

A2 Quantenphysik

Ende des 19-ten und Anfang des 20-ten Jahrhunderts gab es bei den Versuchen, atomare Phänomene mittels der klassischen Mechanik und der Maxwell'schen Elektrodynamik zu verstehen, prinzipielle Schwierigkeiten.

Einige markante Schwierigkeiten, die dann zur Quantenmechanik führten, werden in den folgenden Abschnitten behandelt. Die systematische Behandlung der QM startet dann mit dem nächsten Kapitel.

1 Hohlraumstrahlung

Hier sei nur ein zusammenfassender Bericht gegeben, Details werden in der Quantenstatistik abgeleitet.

Hohlraum

Die Wände eines Hohlraums seien auf die (absolute) Temperatur T gebracht. Die Atome und Moleküle der Wände strahlen elektromagnetische Wellen in den Hohlraum ab. Diese Wellen treffen ihrerseits wieder auf Wände, werden absorbiert oder reflektiert etc. Dabei stellt sich ein von der Temperatur T abhängiges thermodynamisches Gleichgewicht ein.

Elektromagnetische Strahlung

Die Strahlung im Innern des Hohlraums setzt sich aus elektromagnetischen Schwingungen mit Frequenz ω und Polarisierung $\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}(\omega)$ zusammen:

- Elektrischen Feldstärke: $\vec{E}_\omega(\vec{x}, t) = \Re e \left(\vec{\varepsilon}(\omega) e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})} \right)$
- Magnetischen Feldstärke: $\vec{B}_\omega(\vec{x}, t) = \left(\frac{\vec{k}}{\omega} \right) \times \vec{E}_\omega$

Die Komponenten sind:

- Wellenvektor: \vec{k} , $\|\vec{k}\| \equiv (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)^{1/2} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega(\vec{k})}{c}$.
- Wellenlänge: λ ,
- Lichtgeschwindigkeit: c .

Die elektromagnetische Welle ist transversal: $\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon}(\omega) = 0$.

Spektrale Energiedichte

Die zur Frequenz ω gehörige (spektrale) Energiedichte ist

$$w_\omega(\vec{x}, t) = \frac{\epsilon_0}{2} \vec{E}_\omega^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}_\omega^2,$$

wobei man im thermodynamischen Gleichgewicht auch die (über die Zeit) gemittelte Grösse

$$u_\omega(\vec{x}) := \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau w_\omega(\vec{x}, t) dt.$$

betrachten kann. Wir diskutieren nun verschiedene Antworten, auf die folgende Frage, aus Sicht der klassischen Mechanik wie aus Sicht der Quatenmechanik:

Welche Eigenschaften hat u_ω ?
Speziell, wie hängt u_ω von der Temperatur T ab?

Kirchhoff

Aus thermodynamischen Gründen kann u_ω nicht von \vec{x} abhängen, ferner auch nicht vom Material der Wände, d.h. u_ω ist eine universelle Funktion, die außer von ω nur von T abhängt.

Stehende Wellen

\vec{E}_ω und \vec{B}_ω genügt der Wellengleichung,

$$\frac{1}{c^2} \partial_t^2 \vec{E}_\omega = \Delta \vec{E}_\omega = -\vec{k}^2 \vec{E}_\omega; \quad \partial_t^2 \vec{E}_\omega = -\omega^2 \vec{E}_\omega$$

Analog wie bei einem akustischen Hohlraumresonator oder bei einer schwingenden Saite bilden die elektromagnetischen Wellen stehende Wellen im Hohlraum. Dabei müssen \vec{E}_{tang} und \vec{B}_{norm} an der Wand verschwinden.

