativistisch. Aus der Gleichung $E_{\mathrm{kin}} = (\gamma - 1)mc^2$ ergibt sich

$$\gamma = \frac{E_{\mathrm{kin}}}{mc^2} + 1 = \frac{100 \cdot 10^6\,\mathrm{eV}}{940 \cdot 10^6\,\mathrm{eV}} \approx 1,11\,. \tag{8}$$

Damit folgt weiter $v \approx 0,43c$ und

$$\lambda_{\mathrm{dB}} = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{1,67 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg} \cdot 0,43 \cdot 3 \cdot 10^8\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}} \approx \boxed{3,09 \cdot 10^{-15}\,\mathrm{m}\,.} \tag{9}$$

Man könnte also mit solchen Neutronen Atomkerne untersuchen.

c)

Das Elektron nimmt beim Durchlaufen der Spannung eine Energie von 200 eV auf. Da $200\,\mathrm{eV} \ll 511\,\mathrm{keV} = m_{\mathrm{e}}c^2$ können wir nichtrelativistisch rechnen. Die Geschwindigkeit des Elektrons ist gegeben durch:

$$v = \sqrt{\frac{2E_{\mathrm{kin}}}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 200\,\mathrm{eV} \cdot \left(3 \cdot 10^8\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}\right)^2}{511 \cdot 10^3\,\mathrm{eV}}} \approx 8,39 \cdot 10^6\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}\,. \tag{10}$$

Dann ergibt sich die de-Broglie-Wellenlänge zu

$$\lambda_{\mathrm{dB}} = \frac{h}{mv} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js}}{9,10 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg} \cdot 8,39 \cdot 10^6\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}} \approx \boxed{8,68 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{m}\,.} \tag{11}$$

Der Abstand liegt also bereits im Bereich von 1 Å, was der Größenordnung von Atomen entspricht, also auch dem Gitterabstand in Festkörpern.

Aufgabe 4

a)

Mit dem angegebenen Integral ergibt sich die Normierungskonstante:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2\,\mathrm{d}x = N^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) = N^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma^3} \stackrel{!}{=} 1\,, \tag{12}$$

also

$$\boxed{|N| = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}\sigma^{\frac{3}{2}}}\,.} \tag{13}$$

Die Normierungskonstante ist nur betragsmäßig festgelegt, also bis auf eine globale Phase $\exp(\mathrm{i}\varphi)$.

b)

Der Ort, an dem sich das Teilchen am wahrscheinlichsten befindet, ist der mit maximaler Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho(x) = |\phi(x)|^2$. Damit ergibt sich:

$$\frac{\mathrm{d}\varrho(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}|\phi(x)|^2}{\mathrm{d}x} = N^2 \left\{2x \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) - \frac{2x^3}{\sigma^2}\exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right)\right\} = 2N^2 x \left(1 - \frac{x^2}{\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma}^2\right) \stackrel{!}{=} 0\,. \tag{14}$$

Damit ergeben sich die Extremwerte bei $x_1 = 0$ und $x_{2/3} = \pm\sigma$. Mittels der zweiten Ableitung kann man noch nachprüfen, dass x_1 ein Minimum und $x_{2/3}$ Maxima sind ;-)
Der Mittelwert des Teilchenorts ist gerade der Erwartungswert des Ortsoperators, also $\langle\widehat{x}\rangle$. In der Ortsdarstellung gilt $\widehat{x} = x$ und damit

$$\langle\widehat{x}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x)\widehat{x}\phi(x)\,\mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 x\,\mathrm{d}x = N^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^3 \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) = \boxed{0,} \tag{15}$$

da es sich um das Integral über eine zum Ursprung punktsymmetrische Funktion handelt, wobei das Integrationsintervall symmetrisch ist.
Anmerkung: Zwar handelt es sich bei den oben berechneten Werten $x_{2/3}$ um Orte, an denen sich das Teilchen mit größter Wahrscheinlichkeit aufhält. Bei einer Ortsmessung bestimmt man jedoch nach wie vor den Ortserwartungswert $\langle\widehat{x}\rangle$ und man wird $x = 0$ als Mittelwert bzw. **wahrscheinlichsten Wert der Messung** erhalten.