Die Anzahl $\Delta N = n(\omega) \Delta\omega$ dieser Wellen im Intervall $\Delta\omega$ kann man abzählen. Pro Volumen erhält man

$$n(\omega) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(\omega - c|\vec{k}|) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int 4\pi k^2 dk \delta(\omega - ck) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \quad (\text{pro Volumen!}).$$

Ist $\bar{E}(\omega, T)$ die mittlere Energie einer stehenden Welle, so hat man

$$u_\omega(T) = n(\omega) \bar{E}(\omega; T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{E}(\omega, T).$$

Strahlungsgesetz von Rayleigh und Jeans

Die stehenden Wellen im Hohlraum entsprechen den Schwingungen eines harmonischen Oszillators, welcher nach der klassischen Statistik die mittlere Energie $\bar{E}(\omega; T) = k_B T$ hat (k_B : Boltzmann'sche Konstante).

Demnach ist (Rayleigh, Jeans):

$$u_\omega(T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T.$$

Der Vergleich mit dem Experiment zeigt, daß diese Formel von Rayleigh und Jeans nur für kleine ω brauchbar ist.

Theoretisch kann diese Formel auch nicht richtig sein, da die Gesamtenergie

$$u(T) = \int_0^\infty u_\omega(T) d\omega \rightarrow \infty$$

divergiert!

Bose-Einstein Verteilung

Durch Vergleich mit dem Experiment und mittels thermodynamischer Überlegungen fand Planck zunächst empirisch die Formel

$$\bar{E}(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}, \quad \hbar = \text{const.}$$

Der Faktor $1/(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)$ wurde später im Rahmen der Quantenstatistik als Verteilungsfunktion für Bosonen hergeleitet.

Energiequanten

$\bar{E}(\omega, T)$ lässt sich auch im Rahmen der (klassischen) statistischen Mechanik begründen, wenn man die (ad-hoc) Annahme macht, dass die Energie eines harmonischen Oszillators gequantelt ist, also nur gewisse festgelegte Werte annehmen kann:

Die Wahrscheinlichkeit $p(E_n)$ dafür, daß sich ein thermodynamisches System mit den möglichen Energiewerten $E_0, E_1, \dots, E_n, \dots$ bei gegebener Temperatur T in einem Zustand mit der Energie E_n befindet ist nach der statistischen Mechanik durch den Boltzmann-Faktor

$$p(E_n) = \frac{e^{-E_n/k_B T}}{\sum_{i=0}^\infty e^{-E_i/k_B T}} = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{i=0}^\infty e^{-\beta E_i}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

gegeben. Für die mittlere Energie $\bar{E}(T)$ gilt deshalb

$$\bar{E}(T) = \sum_{n=0}^\infty E_n p(E_n) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left(\sum_{i=0}^\infty e^{-\beta E_i} \right).$$

Wir nehmen nun an, dass für den harmonische Oszillator die diskreten Energiewerte

$$E_n = n\hat{E}, \quad n = 0, 1, \dots; \quad \hat{E} > 0$$

erlaubt seien. Man erhält eine geometrische Reihe,

$$\sum_{n=0}^\infty e^{-\beta E_n} = \sum_{n=0}^\infty e^{-(\beta\hat{E})n} = \left(1 - e^{-\beta\hat{E}}\right)^{-1},$$

und somit

$$\bar{E}(T) = \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left(1 - e^{-\beta \hat{E}} \right) = \frac{\hat{E} e^{-\beta \hat{E}}}{1 - e^{-\beta \hat{E}}} = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$$

und den Planck'schen Ausdruck für $\bar{E}(T)$, falls $\hat{E} = \hbar \omega$.

Man bekommt also den experimentell richtigen Ausdruck für die "spektrale" Energieverteilung $u_\omega(T)$ der Hohlraumstrahlung, falls man annimmt, daß die Energie der elektromagnetischen Wellen bei vorgegebener Frequenz nur ein ganzzahliges Vielfaches eines "Elementarquantums" $\hbar \omega$ sein kann.

Diese Annahme ist von der klassischen Physik (Mechanik, Elektrodynamik) nicht zu rechtfertigen (Planck selbst hat das jahrelang versucht).

Planck'sche Wirkungsquantum

Die Konstante \hbar hat die Dimension einer Wirkung (Energie \times Zeit). Das "Planck'sche Wirkungsquantum" ist definiert als $h = 2\pi\hbar$. (\hbar ist bequemer für die Quantenmechanik.)
Zahlenwerte:

$$\begin{aligned} \hbar &= 1.054572 \dots \cdot 10^{-34} \text{ J s} \\ &= 6.582 \dots \cdot 10^{-22} \text{ MeV s} . \end{aligned}$$

Eine Wellenlänge von 6000 Å (ngström), $1\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$, typische für Licht im sichtbaren Bereich, entspricht einer Frequenz

$$\omega = ck = c \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \frac{2\pi}{6 \cdot 10^{-6} \text{ m}} 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}} = \pi \cdot 10^{14} \frac{1}{\text{s}} .$$

mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 2,9979246 \cdot 10^8 \text{ m/s}$. Eine Lichtquelle von 100 Watt emittiert bei einer Effizienz von 100%

$$\frac{100}{1.05 \cdot 10^{-34} \cdot \pi \cdot 10^{14}} \approx 30 \times 10^{20} \text{ "Lichtquanten" / sek} ,$$

was eine makroskopisch grosse Zahl ist.

Stefan - Boltzmann'sche Gesetz

Für die Gesamtenergie $u = \int_0^\infty u_\omega d\omega$ erhält man

$$u = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} .$$

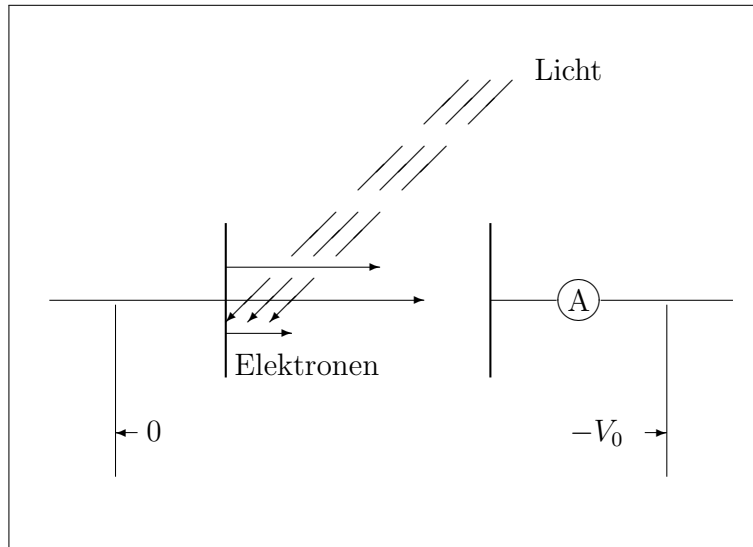
Mit $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ und $\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$ erhält man das Stefan - Boltzmann'sche Gesetz

$$u(T) = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 c^3 \hbar^3} T^4 .$$

Mehr dazu in der Quantenstatistik.

2 Photoelektrische Effekt

Läßt man Licht auf eine Metallplatte(-elektrode) fallen, so werden Elektronen herausgelöst, deren Energie man durch Abbremsen in einem elektrischen Feld (Gegenfeld-Methode) messen, und deren Anzahl man durch Strommessung bestimmen kann.



Dabei stellt sich folgendes heraus:

1. Energie und Intensität

Die Energie der Elektronen ist unabhängig von der Intensität des Lichtes, aber eine lineare Funktion seiner Frequenz ω .

2. Austrittsarbeit

Elektronen werden nur emittiert, falls die Frequenz des Lichtes oberhalb einer bestimmten Schwelle liegt, welche man Austrittsarbeit nennt. Die Grenzfrequenz hängt von der Art des Metalles ab.

3. Photostrom

Die Größe des Photostromes durch \textcircled{A} , d.h. die Anzahl der Elektronen, ist proportional zur Intensität des Lichtes.

Dieser Effekt ist im Rahmen der klassischen Elektrodynamik nicht zu verstehen, die Energie der austretenden Elektronen sollte proportional zur Intensität $\left(\frac{\epsilon_0}{2}\vec{E}_\omega^2 + \frac{1}{2\mu_0}\vec{B}_\omega^2\right)$ des Lichtes sein.