Aufgabe 5

Bohrsche Postulate

1) Es sind nur bestimmte Elektronenbahnen, denen diskrete Energieniveaus E_n (mit $n = 1, 2, \dots$) zugeordnet werden, stabil. Diese ergeben sich aus der **Quantisierungsbedingung** des Drehimpulses (Auswahlregel):

$$L_n = n\hbar\,, \quad n \in \mathbb{N} \cup \{0\}\,. \tag{16}$$

Eine Verallgemeinerung dieser Quantisierungsbedingung ist die **Bohr-Sommerfeld-Bedingung**

$$\oint p\,\mathrm{d}q = nh\,, \tag{17}$$

für ein Paar (p, q) von kanonisch konjugierten Variablen, wobei das Integral über einen geschlossenen Weg im (p, q)-Phasenraum zu berechnen ist. Im Falle der kanonisch konjugierten Variablen (L, φ) und bei Integration über einen Kreis ergibt sich daraus gerade Gl. (**??**). Benutzen wir hier zusätzlich die de-Broglie-Bedingung $\lambda = h/p$, so ergibt sich

$$\oint \frac{h}{\lambda}\,\mathrm{d}q \overset{!}{=} nh \Rightarrow \oint \mathrm{d}q = n\lambda\,, \tag{18}$$

also hängt die Quantisierungsbedingung in Gl. (**??**) mit der anderen Formulierung zusammen, dass die de-Broglie-Wellenlänge des Elektrons ganzzahlig auf die Kreisbahn passen muss.

2) Der Radius der Elektronenbahn ändert sich sprunghaft unter Emission bzw. Absorption eines Lichtquants, dessen Energie $h\nu_{nm}$ der Differenz zwischen zwei Energieniveaus E_n und E_m entspricht, also $h\nu_{nm} = E_n - E_m$.

Dieses Postulat wurde vom **Ritzschen Kombinationsprinzip** von Atomspektren motiviert, das verschiedene Emissions- bzw. Absorptionslinien miteinander in Verbindung bringt. Betrachten wir beispielsweise drei Niveaus der Energien $E_1 < E_2 < E_3$, so sind Übergange $1 \mapsto 2$ und $2 \mapsto 3$ durch Einstrahlung von Lichtquanten der folgenden Frequenz möglich:

$$\nu_{1\mapsto 2} = \frac{E_2 - E_1}{h}\,, \quad \nu_{2\mapsto 3} = \frac{E_3 - E_2}{h}\,. \tag{19}$$

Andererseits gibt es jedoch auch noch eine dritte Absorptionslinie, welche dem direkten Übergang $1 \mapsto 3$ entspricht:

$$\nu_{1\mapsto 3} = \frac{E_3 - E_1}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h} + \frac{E_3 - E_2}{h} = \nu_{1\mapsto 2} + \nu_{2\mapsto 3}\,. \tag{20}$$

Sommerfeld-Modell

Im Sommerfeld-Atommodell ist eine erlaubte Elektronenbahn nicht nur durch ihre Bohrsche Quantenzahl n charakterisiert, sondern es wird noch eine zweite Quantenzahl (Nebenquantenzahl) $l = 0, 1, \dots, n-1$ benötigt, so dass Energie und Drehimpuls festgelegt sind. Die Bahnen mit $n > 0$ und $l = 0$ entsprechen den Bohrschen Kreisbahnen, während die mit $l > 0$ Ellipsen sind. Es gilt außerdem der Zusammenhang $L = (l + 1)\hbar$ (welcher jedoch von der Gleichung $L = \sqrt{l(l + 1)}\hbar$ der modernen Quantenmechanik abweicht).

Rydberg-Atome

Rydberg-Atome sind sehr stark angeregte Atome, die sich in Zuständen mit der Hauptquantenzahl $n \gtrsim 100$ befinden. Solche Atome besitzen folgende Eigenschaften:

- Die Elektronen sind sehr weit vom Kern entfernt und es nur eine sehr kleine Ionisierungsenergie

$$E = \frac{Z^2 R_y hc}{n^2}\,, \quad R_y = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\,, \tag{21}$$

  benötigt, um das Elektron aus dem Atom zu „schlagen". Es Ab $n = 23$ reicht bereits thermische Energie $k_B T$ bei Zimmertemperatur ($T = 293\,\mathrm{K}$) aus, um solche Atome zu ionisieren. Deshalb findet man diese auch nur in der oberen Atmosphäre oder im Weltall.

- Die Elektronen können in guter Näherung klassisch betrachtet werden. Dies entspricht dem **Korrespondenzprinzip**, welches besagt, dass für große Quantenzahlen die quantenmechanische Beschreibung in die klassische Beschreibung übergeht.

- Solche Atome sind sehr langlebig, da sich Ortswellenfunktionen (und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsräume im Ortsraum) der Zustände hoher n nur sehr geringfügig überlappen und damit spontane Übergänge in Zustände mit kleinerem n nur eine kleine Wahrscheinlichkeit haben.