Lichtquanten

Für die Erklärung des Photoeffekts hat Einstein den Nobelpreis erhalten:

Das Licht besteht aus Teilchen (Quanten) mit der Energie $\hbar\omega$, falls das Licht die (Kreis-) Frequenz ω hat. Trifft ein solches Lichtquant auf die Metalloberfläche, so kann

es durch Zusammenstoß mit einem Elektron seine Energie auf dieses übertragen. Ist A die ‐Austrittsarbeit‐ des Elektrons für das betreffende Metall, so gilt die Energiebilanz:

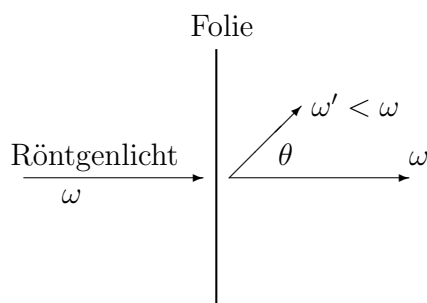
$$\frac{1}{2}m_e\vec{v}_e^2 + A = \hbar\omega .$$

m_e : Masse des Elektrons; \vec{v}_e : Geschwindigkeit des Elektrons.

A hat die Größenordnung eV ($1 \text{ eV} = 1.602177 \dots \cdot 10^{-19} \text{ J}$). Die Intensität des Lichtes ist proportional der Anzahl der Lichtquanten= ‐Photonen‐, d.h. je mehr Photonen auf das Metall fallen, desto mehr Elektronen werden herausgelöst.

3 Compton Effekt

Dieser Effekt ist ein unmittelbarer Ausdruck der Teilchennatur des Lichtes: Läßt man Röntgenstrahlen senkrecht auf eine dünne Metallfolie fallen, so werden nach der klassischen Elektrodynamik die Elektronen in der Folie zu Schwingungen angeregt, deren Frequenz die gleiche wie die des Röntgenlichtes ist.



Die Elektronen sollten als schwingende Dipole Röntgenlicht gleicher Frequenz wieder abstrahlen, und zwar unabhängig von der Richtung θ (s. Skizze). Tatsächlich beobachtet man (Compton) folgendes: Die Frequenz des Lichtes hinter der Folie nimmt mit wachsendem θ ab!

Impuls von Photonen

Wir überlegen uns zunächst, daß aus der speziellen Relativitätstheorie folgt, daß Photonen einen Impuls haben müßen:

$$\text{relativistisch: } E(\vec{p}) = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2} .$$

Die Ruhemasse eines Photons (Lichtgeschwindigkeit) verschwindet, also gilt

$$\text{Photon: } E(\vec{p}) = \hbar\omega = \hbar c|\vec{k}| = c|\vec{p}| .$$

Es folgt dann $|\vec{p}| = \hbar|\vec{k}|$, und da der Ausbreitungsvektor \vec{k} die gleiche Richtung wie \vec{p} hat, ergibt sich

$$\vec{p}_{\text{Photon}} \equiv \vec{p}_\gamma = \hbar\vec{k} , \quad |\vec{k}| = 2\pi/\lambda .$$

Streuung von Photonen an Elektronen

Man betrachte nun den Compton-Prozeß als elastischen Stoß zwischen Photonen und Elektronen. Die Elektronen befinden sich vor dem Stoß in Ruhe.

Ist nun \vec{p}_γ der Impuls des Photons (γ -Quants) vor dem Stoß mit dem Elektron, \vec{p}_γ' sein Impuls nach dem Stoß und \vec{p}_e' der Impuls des Elektrons nach dem Stoß, so lauten Energie- und Impulssatz:

$$\begin{aligned} \hbar\omega + m_e c^2 &= \hbar\omega' + (m_e^2 c^4 + (\vec{p}_e')^2 c^2)^{\frac{1}{2}}, \\ \vec{p}_\gamma &= \vec{p}_\gamma' + \vec{p}_e', \\ m_e &: \text{ Ruhemasse des Elektrons.} \end{aligned}$$

Aus der ersten Gleichung folgt:

$$\begin{aligned} m_e^2 c^4 + (\vec{p}_e')^2 c^2 &= (\hbar\omega - \hbar\omega' + m_e c^2)^2 \\ &= (\hbar\omega - \hbar\omega')^2 + 2m_e c^2 (\hbar\omega - \hbar\omega') + m_e^2 c^4, \\ (\vec{p}_e')^2 &= \frac{\hbar^2 \omega^2}{c^4} - \frac{2\hbar^2 \omega \omega'}{c^4} + \frac{\hbar^2 (\omega')^2}{c^4} + \frac{2m_e}{c^2} (\hbar\omega - \hbar\omega') \end{aligned}$$

Andererseits ergibt der Impulssatz:

$$\begin{aligned} (\vec{p}_e')^2 = (\vec{p}_\gamma - \vec{p}_\gamma')^2 &= (\hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}')^2 \\ &= \frac{\hbar^2 \omega^2}{c^2} + \frac{\hbar^2 (\omega')^2}{c^2} - 2\frac{\hbar\omega}{c} \frac{\hbar\omega'}{c} \cos \theta. \end{aligned}$$

Einsetzen führt zu

$$\begin{aligned} -2\frac{\hbar\omega}{c} \frac{\hbar\omega'}{c} \cos \theta &= -\frac{2\hbar^2 \omega \omega'}{c^4} + \frac{2m_e}{c^2} (\hbar\omega - \hbar\omega') \\ \hbar\omega \omega' (1 - \cos \theta) &= m_e c^2 (\omega - \omega'), \end{aligned}$$

oder, mit $\lambda = 2\pi c/\omega$,

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} (1 - \cos \theta),$$

d.h. die Wellenlänge des abgelenkten Lichtes ist um so größer, je größer der Streuwinkel θ wird. Das Licht hat also ganz eindeutig Teilcheneigenschaften (Impuls, Energie, etc.).

Compton-Wellenlänge

Man kann das "Rückstoß"-Elektron in Koinzidenz mit dem Photon messen (Geiger, Bothe). Die Größe $\lambda_c(e) = \hbar/m_e c = 3.861593 \dots \cdot 10^{-13} m$ bezeichnet man als Compton-Wellenlänge des Elektrons.

4 Materiewellen

Für Licht gelten die fundamentalen Beziehungen

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

zwischen Welleneigenschaften (ω, \vec{k}) auf der einen und den Teilcheneigenschaften (E, \vec{p}) auf der anderen Seite.

Teilchen-Wellen Dualismus

Dieses motiviert die Hypothese (de Broglie), dass man umgekehrt auch Teilchen Welleneigenschaften zuschreiben können, mit

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{\hbar} E, & \vec{k} &= \frac{1}{\hbar} \vec{p}, \\ E &= \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \text{oder} \quad E = c \left(\vec{p}^2 + m^2 c^2 \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

de Broglie Wellenlänge

Wir betrachten Elektron, welche aus der Ruhe auf die Geschwindigkeit $\vec{v} = \vec{p}/m$ gebracht werden, indem man sie eine Potentialdifferenz U durchlaufen läßt. Nach dem Energiesatz gilt

$$\frac{\vec{p}^2}{2m_e} = eU, \quad \frac{1}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \hbar^2 = eU,$$

wobei wir $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ und $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ verwendet haben.

$$\begin{aligned} \lambda_e &= \frac{2\pi\hbar}{(2m_e eU)^{1/2}} \\ &\approx \left(\frac{150}{U} \right)^{1/2} \text{ \AA}, \quad U \text{ in Volt.} \end{aligned}$$

Die ‘de Broglie’-Wellenlänge λ_e der Elektronen ist also eine Funktion der durchlaufenen Spannung U . Bei $U = 10^2, 10^3$ Volt, liegt λ_e in der Größenordnung von Röntgenstrahlen. Experimente mit Elektronenstrahlen (analog zu den Röntgenspektrometern mit Hilfe von Kristallen als Beugungsgittern) haben ergeben, daß man Elektronen (und ebenso anderen atomaren Teilchen) Welleneigenschaften zuschreiben muß: man hat z.B. Interferenzen, Beugungserscheinungen etc. beobachtet. Da $\lambda \sim (1/m)^{1/2}$, so spielt der Wellenaspekt bei makroskopischen Massen keine Rolle.

5 Bohr’sche Atommodell

Streuversuche mit α - Teilchen und Atomen (Geiger, Marsden u.a.) hatten folgendes Atommodell (Rutherford) nahegelegt:

Die Atome bestehen aus einem nahezu punktförmigen positiven Kern (Radien $\leq 10^{-15}m$), um den die Elektronen in relativ weitem Abstand (Radius ca. $10^{-10}m$) “kreisen”.

Atome sind klassisch instabil

Das klassische AtomeModell kann die Streuexperimente gut erklären (Rutherford'sche Streuformel), führte aber zu prinzipiellen Schwierigkeiten bei den Spektren: Beschleunigte Ladungen strahlen nach der Elektrodynamik elektromagnetische Strahlung ab, deren Intensität proportional zum Quadrat der Beschleunigung ist. Die "kreisenden" Elektronen müßten also ständig strahlen und in ca. 10^{-10} sek in den Kern "fallen"; d.h. die Atome wären demnach instabil.

Einen phänomenologischen Ausweg aus dieser Schwierigkeit fand Bohr für wasserstoffartige Atome mit zwei Postulaten.

Interferierende Materiewellen

Wir nehmen an, daß sich die Elektronen als selbstinterferierende Materiewellen auf einer Kreisbahn mit dem Radius r_n um den Kern bewegt. Die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktion des Elektrons ist dann

$$\sim e^{ik(r_n\varphi)},$$

wobei $k = 2\pi/\lambda$ der (noch zu bestimmende) Wellenvektor des Elektron ist. Die Wellenfunktion muss als Funktion des Winkels φ eindeutig sein, also

$$k r_n 2\pi = n 2\pi, \quad r_n = \frac{n}{k}.$$

Für eine feste *Quantenzahl* n ist der Wellenvektor k dadurch bestimmt, dass durch ihn die Gesamtenergie des umlaufenden Elektrons,

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \frac{Ze^2 k}{4\pi\epsilon_0 n}$$

minimal wird (das entspricht einem Gleichgewicht der mechanischen Kräfte), Z ist dabei die Kernladungszahl:

$$\frac{\partial E(k)}{\partial k} = \frac{\hbar^2 k}{m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n} = 0, \quad k = \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n}.$$

Setzen wir dieses Ergebnis in $E(k)$ ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} r_n &= \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{Ze^2 m_e} \\ E_n &= -\frac{1}{2} m_e c^2 \frac{(\alpha Z)^2}{n^2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}. \end{aligned}$$

Die vom Maßsystem unabhängige dimensionslose *Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante* α hat den Zahlenwert $1/(137.035\dots)$.

Spektren

Auf den Bahnen r_n strahlt das Elektron keine Energie ab. Strahlung findet dagegen statt, falls das Elektron von einem Niveau E_{n_2} zu einem Niveau E_{n_1} "springt", und zwar wird dabei Licht mit der Frequenz $\omega = (E_{n_2} - E_{n_1})/\hbar$ abgestrahlt.

Diese Annahme ergibt unmittelbar die *Balmer'sche Formel* für die Spektrallinien des Wasserstoff - Atoms:

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) .$$

Die Postulate 1 und 2 sind nicht aus der Mechanik und Elektrodynamik begründbar. Erst die Existenz des Wirkungsquantums \hbar macht die Stabilität der Atome möglich. Man bezeichnet mit $a_0 \equiv r_1(Z = 1)$ den *Bohr'schen Radius*:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} = 0.529177 \text{ \AA} .$$